

Übungsblatt 3

3.1 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

Gegeben ist eine Wellenfunktion $\psi(\theta, \phi) = A \sin \theta \cos \phi$.

(a) Drücken Sie diese Wellenfunktion durch Kugelflächenfunktionen aus.

Tipp: Wenden Sie die Beziehung $\cos \phi = \frac{1}{2} (e^{+i\phi} + e^{-i\phi})$ an und versuchen Ihr Glück mit den Kugelflächenfunktionen $Y_1^{+1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{+i\phi} \sin \theta$ und $Y_1^{-1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta$.

(b) Bestimmen Sie die Normierungskonstante A . Dazu sollen Sie $|\psi\rangle$ als Linearkombination der Eigenzustände $|1, +1\rangle$ und $|1, -1\rangle$ ausdrücken, d. h. in der Form $|\psi\rangle = c_1|1, +1\rangle + c_2|1, -1\rangle$. Berechnen Sie c_1 und c_2 .

(c) Was ist der Erwartungswert $\langle \hat{L}^2 \rangle$ von $\hat{L}^2$?

(d) Es wird $\hat{L}_z$ gemessen. Welche Messergebnisse sind möglich und was sind ihre entsprechenden Wahrscheinlichkeiten?

Lösung:

(a)

Es gilt

$$\psi(\theta, \phi) = A \sin \theta \cos \phi = A \sin \theta \left(\frac{e^{+i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \right) = A \left(\frac{\sin \theta}{2} e^{+i\phi} + \frac{\sin \theta}{2} e^{-i\phi} \right)$$

Um $Y_1^{\pm 1}$ einzuführen, erweitert man in folgender Weise:

$$\psi = \frac{A}{2} \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \right) \left(-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \right) \sin \theta e^{+i\phi} + \frac{A}{2} \left(\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \right) \left(\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \right) \sin \theta e^{-i\phi}$$

Daraus ergibt sich

$$\psi(\theta, \phi) = -\frac{A}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{+1} + \frac{A}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{-1}$$

(b)

Aus der Teilaufgabe (a) folgt

$$|\psi\rangle = -\frac{A}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} |1, +1\rangle + \frac{A}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} |1, -1\rangle$$

Wegen $\langle 1, 1|1, -1\rangle = \langle 1, -1|1, 1\rangle = 0$ findet man

$$\langle \psi|\psi\rangle = \frac{A^4}{4} \left(\frac{8\pi}{3} \right) \langle 1, 1|1, 1\rangle + \frac{A^4}{4} \left(\frac{8\pi}{3} \right) \langle 1, -1|1, -1\rangle = \frac{A^4}{2} \left(\frac{8\pi}{3} \right)$$

Es soll $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ sein. Also gilt

$$\frac{A^2}{2} \left(\frac{8\pi}{3} \right) = 1 \implies A = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$$

Schließlich erhält man:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= -\frac{A}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} |1, +1\rangle + \frac{A}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{2}} |1, -1\rangle = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} |1, +1\rangle + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} |1, -1\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |1, +1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle \end{aligned}$$

(c)

Wegen

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

und $l = 1$ findet man

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{L}^2 |1, +1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{L}^2 |1, -1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (2\hbar^2) |1, +1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (2\hbar^2) |1, -1\rangle = 2\hbar^2 |\psi\rangle$$

Der Erwartungswert in diesem Zustand ist dann

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{L}^2 | \psi \rangle = 2\hbar^2 \langle \psi | \psi \rangle = 2\hbar^2$$

(d)

Wegen $\hat{L}_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle = \pm\hbar |l, m\rangle$ sind die möglichen Messergebnisse $+\hbar$ und $-\hbar$. Nach Teilaufgabe (b) ist

$$|\psi\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |1, +1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle$$

Also treten die beiden Messergebnisse $+\hbar$ und $-\hbar$ mit den Wahrscheinlichkeiten $\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$ bzw. $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$ auf.

3.2 Spin

Ein fundamentaler quantenmechanischer Drehimpuls ist der *Spin*, der durch die Operatoren $\hat{S}^2$ und $\hat{S}_z$ beschrieben wird. Es gilt

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle, \quad \hat{S}_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle$$

Die Quantenzahl s kann auch halbzahlig sein: $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$. Sie legt die Quantenzahl m_s fest:

$$m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$

Am wichtigste sind die Spin- $\frac{1}{2}$ -Systeme. Elektronen, Protonen, Neutronen, alle Quarks und alle Leptonen haben Spin $\frac{1}{2}$. Hier kann m_s nur den Wert $+\frac{1}{2}$ ("Spin up") oder $-\frac{1}{2}$ ("Spin down") annehmen. Zur besseren Bezeichnung führt man Spaltenvektoren, sog. *Spinoren*, ein:

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Der allgemeinste Zustand ist

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Die Operatoren $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ lassen sich auf folgende Weise durch Matrizen darstellen:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Es sei erwähnt, dass $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ und $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ die berühmten Pauli-Matrizen sind.

(a) Nehmen Sie an, ein Elektron sei im Zustand $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$. Sie messen $\hat{S}_z$. Welche Messergebnisse sind möglich und was sind ihre entsprechenden Wahrscheinlichkeiten?

(b) Sie messen jetzt $\hat{S}_y$. Welche Messergebnisse sind möglich und was sind ihre entsprechenden Wahrscheinlichkeiten?

Tipp: Schreiben Sie den Zustand als Linearkombination der Eigenvektoren χ_1 und χ_2 von $\hat{S}_y$. ($\hat{S}_y \chi_{1,2} = \lambda_{1,2} \chi_{1,2}$).

Lösung:

(a)

Es ist

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{2}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eine Messung von S_z kann nur die Werte $+\frac{1}{2}\hbar$ und $-\frac{1}{2}\hbar$ liefern. Die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten sind $\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right)^2 = \frac{1}{5}$ und $\left(\frac{2}{\sqrt{5}}\right)^2 = \frac{4}{5}$.

(b)

Aus der Definition von Eigenwert und Eigenvektor ergibt sich:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} -i(\hbar/2)\beta \\ i(\hbar/2)\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\alpha \\ \lambda\beta \end{pmatrix}$$

Eigenwerte:

$$-i\frac{\hbar}{2}\beta = \lambda\alpha, \quad i\frac{\hbar}{2}\alpha = \lambda\beta \implies -i\frac{\hbar}{2}\beta = \lambda\left(\frac{2}{i\hbar}\lambda\beta\right) \implies \frac{\hbar^2}{4}\beta = \lambda^2\beta \implies \lambda_1 = +\frac{\hbar}{2}, \quad \lambda_2 = -\frac{\hbar}{2}$$

Aus dem positiven Eigenwert folgt:

$$-i\frac{\hbar}{2}\beta = \frac{\hbar}{2}\alpha \implies \beta = i\alpha \implies \chi_1 = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ i\alpha \end{pmatrix}$$

Aus dem negativen Eigenwert folgt:

$$-i\frac{\hbar}{2}\beta = -\frac{\hbar}{2}\alpha \implies \beta = -i\alpha \implies \chi_2 = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ -i\alpha \end{pmatrix}$$

Die Normierungsbedingung $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ ergibt $\alpha = 1/\sqrt{2}$. Daher sind die Eigenvektoren

$$\chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ +i \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Linearkombination:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2 = c_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} + c_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 + c_2) \\ \frac{i}{\sqrt{2}}(c_1 - c_2) \end{pmatrix}$$

Also gilt

$$\frac{1}{\sqrt{5}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 + c_2), \quad \frac{2}{\sqrt{5}} = \frac{i}{\sqrt{2}}(c_1 - c_2)$$

Daraus folgt

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{5}} - i \frac{2}{\sqrt{5}} \right), \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{5}} + i \frac{2}{\sqrt{5}} \right)$$

Die Wahrscheinlichkeit $+\frac{\hbar}{2}$ zu messen ist

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{5}} - i \frac{2}{\sqrt{5}} \right) \right|^2 = \frac{1}{10} (1 - 2i)(1 + 2i) = \frac{1}{10} (1 + 4) = \frac{1}{2}$$

Die Wahrscheinlichkeit von $-\frac{\hbar}{2}$ ist

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{5}} + i \frac{2}{\sqrt{5}} \right) \right|^2 = \frac{1}{2}$$

3.3 Wasserstoffatom

Ein Elektron in einem Wasserstoffatom sei im Zustand mit der Wellenfunktion

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{32} \left(\sqrt{\frac{1}{6}} Y_2^1 + \sqrt{\frac{1}{2}} Y_2^0 + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_2^{-1} \right)$$

Dabei ist R_{32} eine Funktion des Abstands r des Elektrons vom Kern.

(a) Sie messen $\hat{L}^2$. Welche Werte können Sie finden?

(b) Sie messen $\hat{L}_z$. Welche Werte können Sie finden und mit welcher Wahrscheinlichkeit? Was ist der Erwartungswert von $\hat{L}_z$?

Lösung:

(a)

Eine Messung von $\hat{L}^2$ ergibt $\hbar^2 l(l+1)$. In der Aufgabe haben alle Kugelflächenfunktionen $l = 2$. Es ist also nur das Messergebnis $6\hbar^2$ möglich.

(b)

Wir wissen, dass $\hat{L}_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$ ist. In der Aufgabe nimmt m die Werte -1 , 0 und $+1$ an. Also sind die möglichen Ergebnisse $\hbar$, 0 und $-\hbar$. Die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten sind $\left(\sqrt{\frac{1}{6}}\right)^2 = \frac{1}{6}$, $\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$ und $\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right)^2 = \frac{1}{3}$. Der Erwartungswert ist

$$\langle \hat{L}_z \rangle = (\hbar)\frac{1}{6} + (0)\frac{1}{2} + (-\hbar)\frac{1}{3} = -\frac{\hbar}{6}$$