EP-4 Atom- und Molekülphysik
Universität Erlangen–Nürnberg
SS 2017

Übungsblatt 10 (07.07.2017)

Vorlesungen: Mi 10.15 - 11.55 und gegebenenfalls Fr, 08:15 - 09:55 HE
Übungen: Freitag 10 - 12, SR 00.103, SR 00.732, SR 01.332, SR 01.779, SR 02.729, SRLP 0.179
Webpage der Vorlesung: www.qoqi.nat.fau.de → "teaching"

---

1) Schalenmodell der Elektronenhülle

(a) Die Verteilungen $|Y_l^m|^2$ sind für $l > 0$ anisotrop. Wie ist das in einem kugelsymmetrischen Potenzial möglich?
(b) Summiert man die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ bei gegebener Hauptquantenzahl n über alle erlaubten Werte von l und m, so ergibt sich die gesamte Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zustand n. Sie ist immer kugelsymmetrisch. Deshalb nennt man die Summe aller Zustände für feste Werte von n auch eine Elektronenschale.
Zeigen Sie für $n = 2$ und $n = 3$, dass die Summe der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ über alle erlaubten Werte von l und m in der Tat unabhängig von θ und ϕ ist.

Hinweis: Die benötigten Kugelflächenfunktionen findet man u.a. im Internet unter `http://de.wikipedia.org`.

2) Darstellung des Drehimpulsoperators

(a) Geben Sie den quantenmechanischen Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ in kartesischen Koordinaten im Ortsraum an.
(b) Berechnen Sie $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ in Kugelkoordinaten und drücken Sie $\hat{L}_z = \hat{\vec{L}} \cdot \vec{e}_z$ in diesen Koordinaten aus.
(c) Eine Eigenfunktion des $\hat{L}_z$-Operators ist $\psi = C \cdot r e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{-i\phi}$. Berechnen Sie den zugehörigen Eigenwert.

Tipps:

Zusammenhang zwischen kartesischen und Kugel-Koordinaten: $$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\sin\theta\cos\phi \\ r\sin\theta\sin\phi \\ r\cos\theta \end{pmatrix}$$

Für die Einheitsvektoren $\vec{e}_r$, $\vec{e}_\theta$ und $\vec{e}_\phi$ gilt: $$\vec{e}_r \times \vec{e}_\theta = \vec{e}_\phi \text{ und } \vec{e}_\phi \times \vec{e}_r = \vec{e}_\theta$$

Der Nabla-Operator in Kugelkoordinaten lautet: $$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

3) Kommutatoren und Leiteroperatoren des Drehimpulsoperators

Berechnen Sie die folgenden Kommutatoren für den quantenmechanischen Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$ in kartesischen Koordinaten und geben Sie eine physikalische Interpretation:
(a) $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$ mit $i, j \in \{x, y, z\}$
(b) $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z]$
(c) Zwei nützliche Operatorkombinationen sind

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \text{ und } \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

Man bezeichnet sie als Leiter- oder Stufenoperatoren. Sie besitzen u.a. folgende Eigenschaften:

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_\pm] = 0 \text{ und } [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm,$$

die Sie selbst leicht nachprüfen können.
In der Vorlesung wurden die Zustände $|lm\rangle = Y_l^m(\theta, \phi)$ behandelt, welche Eigenzustände der Komponente $\hat{L}_z$ des Drehimpulsoperators mit Eigenwert $\hbar m$ sind, d.h. die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{L}_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$$

Zeigen Sie, dass die Anwendung von $\hat{L}_+$ auf den Eigenzustand $|lm\rangle$ den Eigenwert von $\hat{L}_z$ um ein $\hbar$ erhöht und die Anwendung von $\hat{L}_-$ auf $|lm\rangle$ den Eigenwert von $\hat{L}_z$ um ein $\hbar$ erniedrigt.
(d) (optional) Der Erwartungswert $\langle\hat{L}_z\rangle$ ist nach Teilaufgabe (c) durch die zugehörigen Eigenwerte $m\hbar$ bestimmt. Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle\hat{L}_{x,y}\rangle = \langle lm|\hat{L}_{x,y}|lm\rangle$ der beiden übrigen Drehimpulskomponenten.
Hinweis: Verwenden Sie die Kommutatorrelation der Drehimpulsalgebra und die Hermitezität der Drehimpulsoperatoren.