Lösungen 10. Übungsblatt Quantenmechanik

Aufgabe 1: Die Legendre-Polynome P_ℓ und die zugeordneten Legendre-Polynome P_ℓ^m sind gegeben durch die Gleichungen (11) und (13,14) aus dem week10a.pdf, das waren die folgenden Formeln:

$$P_\ell(x) \;=\; \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!}\left(\frac{d}{dx}\right)^\ell (1-x^2)^\ell\,, \quad \ell \;=\; 0,1,2,\cdots \tag{1}$$

$$P_\ell^m(x) \;=\; (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^m P_\ell(x) \tag{2}$$

$$\;=\; \frac{(-1)^{\ell+m}}{2^\ell \ell!}\,(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{\ell+m}(1-x^2)^\ell\,, \quad m=-\ell,-\ell+1,\cdots,+\ell \tag{3}$$

Dabei gilt

$$P_\ell^{-m}(x) \;=\; (-1)^m\,\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\,P_\ell^m(x) \tag{4}$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ waren dann gegeben durch die Gleichungen (16,18) aus dem week10a.pdf,

$$Y_{\ell m}(\varphi,\theta) \;=\; c_{\ell,m}\,e^{+im\varphi}\,P_\ell^m(\cos\theta) \tag{5}$$

mit der Normierungskonstanten

$$c_{\ell,m} \;=\; \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \tag{6}$$

a) Wir haben mit (1)

$$P_0(x) \;=\; 1$$

$$P_1(x) \;=\; \frac{-1}{2}\,\frac{d}{dx}(1-x^2) \;=\; x$$

$$P_2(x) \;=\; \frac{+1}{4\cdot 2}\left(\frac{d}{dx}\right)^2(1-x^2)^2 \;=\; \frac{1}{8}\,\frac{d}{dx}\left\{\,2(1-x^2)(-2x)\,\right\}$$

$$\;=\; -\frac{4}{8}\,\frac{d}{dx}\left\{\,x-x^3\,\right\} \;=\; -\frac{1}{2}\,(1-3x^2) \;=\; \frac{3x^2-1}{2}$$

Damit bekommen wir

$$(P_0,P_2) \;=\; \textstyle\int_{-1}^1 P_0(x)\,P_2(x)\,dx \;=\; \int_{-1}^1 \frac{3x^2-1}{2}\,dx \;=\; \frac{x^3-x}{2}\,\Big|_{-1}^1 \;=\; 0$$

b) Wir bekommen mit (2)

$$\begin{aligned} P_\ell^0(x) &= P_\ell(x) \\ P_\ell^1(x) &= (-1)(1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} P_\ell(x) \\ P_\ell^2(x) &= (1-x^2)\left(\frac{d}{dx}\right)^2 P_\ell(x) \end{aligned}$$

Also,

$$\begin{aligned} P_1^1(x) &= (-1)(1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} x &= -\sqrt{1-x^2} \\ P_1^{-1}(x) &\overset{(4)}{=} -1\,\frac{0!}{2!}\,P_1^1(x) &= \frac{1}{2}\sqrt{1-x^2} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} P_2^1(x) &= (-1)(1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx}\frac{3x^2-1}{2} &= -3x\sqrt{1-x^2} \\ P_2^2(x) &= (1-x^2)\left(\frac{d}{dx}\right)^2 \frac{3x^2-1}{2} &= +3\,(1-x^2) \\ P_2^{-1}(x) &\overset{(4)}{=} (-1)\,\frac{1!}{3!}\,P_2^1(x) &= +\frac{1}{2}\,x\sqrt{1-x^2} \\ P_2^{-2}(x) &\overset{(4)}{=} +\frac{0!}{4!}\,P_2^2(x) &= \frac{1}{8}\,(1-x^2) \end{aligned}$$

Insgesamt also,

$P_\ell^{(m)}(x)$	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=2$
$m=-2$			$1/8(1-x^2)$
$m=-1$		$1/2\sqrt{1-x^2}$	$1/2x\sqrt{1-x^2}$
$m=0$	1	x	$1/2(3x^2-1)$
$m=1$		$-\sqrt{1-x^2}$	$-3x\sqrt{1-x^2}$
$m=2$			$3(1-x^2)$

Und mit $x=\cos\theta$ als Argument:

$P_\ell^{(m)}(\cos\vartheta)$	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=2$
$m=-2$			$1/8\sin^2\vartheta$
$m=-1$		$1/2\sin\vartheta$	$1/2\sin\vartheta\cos\vartheta$
$m=0$	1	$\cos\vartheta$	$1/2(3\cos^2\vartheta-1)$
$m=1$		$-\sin\vartheta$	$-3\sin\vartheta\cos\vartheta$
$m=2$			$3\sin^2\vartheta$

c) Mit (5),

$$Y_{\ell m}(\varphi,\theta) = c_{\ell,m}\, e^{+im\varphi}\, P_\ell^m(\cos\theta)$$

bekommen wir

$$\begin{aligned}
Y_{00}(\varphi,\theta) &= c_{00} \\
Y_{10}(\varphi,\theta) &= c_{10}\ \cos\theta \\
Y_{11}(\varphi,\theta) &= -\,c_{11}\ e^{+i\varphi}\ \sin\theta \\
Y_{1,-1}(\varphi,\theta) &= +\frac{c_{1,-1}}{2}\ e^{-i\varphi}\ \sin\theta
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
Y_{20}(\varphi,\theta) &= \frac{c_{20}}{2}\ (3\cos^2\theta - 1) \\
Y_{21}(\varphi,\theta) &= -\,3\,c_{21}\ e^{+i\varphi}\ \sin\theta\cos\theta \\
Y_{22}(\varphi,\theta) &= +\,3\,c_{22}\ e^{+i\,2\varphi}\ \sin^2\theta \\
Y_{2,-1}(\varphi,\theta) &= +\frac{c_{2,-1}}{2}\ e^{-i\varphi}\ \sin\theta\cos\theta \\
Y_{2,-2}(\varphi,\theta) &= +\frac{c_{2,-2}}{8}\ e^{-i\,2\varphi}\ \sin^2\theta
\end{aligned}$$

mit den Normierungskonstanten (6),

$$c_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}$$

Also,

$$\begin{aligned}
c_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
c_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sqrt{\frac{1!}{1!}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \\
c_{11} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sqrt{\frac{0!}{2!}} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \\
c_{1,-1} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sqrt{\frac{2!}{0!}} = \sqrt{\frac{3}{2\pi}}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
c_{20} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{2!}{2!}} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \\
c_{21} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{1!}{3!}} = \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \\
c_{22} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{0!}{4!}} = \sqrt{\frac{5}{96\pi}} \\
c_{2,-1} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{3!}{1!}} = \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \\
c_{2,-2} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\sqrt{\frac{4!}{0!}} = \sqrt{\frac{30}{\pi}}
\end{aligned}$$

Insgesamt,

Y_{lm}	l = 0	l = 1	l = 2
m = −3			
m = −2			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{-2i\varphi}$
m = −1		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\,\cos\vartheta\, e^{-i\varphi}$
m = 0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\vartheta-1\right)$
m = 1		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\,\cos\vartheta\, e^{i\varphi}$
m = 2			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{2i\varphi}$
m = 3			

d) Wir bekommen

$$\begin{aligned} 4\pi\,|Y_{00}|^2 &= 1 \\ 4\pi\,|Y_{10}|^2 &= 3\,\cos^2\theta \\ 4\pi\,|Y_{11}|^2 &= \frac{3}{2}\,\sin^2\theta \\ 4\pi\,|Y_{1,-1}|^2 &= \frac{3}{2}\,\sin^2\theta \end{aligned}$$

und damit offensichtlich

$$4\pi\sum_{m=-1}^{+1}|Y_{1,m}(\varphi,\theta)|^2 = 3 = 2\cdot 1 + 1$$

Weiterhin,

$$\begin{aligned} 4\pi\,|Y_{20}|^2 &= \frac{5}{4}\,(3\cos^2\theta-1)^2 \\ 4\pi\,|Y_{21}|^2 &= \frac{15}{2}\,\sin^2\theta\cos^2\theta \\ 4\pi\,|Y_{22}|^2 &= \frac{15}{8}\,\sin^4\theta \\ 4\pi\,|Y_{2,-1}|^2 &= \frac{15}{2}\,\sin^2\theta\cos^2\theta \\ 4\pi\,|Y_{2,-2}|^2 &= \frac{15}{8}\,\sin^4\theta \end{aligned}$$

und damit

$$
\begin{aligned}
4\pi \sum_{m=-1}^{+1} |Y_{1,m}(\varphi,\theta)|^2 &= \frac{5}{4}\Big(9\cos^4\theta - 6\cos^2\theta + 1 + 12\sin^2\theta\cos^2\theta + 3\sin^4\theta \Big) \\
&= \frac{5}{4}\Big(9\cos^4\theta - 6\cos^2\theta + 1 + 12\cos^2\theta - 12\cos^4\theta + 3\sin^4\theta \Big) \\
&= \frac{5}{4}\Big(6\cos^2\theta + 1 - 3\cos^4\theta + 3\sin^4\theta \Big) \\
&= \frac{5}{4}\Big(6\cos^2\theta - 3 - 3\cos^4\theta + 4 + 3\sin^4\theta \Big) \\
&= \frac{5}{4}\Big(-3[1-\cos^2\theta]^2 + 4 + 3\sin^4\theta \Big) \\
&= 5 \;=\; 2\cdot 2 \,+\, 1 \;.
\end{aligned}
$$

Aufgabe 2: Die Identitäten für die $Y_{1,m}$ kann man sofort aus der Tabelle in Aufgabe 1c ablesen. Für die $Y_{2,m}$ sind folgende Identitäten zu zeigen:

$$
\begin{aligned}
2z^2 - x^2 - y^2 &= 3r^2\cos^2\theta - r^2 \\
\mp(x \pm iy)\, z &= \mp r^2\, \sin\theta\cos\theta\; e^{\pm i\varphi} \\
(x \pm iy)^2 &= r^2\, \sin^2\theta\; e^{\pm i2\varphi}
\end{aligned}
$$

Wir haben in Kugelkoordinaten

$$
(x,y,z) = r(\cos\varphi\sin\theta, \sin\varphi\sin\theta, \cos\theta)
$$

also

$$
\begin{aligned}
2z^2 - x^2 - y^2 &= r^2\big(2\cos^2\theta - \sin^2\theta\big) \\
&= r^2\big(3\cos^2\theta - \cos^2\theta - \sin^2\theta\big) \;=\; r^2\big(3\cos^2\theta - 1\big)
\end{aligned}
$$

und die Identitäten

$$
\begin{aligned}
(x \pm iy)\, z &= r^2\, \sin\theta\; e^{\pm i\varphi}\; \cos\theta \\
(x \pm iy)^2 &= r^2\, \sin^2\theta\; e^{\pm i2\varphi} \;.
\end{aligned}
$$

sind offensichtlich.

Aufgabe 3: Das $Q_0(x)$ liegt nicht in dem Definitionsbereich, für den der Operator

$$
D := \frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}
$$

ein selbstadjungierter Operator ist. Deshalb gilt für das Q_0 nicht die Aussage, dass Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten aufeinander senkrecht stehen müssen. Zur Erinnerung: Ist A ein selbstadjungierter Operator und haben wir 2 Eigenfunktionen

$$
\begin{aligned}
A\psi &= \lambda\psi \\
A\varphi &= \mu\varphi
\end{aligned}
$$

zu verschiedenen Eigenwerten $\lambda \neq \mu$, dann können wir schreiben

$$\lambda\,(\varphi,\psi) \;=\; (\varphi, A\psi) \;\stackrel{A \text{ selbstadj.}}{=}\; (A\varphi,\psi) \;=\; \mu\,(\varphi,\psi)$$

und wegen $\lambda \neq \mu$ muss dann

$$(\varphi,\psi) \;=\; 0$$

sein, Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten stehen senkrecht aufeinander. Der Punkt ist nun, das die Gleichung

$$(DP_\ell, Q_0) \;=\; (P_\ell, DQ_0) \qquad \text{ist falsch!}$$

nicht erfüllt ist, schauen wir uns das genauer an: Für beliebige Polynome, etwa ein P_ℓ und ein P_m, gilt sehr wohl

$$(DP_\ell, P_m) \;=\; (P_\ell, DP_m)\;\;,$$

denn:

$$\begin{aligned}
(P_\ell, DP_m) \quad &= \quad \textstyle\int_{-1}^{1} P_\ell(x)\, \frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&\stackrel{\text{part.Int.}}{=} \quad P_\ell(x)\,(1-x^2)\tfrac{d}{dx}\, P_m(x)\,\Big|_{-1}^{1} \;-\; \textstyle\int_{-1}^{1} \big\{\, \frac{d}{dx}\, P_\ell(x)\,\big\}\,(1-x^2)\frac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&= \quad\quad 0 \;\;-\; \textstyle\int_{-1}^{1} \big\{\,(1-x^2)\frac{d}{dx}\, P_\ell(x)\,\big\}\, \frac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&\stackrel{\text{part.Int.}}{=} \quad -\big\{\,(1-x^2)\tfrac{d}{dx}\, P_\ell(x)\,\big\}\, P_m(x)\,\Big|_{-1}^{1} \;+\; \textstyle\int_{-1}^{1} \big\{\, \frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}\, P_\ell(x)\,\big\}\, P_m(x)\, dx \\
&= \quad\quad 0 \;\;+\; \textstyle\int_{-1}^{1} (DP_\ell)(x)\, P_m(x)\, dx \\
&= \quad (DP_\ell, P_m)
\end{aligned}$$

und damit folgt

$$(P_\ell, P_m) \;=\; 0 \quad \text{für} \;\; \ell \neq m$$

Das Q_0 war nun gegeben durch

$$Q_0(x) \;=\; \tfrac{1}{2}\,\log\!\big[\,\tfrac{1+x}{1-x}\,\big] \;=\; \tfrac{1}{2}\,\big(\log[1+x] \;-\; \log[1-x]\,\big)$$

Die Ableitung ist dann

$$Q_0'(x) \;=\; \tfrac{1}{2}\,\big(\,\tfrac{1}{1+x} \;+\; \tfrac{1}{1-x}\,\big) \;=\; \tfrac{1}{1-x^2}$$

Damit fallen die Randterme bei der partiellen Integration aber nicht mehr weg, wir haben etwa

$$
\begin{aligned}
(Q_0, DP_m) &= \int_{-1}^{1} Q_0(x)\, \tfrac{d}{dx}(1-x^2)\tfrac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&\overset{\text{part.Int.}}{=} Q_0\,(1-x^2)\tfrac{d}{dx}\,P_m(x)\,\Big|_{-1}^{1} \;-\; \int_{-1}^{1} \left\{ \tfrac{d}{dx}\, Q_0(x) \right\} (1-x^2)\tfrac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&= 0 \;-\; \int_{-1}^{1} \left\{ (1-x^2)\tfrac{d}{dx}\, Q_0(x) \right\} \tfrac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&= -\int_{-1}^{1} \left\{ (1-x^2)\, \tfrac{1}{1-x^2} \right\} \tfrac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&= -\int_{-1}^{1} \tfrac{d}{dx}\, P_m(x)\, dx \\
&= -P_m(+1) \;+\; P_m(-1) \;=\; -2\,P_m(1) \;\neq\; 0 \quad \text{für } m \text{ ungerade}
\end{aligned}
$$

wohingegen

$$(DQ_0, P_m) \;=\; 0$$

da

$$(DQ_0)(x) \;=\; \tfrac{d}{dx}(1-x^2)\,Q_0'(x) \;=\; \tfrac{d}{dx}\,(1-x^2)\,\tfrac{1}{1-x^2} \;=\; \tfrac{d}{dx}\,1 \;=\; 0$$

ist. Und da das Q_0 quadratintegrabel ist, können wir es sehr wohl nach den Legendre-Polynomen entwickeln,

$$Q_0(x) \;=\; \sum_{\ell=0}^{\infty} \tfrac{2\ell+1}{2}\,(Q_0, P_\ell)\,P_\ell(x) \tag{7}$$

nur die Koeffizienten (Q_0, P_ℓ) sind eben nicht notwendig 0, obwohl die P_ℓ und das Q_0 Eigenfuktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind, aber das D ist eben nicht selbstadjungiert für das Q_0, und deswegen muss das Q_0 nicht senkrecht auf den P_ℓ stehen.

Mit dem `lm()`-Befehl für lineare Regression in der R-Software lässt sich die Gleichung (7) schnell mal checken, man bekommt etwa die folgenden Bilder für die ersten $\ell = 9$ Partialsummen: