UNIVERSITÄT PADERBORN
Die Universität der Informationsgesellschaft
Dr. Christian Thierfelder
Dr. Uwe Gerstmann

Physik D – Atom-, Molekül- und Kernphysik
SS 2010
23.04.2010

Übungsblatt 3 - Kugelflächenfunktionen

Abgabe: 30.04.2010 (bis 12:00 in Briefkasten auf N3)
Besprechung: 03.05.2010 und 05.05.2010

1. ***Kugelflächenfunktionen und Orbitale***
Die Winkelabhängigkeit atomarer Wellenfunktionen wird durch die sog. Kugelflächenfunktionen Y_l^m beschrieben:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\vartheta) e^{im\varphi}.$$

Dabei sind die Funktionen P_l^m durch die verallgemeinerten Legendre-Polynome gegeben:

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l$$

(a) Vergleichen Sie die Kugelflächenfunktionen zu $m = 0$ für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen (p, d und f Elektronen). Bestimmen Sie die explizite Form der betreffenden Orbitale $|Y_l^0(\vartheta, \varphi)|^2$. Stellen Sie diese graphisch in Polardiagrammen dar und diskutieren Sie Gemeinsamkeiten sowie die Lokalisierung bzgl. der ausgezeichneten Achsen.

(b) Vergleichen Sie die Kugelflächenfunktionen zu $m = \pm l$ für verschiedene Drehimpulsquantenzahlen (p, d und f Elektronen). Bestimmen Sie die explizite Form der betreffenden Orbitale $|Y_l^{\pm l}(\vartheta, \varphi)|^2$. Stellen Sie jeweils einen Repräsentanten graphisch in Polardiagrammen dar und diskutieren Sie Gemeinsamkeiten sowie die Lokalisierung bzgl. der ausgezeichneten Ebenen.

2. ***Linienform***
Man betrachte einen, ab dem Zeitpunkt $t = 0$ beginnenden, Emissionsprozess. Die Lichtfeldamplitude soll in komplexer Schreibweise, folgende Gestalt haben

$$F(t) = F_0(e^{-\gamma t}e^{i\omega_0 t} + k.k.) \quad (t > 0).$$

a.) Berechnen Sie die Fouriertransformierte $c(\omega)$ von $F(t)$.
b.) Nähern Sie $|c(\omega)|^2$ unter den Annahmen $\omega_0 - \omega \ll \omega_0 + \omega$ und $\gamma \ll \omega_0 + \omega$.
c.) Skizzieren Sie $|c(\omega)|^2$.

3. ***Cubic harmonics – Orbitale in der Chemie und Molekülphysik***
(a) Die in Aufgabe 6 definierten Kugelflächenfunktionen Y_l^m sind i.a. komplexwertige Grössen. Zeigen Sie, daß sich durch geeignete Linearkombination von Y_l^m und Y_l^{-m} ein orthonormiertes System reellwertiger Orbitale (sog. *cubic harmonics*) ergibt:

$$\mathcal{Y}_{l,0} = Y_l^0$$

$$\mathcal{Y}^+{}_{l,|m|} = \frac{i^{|m|}}{\sqrt{2}} \left(Y_l^{-|m|} + Y_l^{|m|} \right)$$

$$\mathcal{Y}^-{}_{l,|m|} = \frac{i^{|m|-1}}{\sqrt{2}} \left(Y_l^{-|m|} - Y_l^{|m|} \right)$$

D.h. zeigen Sie, daß die $\mathcal{Y}^-{}_{l,|m|}$, $\mathcal{Y}^+{}_{l,|m|}$ bzgl. Winkelintegration normiert und orthogonal sind.

(b) Geben Sie die explizite Form der *cubic harmonics* $\mathcal{Y}^+{}_{l,|m|}(\vartheta, \varphi)$ für p und d Elektronen ($l = 1$ und $l = 2$) an. Stellen Sie die zugehörigen Orbitale $|\mathcal{Y}^+{}_{l,|m|}(\vartheta, \varphi)|^2$ in ihrer vollen Winkelabhängigkeit graphisch dar.

(c) Berechnen Sie $\mathcal{Y}^+{}_{l,|m|}(x, y, z)$ für p und d Elektronen, d.h. geben Sie die *cubic harmonics* aus Aufgabenteil (b) in kartesischen Koordinaten $(x, y, z) = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$ an.