Physikalisches Institut
Universität Bonn
Theoretische Physik

Übungsblatt 10
31.05.2019
SS 2019

# Quantenmechanik

Dr. Hans Jockers und Christoph Nega

http://www.th.physik.uni-bonn.de/klemm/quantenmechanik/index.php

Abgabedatum: 07.06.2019

–Hausaufgaben–

## 10.1 Legendre-Polynome und Kugelflächenfunktionen

Wir möchten in dieser Aufgabe die Kugelflächenfunktionen mit analytischen Methoden herleiten. In der Vorlesung wurden sie bereits als Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators eingeführt. Die damit verbundenen Eigenschaften wie Orthonormalität und Vollständigkeit möchten wir mit dieser Aufgabe erneut, nun aber mit Mitteln der Analysis, untersuchen.
Der Start unserer Betrachtungen ist durch die *Laplacegleichung* $\Delta\Phi = 0$ gegeben. Wir möchten zeigen, dass die Lösungen des Winkelanteils dieser Gleichung durch die Kugelflächenfunktionen gegeben sind.

a) Beginnen Sie zunächst damit, die Drehimpulsoperatoren $\hat{L}_{x_1}, \hat{L}_{x_2}, \hat{L}_{x_3}, \hat{L}_\pm$ und $|\hat{\vec{L}}|^2$ in Kugelkoordinaten $\vec{x} = \left(r\cos\phi\sin\theta, r\sin\phi\sin\theta, r\cos\theta\right)^t$ zu schreiben. Zeigen Sie damit, dass der *Laplaceoperator* $\Delta$ geschrieben werden kann als

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}|\hat{\vec{L}}|^2 \ .$$

(*2 Punkte*)

b) Aus Aufgabenteil a) lässt sich erkennen, dass in Kugelkoordinaten die partielle *Laplacegleichung* $\Delta\Phi = 0$ separiert werden kann. Zeigen Sie mit Hilfe eines Separationsansatzes, dass $\Delta\Phi = 0$ auf drei gewöhnliche Differentialgleichungen

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2}Q(\phi) = -m^2 Q(\phi) \ , \quad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}U(r) = \frac{l(l+1)}{r^2}U(r) \text{ und}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P(x)\right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right)P(x) = 0 \quad \text{mit } x = \cos\theta \ , \tag{1}$$

zurückgeführt werden kann. In der Vorlesung wurde bereits argumentiert, dass $l \in \mathbb{N}$, $|m| \leq l$ und $m \in \mathbb{Z}$ gilt. Die Gleichung (1) wird auch *verallgemeinerte Legendregleichung* genannt.

(*2 Punkte*)

c) Lösen Sie die Differentialgleichung für $Q(\phi)$. Beschreiben Sie die Symmetrie des Problems, wenn $m = 0$ ist. Lösen Sie außerdem die Differntialgleichung für $U(r)$.

(*1 Punkt*)

Für den Fall $m = 0$ geht die Differentialgleichung (1) in die *Legendregleichung*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_l(x)\right) + l(l+1)P_l(x) = 0 \tag{2}$$

über. Hierbei handelt es sich um eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung mit singulären Stellen bei $x = \pm 1$.

(d) Zeigen Sie, dass für $l \in \mathbb{N}$ die Lösungen zu (2) Polynome sind.

(*1 Punkt*)

Da die Lösungen für $l \in \mathbb{N}$ Polynome sind, sind diese auch an den singulären Stellen der Differentialgleichung (2) endlich. Normiert man diese Lösungen mit $P_l(1) = 1$ so erhält man das *l-te Legendre-Polynom*.

(e) Beweisen Sie, dass die *Legendre-Polynome* als

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^l$$

geschrieben werden können. Diese Identität wird auch Rodrigues Formel genannt. Berechnen Sie für $l = 0, 1, 2$ die *Legendre-Polynome*. Bestimmen Sie die Parität der *Legendre-Polynome* $P_l$ bezüglich $x \mapsto -x$.

(*+3 Bonuspunkte*)

(f) Folgern Sie weiter aus der Rodrigues Formel die Identität

$$P'_{l+1}(x) - P'_{l-1} = (2l+1)P_l(x) \ .$$

(*+1 Bonuspunkt*)

(g) Zeigen Sie, dass die *Legendre-Polynome* orthogonal auf $L^2([-1,1])$ sind, das heißt,

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)P_{l'}(x)\ \mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \ .$$

<u>*Hinweis*:</u> Nutzen Sie die *Legendregleichung*, um die Orthogonalität der *Legendre-Polynome* zu zeigen und die Rodrigues Formel zur Berechnung der Normierung. Es kann nützlich sein, die Integralidentität $\int_{-1}^{1}(1-x^2)^l \ \ \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\frac{\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+\frac{3}{2})}$ zu verwenden.

(*2 Punkte*)

(h) Argumentieren Sie, dass die *Legendre-Polynome* $P_l(x)$ eine Basis für den Hilbertraum $L^2([-1,1])$ bilden. Durch sukzessive Orthogonalisierung der Monome $\{1, x, x^2, x^3, \ldots\}$ bezüglich des Skalarproduktes auf $L^2([-1,1])$ bekommt man (bis auf Normierung) die *Legendre-Polynome*. Vollziehen Sie dies für die Monome $\{1, x, x^2\}$.
<u>*Hinweis*:</u> Verwenden Sie das Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren.

(*1 Punkt*)

Nachdem wir uns nun den Spezialfall $m = 0$ angeschaut haben und die *Legendre-Polynome* eingeführt haben, betrachten wir nun wieder den allgemeinen Fall $m \in \mathbb{N}$.

(i) Zeigen Sie, dass der Ansatz $P(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} H(x)$ mit Gleichung (1) auf die Differentialgleichung

$$(1-x^2)H''(x) - 2x(m+1)H'(x) + (l(l+1) - m(m+1))H(x) = 0 \tag{3}$$

führt.

(*1 Punkt*)

Ebenso wie für die *Legendregleichung* kann man für die *verallgemeinerte Legendregleichung* argumentieren, dass für $l \in \mathbb{N}$, $|m| \leq l$ und $m \in \mathbb{Z}$ die Lösungen Polynome sind, welche auch als *verallgemeinerten Legendre-Polynome* bezeichnet werden. Diese sind an den Stellen $x = \pm 1$ endlich.

(j) Zeigen Sie, dass die *verallgemeinerte Legendregleichung* durch die Polynome

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_l(x) \quad \text{mit } m > 0$$

gelöst wird. Beweisen Sie außerdem, dass diese Polynome auch durch

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}} (x^2-1)^l \quad \text{mit } m > 0 \tag{4}$$

geschrieben werden können.
*Hinweis:* Bestimmen Sie eine Differentialgleichung für $H'(x)$ und vergleichen Sie mit der Differentialgleichung für $H(x)$.

(*1 Punkt*)

Beachten Sie, dass Gleichung (4) sogar für $l \in \mathbb{N}$, $|m| \leq l$ und $m \in \mathbb{Z}$ korrekt ist.

(k) Schauen Sie sich an, wie sich die *vergallgemeinerte Legendregleichung* (1) unter $m \to -m$ verhält. Rechtfertigen Sie dadurch die Definition

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \ .$$

(*1 Punkt*)

(l) Zeigen Sie, dass die *verallgemeinerten Legendre-Polynome* die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^{1} P_l^m(x) P_{l'}^m(x) \ \mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}$$

erfüllen.

(*2 Punkte*)

Wir definieren nun die Kugelflächenfunktionen als

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \mathrm{e}^{im\phi} \ .$$

(m) Berechnen Sie zunächst für $l \leq 2$ die Kugelflächenfunktionen. Zeigen Sie weiter, dass $Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l,-m}$ und das Verhalten unter Parität $Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$, welches bedeutet, dass $Y_{lm}(-\vec{e}_r) = (-1)^l Y_{lm}(\vec{e}_r)$.

(*1 Punkt*)

(n) Zeigen Sie, dass die Kugelflächenfunktionen ein orthonormales System von $L^2(S^2)$ bilden, das heißt, dass

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y^*_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi)\ \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

gilt.

*(1 Punkt)*

(o) Die Kugelflächenfunktionen bilden eine Basis für den Hilbertraum $L^2(S^2)$ bilden. Durch sukzessive Orthogonalisierung der linear unanhängigen, homogenen Polynome $\hat{x}_1^a \hat{x}_2^b \hat{x}_3^c$ mit $a+b+c \leq n$ und $\hat{x}_i = \frac{x_i}{r}$ kann man die Kugelflächenfunktionen (bis auf Normierung) berechnen. Verifizieren Sie dies anhand der folgenden Polynome $\{1, \hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2, \hat{x}_3^2, (\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)\hat{x}_3, (\hat{x}_1 \pm i\hat{x}_2)^2\}$. Begründen Sie, warum es nur fünf Polynome zweiten Grades gibt und nicht wie naive erwartet sechs $\{\hat{x}_1^2, \hat{x}_2^2, \hat{x}_3^2, \hat{x}_1\hat{x}_2, \hat{x}_1\hat{x}_3, \hat{x}_2\hat{x}_3\}$.

*(2 Punkte)*

(p) Zeigen Sie abschließend, dass die Operatoren $\hat{L}_z, |\hat{\vec{L}}|^2$ und $\hat{L}_\pm$ die bereits algebraisch hergeleiteten Eigenschaften

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\phi) &= \hbar m Y_{lm}(\theta,\phi) \\
|\hat{\vec{L}}|^2 Y_{lm}(\theta,\phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi) \\
\hat{L}_\pm Y_{lm}(\theta,\phi) &= \hbar\sqrt{(l\mp m)(l+1\pm m)}\, Y_{lm\pm 1}(\theta,\phi)
\end{aligned}$$

haben.

*(+2 Bonuspunkte)*

## 10.2 Drehimpulsoperator und Drehungen

Betrachten Sie folgende Drehung in $\mathbb{R}^3$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} .$$

Zeigen Sie, dass diese (endliche) Drehung durch den unitären Operator $\hat{R}_x(\theta) = \mathrm{e}^{i\frac{\theta \hat{L}_x}{\hbar}}$ gegeben ist, das heißt, für eine Wellentunktion im Ortsraum $\mathbb{R}^3$ gilt

$$\varphi(x',y',z') = \hat{R}_x(\theta)\varphi(x,y,z) .$$

*(2 Punkte)*