

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I Sommersemester 2017

8. Übungsblatt

21.6.2017

1. Welche Einheit hat der Drehimpuls im SI-Einheitensystem? Vergleichen Sie diese Einheit mit der der Naturkonstanten \hbar .
2. (a) Berechnen sie die Erwartungswerte von $L_x, L_y, L_z, L_x^2, L_y^2, L_z^2$ und L^2 für die Wellenfunktionen der p-Orbitale des Wasserstoffatoms ($l=1$). Bei Vorzugsrichtung entlang der z-Achse sind die entsprechenden Funktionen in Kugelkoordinaten gegeben durch:

$$\begin{aligned}\psi_{p_x} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi & \psi_{p_z} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \\ \psi_{p_y} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \sin \varphi\end{aligned}$$

Benutzen Sie die Definition der Drehimpulsoperatoren in Kugelkoordinaten, um die entsprechenden Erwartungswerte zu berechnen. Deren Definition finden Sie im Vorlesungsskript oder auch in jedem Buch der QM oder bei Wikipedia.

Hinweise:

Sie benötigen eventuell Stammfunktionen, die sich nicht in unserer Liste befinden. Schlagen Sie diese in der Literatur nach oder benutzen Sie ausnahmsweise ein Mathematikprogramm, das analytisch differenzieren bzw. integrieren kann. Bedenken Sie, dass Sie in Kugelkoordinaten integrieren !! (\rightarrow Volumenelement)

- (b) Überlegen sie sich, ob sich ein Teil oder alle Ergebnisse auch ohne Rechnungen hätten begründen lassen, wenn man sich die Symmetrien entlang der Achsen klar macht und die Beziehungen der einzelnen Operatoren untereinander ausnutzt.

Please turn page!!

3. Betrachten Sie obiges Problem nochmals etwas abstrakter. Befinde sich ein physikalisches System in dem Eigenzustand $|l, m\rangle$ zu den Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z . Es gilt also:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ \hat{L}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle\end{aligned}$$

Bechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \hat{L}_x \rangle$ und $\langle \hat{L}_y \rangle$.

Tipp: Benutzen Sie die Vertauschungsrelationen zwischen den Drehimpulskomponenten (z.B. $\hat{L}_x = (i\hbar)^{-1}[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$) und bedenken Sie, dass die Operatoren hermitesch sind.