

Prof. G. Maret, Dr. P. Keim

## Übungsblatt Nr. 10,

Ausgabedatum: Mo. 20.06.2011

Abgabedatum: Fr. 24.06.2011 in der Vorlesung

Besprechung: Mi. 29.06.2011 in den Übungsgruppen

### Aufgabe 20: Direkte Messung von Wellenfunktionen

Besorgen Sie sich folgenden wissenschaftlichen Artikel: J.S. Lundeen et al.: *Direct measurement of quantum wavefunction*, Nature, **474**, 188 (2011). (Ist im Uninetz oder mittels VPN-client kostenlos herunterladbar). Lesen Sie den Artikel und diskutieren sie darüber in der Übungsgruppe!

### Aufgabe 21: Dipolmatrixelemente im H-Atom

Die einfachsten Wasserstoffwellenfunktionen  $\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$  lauten:

$$\Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3/2}} e^{-r/a}, \quad \Psi_{2,0,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3/2}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/(2a)} \quad \text{und} \quad \Psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3/2}} \frac{r}{a} e^{-r/(2a)} \cos \vartheta.$$

$a$  ist der Bohrsche Radius.

a) Berechnen Sie das Dipolmatrixelement

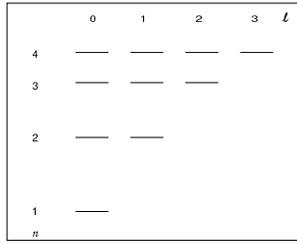
$$\vec{D} = \int d^3\vec{r} \Psi_A^* e\vec{r} \Psi_B = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \Psi_A^*(r, \vartheta, \varphi) e \begin{pmatrix} r \sin \vartheta \cos \varphi \\ r \sin \vartheta \sin \varphi \\ r \cos \vartheta \end{pmatrix} \Psi_B(r, \vartheta, \varphi)$$

für die Fälle:

- i)  $\Psi_A = \Psi_{1,0,0}$  und  $\Psi_B = \Psi_{1,0,0}$ ,
- ii)  $\Psi_A = \Psi_{1,0,0}$  und  $\Psi_B = \Psi_{2,0,0}$ ,
- iii)  $\Psi_A = \Psi_{1,0,0}$  und  $\Psi_B = \Psi_{2,1,0}$ .

(Das  $e$  in der  $\vec{D}$ -Formel bedeutet die Elementarladung.)

b) Nehmen Sie die Ergebnisse von a) als Bestätigung dafür, dass Dipolübergänge zwischen Niveaus beliebiger (hier verschiedener)  $n$  erlaubt sind, aber die  $l$  sich genau um eins unterscheiden müssen, wobei es egal ist, ob das Ausgangs- oder das Endniveau das höhere  $l$  hat. In unserem Wasserstoffmodell (bis jetzt ohne relativistische Korrektur und Spin) gibt es zu jedem  $n$  (angefangen mit 1)  $n$  entartete Zustände mit  $l = 0, \dots, n-1$ . Eine Aufspaltung bzw. Entartung bezüglich  $m$  betrachten wir in dieser Teilaufgabe nicht, d.h. Wir haben in a) nur  $\Psi$  mit  $m = 0$  genommen; also folgern wir, dass es erlaubte Dipolübergänge gibt, wenn  $\Delta m$  und  $m$  Null ist,



aber andere Fälle haben wir noch nicht gepüft. Tragen Sie in dem Schema, dass Zustände bis  $n = 4$  zeigt, alle erlaubten Dipolübergänge durch Verbinden der entsprechenden Balken ein, wobei Sie repräsentativ nur Zustände mit  $m = 0$  betrachten.)

Aufgabe 22: Eigenfunktionen von Drehimpulsoperatoren  
(schriftlich abzugeben, 7 Punkte)

a) Stellen Sie sich als Vorbereitung alle Elemente der Matrix

$$\begin{pmatrix} \partial r / \partial x & \partial r / \partial y & \partial r / \partial z \\ \partial \vartheta / \partial x & \partial \vartheta / \partial y & \partial \vartheta / \partial z \\ \partial \varphi / \partial x & \partial \varphi / \partial y & \partial \varphi / \partial z \end{pmatrix}$$

zusammen.  $(r, \vartheta, \varphi)$  bedeuten Kugel-,  $(x, y, z)$  kartesische Koordinaten.

b) Drücken Sie jetzt  $L_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$ ,  $L_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$  und  $L_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$  in Kugelkoordinaten aus. Benutzen Sie  $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi}$  etc. Zeigen Sie weiterhin, dass mit den Definitionen  $L_+ = L_x + iL_y$  und  $L_- = L_x - iL_y$  gilt:

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad \text{und} \quad L_- = -\hbar e^{-i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} - i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$  sollte sich schon vorher ergeben haben.

c) Überprüfen Sie durch Einsetzen für  $L_+$  und  $L_-$ , dass  $\frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+) + L_z^2$  dem Drehimpulsbetrag  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$  entspricht. Benutzen Sie hierbei *nicht* bereits eine Darstellung der Produkte  $L_+L_-$  und  $L_-L_+$  durch  $L^2$  und  $L_z$ , wie sie sie vielleicht aus der Vorlesung kennen, sondern lediglich die Definitionen aus b). Mit den expliziten Formel aus b) zeigen Sie nun weiter, dass gilt:

$$\frac{L^2}{\hbar^2} = -\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = -\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

d) Die Kugelflächenfunktionen lauten:  $Y_l^l(\vartheta, \varphi) = c_l e^{il\varphi} (\sin \vartheta)^l$ .  $c_l$  ist die Normierungskonstante,  $c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$ . Lernen Sie die alle auswendig ODER prägen Sie sich eine visuelle Darstellung (z.B. animiertes .gif in Wiki) gut ein!  $Y_l^{m-1}$  ergibt sich aus  $Y_l^m$  als

$$Y_l^{m-1} = (\hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)})^{-1} L_- Y_l^m.$$

Es gibt  $2l + 1$  mögliche Werte für  $m$ .  $m$  läuft von  $-l$  bis  $l$ . Berechnen Sie mit der angegebenen Rekursionsformal explizit alle Funktionen  $Y_l^m$  für  $l = 0$ ,  $l = 1$  und  $l = 2$ .