# Theoretische Physik III

**SS 2013** **13.6.2013**
**Blatt IX** **Fälligkeitsdatum 20.6.2013**

Prof. Dr. Wilhelm-Mauch http://qsolid.uni-saarland.de/?Lehre:TP_III

## Übung 1 *Orbitale*

In kugelsymmetrischen Systemen können die Energieeigenzustände in der Produktform $\psi(x) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ ausgedrückt werden. Für wasserstoffähnliche Atome werden die Orbitalanteile der Wellenfunktionen durch Linearkombinationen von Kugelflächenfunktionen $Y_l^m$ dargestellt

$$\begin{aligned} Y_0^0 = \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\tfrac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi},\ Y_1^0 = \sqrt{\tfrac{3}{4\pi}}\cos\theta, \\ Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\tfrac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\tfrac{15}{8\pi}} \sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_2^0 = \sqrt{\tfrac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)\,. \end{aligned} \tag{1}$$

Um die Trigonometrische Funktionen durch die Koordinaten $x, y, z$ zu ersetzen multiplizieren wir Eq. (1) mit $r^l$

$$\begin{aligned} Y_0^0 = \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad rY_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}(x \pm iy),\ rY_1^0 = \sqrt{\tfrac{3}{4\pi}} z, \\ r^2Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\tfrac{15}{32\pi}}(x \pm iy)^2, \quad r^2Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}(x \pm iy)z, \quad r^2Y_2^0 = \sqrt{\tfrac{5}{16\pi}}(3z^2 - r^2)\,. \end{aligned} \tag{2}$$

Die Bedeutung von $r^l$ ist dass wir mit kartesischen Koordinaten arbeiten können. Die gesamte Wellenfunktion hängt auch vom Radialanteil ab, welcher hier nicht angegeben wurde. Die Orbital-Darstellungen erhält man durch Zeichnen der Fläche $r = |Y_l^m|^2$. Erstelle (unter Zuhilfenahme eine Computers)

a) das $s$-Orbital, dass sich auf $Y_0^0$ bezieht [cf., Eq. (1)] *(1 Punkt)*

b) das $p_z$-Orbital, dass sich auf $Y_1^0$ bezieht *(1 Punkt)*

c) das $p_x$-Orbital, dass sich auf $(Y_1^1 + Y_1^{-1})/\sqrt{2}$ bezieht [Für die Beziehung zwischen den Kugelflächenfunktionen und der Notation $p_x$ sei angemerkt, dass $(x+iy)/2+(x-iy)/2 = x$ gilt] *(1 Punkt)*

d) das $d_{x^2-y^2}$-Orbital, dass sich auf $(Y_2^2+Y_2^{-2})/\sqrt{2}$ bezieht [ $\frac{1}{2}[(x+iy)^2+(x-iy)^2] = x^2-y^2$] *(1 Punkt)*

e) das $d_{yz}$-Orbital, dass sich auf $(Y_2^1 - Y_2^{-1})/\sqrt{2}i$ bezieht [$(x+iy)z/2i - (x-iy)z/2i = yz$] *(1 Punkt)*

f) den Kugelzustand für $l = m \gg 1$. *(1 Punkt)*

*Hinweis: In Mathematica sind* SphericalHarmonicY[l,m,$\theta$, $\phi$] *und* SphericalPlot3D *die relevanten Befehle. Man kann den Aufruf* PlotRange→ Full *benutzen um die Gesamtdarstellung zu erhalten.*

## Übung 2 *Eigenzustände eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators*

Betrachte den zweidimensionalen harmonischen Oszillators mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2).$$

Dies ist äquivalent zu

$$\hat{H} = (\hat{n}_x + \hat{n}_y + 1)\,\hbar\omega, \quad \hat{n}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x, \quad \hat{n}_y = \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y.$$

a) Drücke den Operator der $z$-Komponente des Drehimpulses $\hat{L}_z \equiv \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ als Funktion von $\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger, \hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger$ aus. Benutze die Kommutatoren für $\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger, \hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger$ und zeige, dass $\hat{H}$ und $\hat{L}_z$ eine gemeinsame Menge von gleichzeitigen Eigenvektoren haben. *(1 Punkt)*

b) Zeige, dass der Hamiltonoperator durch

$$\hat{H} = (\hat{n}_d + \hat{n}_g + 1)\,\hbar\omega, \quad \hat{n}_d = \hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d, \quad \hat{n}_g = \hat{a}_g^\dagger \hat{a}_g, \quad \hat{a}_g = (\hat{a}_x - i\hat{a}_y)/\sqrt{2}, \quad \hat{a}_d = (\hat{a}_x + i\hat{a}_y)/\sqrt{2}.$$

ausgedrückt werden kann. Schreibe $\hat{L}_z$ in Bezug auf $\hat{n}_d$ und $\hat{n}_g$. *(1 Punkt)*

c) Die Quantenzahlen des Systems werden so gewählt, dass die Eigenwerte von $\hat{H}$ und $\hat{L}_z$ die Form $(n+1)\hbar\omega$ und $m\hbar$ annehmen. Die gleichzeitigen Eingenzustände von $\hat{H}$ und $\hat{L}_z$ können durch $|n_d, n_g\rangle$ ausgedrückt werden. Was sind $n_d$ und $n_g$ in Bezug auf $n$ and $m$? Bestimmt die Quantenzahl $n$ den Zustand des Systems vollständig? Können $n$ und $m$ den Zustand vollständig bestimmen? *(1 Punkt)*

d) In Übung VIII-(2) wurde gezeigt, dass der $n$-te Eigenzustand von $\hat{H}$ $n+1$-fach entartet ist. Wenn die Energie des System $(n+1)\hbar\omega$ ist, was sind dann die möglichen Werte für $(n_d, n_g)$? Was sind die möglichen Werte von $m$? *(1 Punkt)*

## Übung 3 *Euler Winkel*

a) Die Euler-Winkel $\alpha, \beta, \gamma$ drehen die Koordinaten $Oxyz$ auf eine neues Achsensystem $Ox'y'z'$ in den folgenden drei Schritten: (i) Drehung um $Oz$ mit Winkel $\alpha$, sodass $Ox$ auf $ON$ liegt, (ii) Drehung um $ON$ mit Winkel $\beta$, sodass $Oz$ auf $Oz'$ liegt und (iii) Drehung um $Oz'$ mit Winkel $\gamma$, sodass $ON$ auf $Ox'$ liegt. Dies ist in Bild 1 und 2 erklärt. Berechne aus der Untersuchung der Geometrie des Bildes die Winkel $\alpha$, $\beta$ und $\gamma$ als Funktion der Projektionen $Y_3$, $Z_2$, und $Z_3$.
*Hinweis:* $\cos(\alpha)\sin(\beta) = -Z_2$ *und* $\sin(\beta)\cos(\gamma) = Y_3$. *Du kannst* $\sin(\beta)$ *bezüglich der Projektionen ausdrücken wenn du zuerst* $\cos(\beta)$ *in den Bildern identifizierst. (2 Punkte)*

b) Man kann zeigen, dass der Operator, der die Rotation durch die Euler-Winkel $\hat{\mathbf{R}}(\alpha, \beta, \gamma) \equiv \hat{\mathbf{R}}_{z'}(\gamma)\hat{\mathbf{R}}_N(\beta)\hat{\mathbf{R}}_z(\alpha)$ beschreibt, äquivalent ist zu $\hat{\mathbf{R}}(\alpha, \beta, \gamma) \equiv \hat{\mathbf{R}}_z(\alpha)\hat{\mathbf{R}}_x(\beta)\hat{\mathbf{R}}_z(\gamma)$. Die tiefgestellten Indezes beziehen sich auf die Rotationsachse und die Funktionsargumente geben die Größe der Rotation an. Für die Quantenzahl $j = 1/2$ gilt $\mathbf{R}_z(\alpha) = e^{-i\alpha\sigma_z/2}$, $\mathbf{R}_x(\beta) = e^{-i\beta\sigma_z/2}$. Berechne die Rotationen $\hat{\mathbf{R}}(\alpha, \beta, 0)$ und $\hat{\mathbf{R}}(0, \beta, \alpha)$. Beeinflusst die Reihenfolge der Rotationen? das Ergebnis

*(2 Punkte)*

## Übung 4 *Kommutatorbeziehungen*

Betrachte den Drehimpulsoperator $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$. Zeige, dass

a) $[\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{r}}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\mathbf{r}}_k$, *(0.5 Punkte)*

b) $[\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{p}}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\mathbf{p}}_k$, *(0.5 Punkte)*

c) $[\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{p}}^2] = [\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{r}}^2] = 0$, *(0.5 Punkte)*

d) $[\hat{\mathbf{L}}_i, \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = 0$. *(0.5 Punkte)*

wobei $i, j, k \in \{x, y, z\}$ sich auf die Koordinatenachsen beziehen. Der Levi-Civita Tensor $\varepsilon_{ijk}$ ist 1 (-1) für gerade (ungerade) Permutationen von $i, j, k$ und verschwindet wenn mindestens zwei Indizes gleich sind.

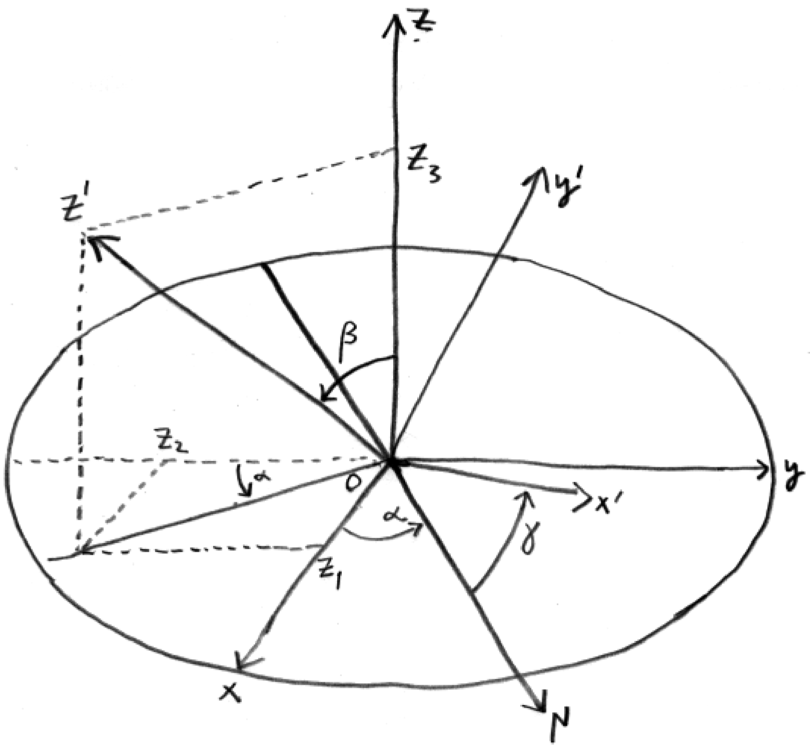


Figure 1.

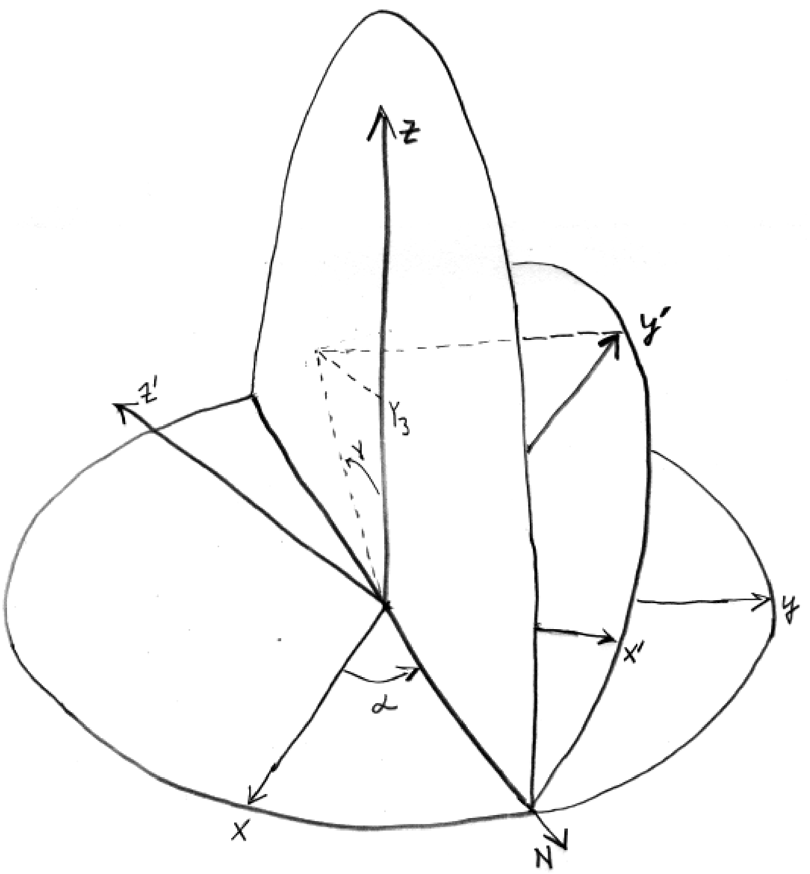


Figure 2.