Kai Hebeler, Jan Hoppe, Lars Zurek
Achim Schwenk
Institut für Kernphysik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 11

Abgabe der mit (∗) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 18. Januar, Anfang der Vorlesung

11. Januar 2022

Aufgabe P10: Zwei-Minuten-Fragen

1. Kurze Übung zur Bra-Ket-Notation: Leiten Sie die eindimensionale Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung aus der Schrödinger-Gleichung in Bra-Ket-Darstellung her. Was ändert sich an der Herleitung in drei Dimensionen?

   Hinweis: Sie können die in H25 hergeleitete Relation
   $$\langle x|\widehat{P}|x'\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$
   und $\langle x|\widehat{V}|x'\rangle = V(x)\delta(x-x')$ verwenden.

2. Was gibt die „magnetische“ Quantenzahl m an und warum trägt sie diesen Namen?

3. Bestimmen Sie alle Matrixelemente der Operatoren $\widehat{L}_x$ und $\widehat{L}_z$ in der $\{|l,m\rangle\}$-Basis für $l = 1/2$.

   Hinweis: Verwenden Sie die Leiteroperatoren für $\widehat{L}_x$.

4. In welchem $|l,m\rangle$-Zustand befindet sich das Teilchen jeweils, wenn seine Wellenfunktion im Ortsraum wie folgt gegeben ist?
   $$\begin{aligned}\psi_1(\boldsymbol{r}) &= (x+iy)f(r)\,,\\ \psi_2(\boldsymbol{r}) &= (x-iy)f(r)\,,\\ \psi_3(\boldsymbol{r}) &= zf(r)\,.\end{aligned}$$
   Hinweis:
   $$Y_1^{\pm 1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}\,, \qquad Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,.$$

5. Nennen Sie mindestens drei Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta,\phi)$.

Aufgabe H31: Eigenfunktionen der Drehimpulsoperatoren (4.5 Punkte) $(*)$

1. Bestimmen Sie die Normierung N_2^2 der Kugelflächenfunktion $Y_2^2(\theta, \phi) = N_2^2 \sin^2(\theta) e^{2i\phi}$ und konstruieren Sie die Kugelflächenfunktionen $Y_2^1(\theta, \phi)$ und $Y_2^0(\theta, \phi)$ durch Anwendungen von $\widehat{L}_- = -\hbar e^{-i\phi}(\partial_\theta - i\cot(\theta)\partial_\phi)$ auf $Y_2^2(\theta, \phi)$.

LÖSUNG: In dieser Aufgabe werden wir die Normierungskonstante einer bestimmten Kugelflächenfunktion bestimmen und davon ausgehend andere Kugelflächenfunktion mit Hilfe des Absteigeoperators $\widehat{L}_-$ konstruieren.

Zuerst bestimmen wir die Normierungskonstante, d.h. wir lösen das Integral

$$\begin{aligned}
\int_{\partial B_0} dA\, Y_2^{2*}(\theta, \phi) Y_2^2(\theta, \phi) &= \int dA\, |N_2^2|^2 \sin^4\theta && (1)\\
&= \int |N_2^2|^2 \sin^5\theta d\theta d\phi && (2)\\
&= 2\pi |N_2^2|^2 \int_0^\pi \sin^5\theta d\theta && (3)\\
&= 2\pi |N_2^2|^2 \frac{16}{15}\,. && (4)
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich die Normierung zu

$$N_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,. \tag{5}$$

Mit der normierten Funktion können wir nun mittels des Absteigeoperators Kugelflächenfunktionen mit niedrigeren m-Quantenzahlen konstruieren. Es gilt

$$\widehat{L}_- |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\hbar\, |l, m-1\rangle \tag{6}$$

und daher gilt mit der in der Aufgabenstellung angegebenen Darstellung von $\widehat{L}_-$ für die Kugelflächenfunktionen

$$\widehat{L}_- Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\hbar Y_l^{m-1}(\theta, \phi)\,. \tag{7}$$

Hier ist also

$$\begin{aligned}
\sqrt{4}\hbar Y_2^1(\theta, \phi) =& \widehat{L}_- Y_2^2(\theta, \phi) && (8)\\
=& -\hbar\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-i\phi}(\partial_\theta - i\cot\theta\partial_\phi) Y_2^2(\theta, \phi) && (9)\\
=& -\hbar\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-i\phi}(2\sin\theta\cos\theta - 2i^2\cot\theta\sin^2\theta) e^{2i\phi} && (10)\\
=& -4\hbar\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta && (11)
\end{aligned}$$

und damit

$$Y_2^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta\,. \tag{12}$$

Für die Funktion $Y_2^0(\theta,\phi)$ gilt eine analoge Vorgehensweise,

$$\begin{aligned}
\sqrt{6}\hbar Y_2^0(\theta,\phi) =& \widehat{L}_- Y_2^1(\theta,\phi) && (13)\\
&= \hbar\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{-i\phi}(\partial_\theta - i\cot\theta\partial_\phi)e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta && (14)\\
&= \hbar\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(\cos^2\theta - \sin^2\theta - i^2\cot\theta\sin\theta\cos\theta) && (15)\\
&= \hbar\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(2\cos^2\theta - \sin^2\theta) && (16)\\
&= \hbar\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(3\cos^2\theta - 1)\,, && (17)
\end{aligned}$$

also

$$Y_2^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)\,. \tag{18}$$

2. Zeigen Sie, dass $f(x,y) = (x+iy)^m$ eine Eigenfunktion von $\widehat{L}_z$ ist.

Lösung: In dieser Aufgabe ist zu zeigen, dass $f(x,y) = (x+iy)^m$ Eigenfunktion zu $\widehat{L}_z$ ist. Um dies einzusehen verwenden wir die Ortsdarstellung der z-Komponente in Kugelkoordinaten und drücken die Funktion $f(x,y)$ ebenfalls in Kugelkoordinaten aus,

$$\begin{aligned}
\widehat{L}_z(x+iy)^m =& \frac{\hbar}{i}\partial_\phi(\sin\theta\cos\phi + i\sin\theta\sin\phi)^m && (19)\\
&= \frac{\hbar}{i}\sin^m\theta\partial_\phi(e^{i\phi})^m && (20)\\
&= \hbar m(\sin\theta\cos\phi + i\sin\theta\sin\phi)^m && (21)\\
&= \hbar m f(x,y)\,. && (22)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde der θ-Anteil durch den Differentialoperator gezogen, der ja nur auf ϕ wirkt, und dann das Potenzgesetz $(a^r)^s = a^{r\cdot s}$ verwendet. Damit ist gezeigt, dass $f(x,y)$ eine Eigenfunktion zu $\widehat{L}_z$ ist mit der Eigenwertrelation

$$\widehat{L}_z f(x,y) = \hbar m f(x,y)\,. \tag{23}$$

Aufgabe H32: Sphärisch-symmetrisches Potential (5.5 Punkte) (∗)

Die Wellenfunktion eines Teilchens in einem sphärisch-symmetrischen Potential $V(r)$ ist gegeben durch

$$\psi(\boldsymbol{r}) = (x+y+3z)f(r)\,. \tag{24}$$

1. Ist $\psi(\boldsymbol{r})$ eine Eigenfunktion von $\widehat{\boldsymbol{L}}^2$? Falls ja, was ist der Wert für l? Falls nein, was sind mögliche Werte für l, wenn $\widehat{\boldsymbol{L}}^2$ gemessen wird?

LÖSUNG: Wir schreiben die Wellenfunktion in Kugelkoordinaten $\psi(\boldsymbol{r}) = rf(r)(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 3\cos\theta)$. Diese Winkelfunktionen lassen sich vollständig als Kugelflächenfunktionen ausdrücken, da

$$Y_1^{\pm 1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \tag{25}$$

mit $e^{\pm i\phi} = \cos\phi \pm i\sin\phi$:

$$\sin\theta\sin\phi = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1} + Y_1^1\right)\,, \tag{26}$$

$$\sin\theta\cos\phi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1} - Y_1^1\right)\,, \tag{27}$$

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0\,. \tag{28}$$

Damit ist

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}rf(r)\left((i+1)Y_1^{-1} + (i-1)Y_1^1 + 3\sqrt{2}Y_1^0\right) \tag{29}$$

eine Eigenfunktion von $\widehat{\boldsymbol{L}}^2$ mit $l = 1$.

2. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeiten, ein Teilchen in den verschiedenen m-Zuständen zu finden.

LÖSUNG: Aus Gleichung (29) folgt

$$|\psi\rangle \propto (i+1)\,|1,-1\rangle + (i-1)\,|1,1\rangle + 3\sqrt{2}\,|1,0\rangle\,. \tag{30}$$

Wegen $\widehat{L}_z\,|l,m\rangle = m\,\hbar\,|l,m\rangle$ sowie der Orthogonalität der m-Zustände ist

$$\langle\psi|\widehat{L}_z|\psi\rangle \propto |i+1|^2\,\langle 1,-1|\widehat{L}_z|1,-1\rangle + |i-1|^2\,\langle 1,1|\widehat{L}_z|1,1\rangle + |3\sqrt{2}|^2\,\langle 1,0|\widehat{L}_z|1,0\rangle\,. \tag{31}$$

Aus der Bedingung, dass sich die Wahrscheinlichkeiten zu 1 aufsummieren müssen, erhalten wir den Gesamt-Normierungsfaktor zu $|i+1|^2 + |i-1|^2 + |3\sqrt{2}|^2 = 22$ und damit sind die gesuchten Wahrscheinlichkeiten gegeben durch

$$P_0 = \frac{|3\sqrt{2}|^2}{22} = \frac{9}{11}\,, \tag{32}$$

$$P_{\pm 1} = \frac{1}{11}\,. \tag{33}$$

3. Angenommen, $\psi(\boldsymbol{r})$ sei als Eigenzustand mit Energie E bekannt. Bestimmen Sie $V(r)$.

   HINWEIS: Vielleicht ist der Laplace-Operator in der folgenden Schreibweise hilfreich zur Aufstellung der Schrödingergleichung:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\widehat{\boldsymbol{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\,.$$

Lösung: Wir wissen bereits, dass $\psi(\boldsymbol{r})$ eine Eigenfunktion von $\widehat{\boldsymbol{L}}^2$ ist, daher vereinfacht die Schreibweise des Laplace-Operators des Hinweises die folgenden Überlegungen. Da der Winkel- und der Radialteil des Potentials separiert, schreiben wir $\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)F(\theta,\phi)$ und finden nach Anwendung der Eigenwertrelation von $\widehat{\boldsymbol{L}}^2$,

$$\Delta\psi(\boldsymbol{r}) = \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) - \frac{l(l+1)R(r)}{r^2}\right]F(\theta,\phi), \tag{34}$$

wobei wir $l = 1$ bestimmt bereits hatten. Die Schrödingergleichung lautet damit nach Kürzen von $F(\theta,\phi)$,

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) - \frac{2R(r)}{r^2}\right] + V(r)R(r) = ER(r)\,. \tag{35}$$

Umstellen auf $V(r)$ liefert das Ergebnis,

$$V(r) = E - \frac{\hbar^2}{mr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{rR(r)}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR(r))\,. \tag{36}$$

Alternativ mit $R(r) = rf(r)$,

$$V(r) = E + \frac{2\hbar^2}{mrf(r)}\frac{\partial f(r)}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{2mf(r)}\frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2}\;. \tag{37}$$

Aufgabe H33: Halbzahlige l-Werte

Nehmen Sie an, dass halbzahlige Werte für die Drehimpulsquantenzahl $l = \frac{1}{2},\dots$ erlaubt wären. Aus $\widehat{L}_+ Y_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\theta,\phi) = 0$ könnten wir dann schließen, dass

$$Y_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \propto e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}\,. \tag{38}$$

1. Konstruieren Sie $Y_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}$ durch Anwendung von $\widehat{L}_-$ auf $Y_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$.

Lösung: Anwenden der Darstellung von $\widehat{L}_-$ in Kugelkoordinaten gibt direkt

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{-1/2} &\propto e^{-i\phi}\left(-e^{i\phi/2}\frac{\partial}{\partial\theta}\sqrt{\sin\theta} + i\cot\theta\sqrt{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}e^{i\phi/2}\right) \\ &= -e^{-i\phi/2}\frac{\cos\theta}{\sqrt{\sin\theta}}\,. \end{aligned} \tag{39}$$

2. Konstruieren Sie $Y_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}$ nun mit Hilfe von $\widehat{L}_- Y_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} = 0$. Was schließen Sie aus beiden Teilaufgaben?

Lösung: Wir wissen, dass

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m = \hbar m Y_l^m\,. \tag{40}$$

Deshalb ist

$$Y_{1/2}^{-1/2} \propto e^{-i\phi/2} f(\theta)\,. \tag{41}$$

Um $f(\theta)$ zu finden, verwenden wir

$$\widehat{L}_{-} Y_{1/2}^{-1/2} = 0 \Rightarrow \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) Y_{1/2}^{-1/2} = 0\,. \tag{42}$$

Angewendet gibt dies

$$-\frac{i}{2} i \cot\theta f(\theta) - \frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta} = 0 \tag{43}$$

$$\Rightarrow f(\theta) = \sqrt{\sin\theta} \tag{44}$$

$$\Rightarrow Y_{1/2}^{-1/2} \propto e^{-i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}\,. \tag{45}$$

Beide Methoden, $Y_{1/2}^{-1/2}$ zu bestimmen, führen zu einander widersprechenden Ergebnissen und damit zu einem Argument gegen halbzahlige l-Werte für (gewöhnliche) Drehimpulse.