11. Tutorium

Montag, 17. Januar 2022 15:27

1) Kugelflächenfunktionen

· die Kugelflächenfunktionen ergeben sich als die Winkellösungen der Laplace-Gleichung

$$\Delta\Psi(r,\vartheta,\varphi) = 0 \quad \text{mit} \quad \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

· Warum ist das wichtig? ↗ Schrödinger-Gleichung

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{konstant}}}{E}\,\Psi(r,\vartheta,\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,\vartheta,\varphi) + \underset{\substack{\uparrow\\ \text{nur von } r \text{ abhängig}}}{V(r)}\,\Psi(r,\vartheta,\varphi)$$

⇒ Winkellösungen der SGL identisch zur Laplacegleichung

Lösungsansatz: $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)$ ← Separationsansatz

$$\Rightarrow \Delta\Psi = \frac{\Theta\Phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}R\right) + \frac{R\Phi}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\Theta\right) + \frac{R\Theta}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi = 0 \quad \Big|\ \frac{r^2\sin^2\vartheta}{R\Theta\Phi}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\sin^2\vartheta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right) + \frac{\sin\vartheta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d}{d\vartheta}\Theta\right)}_{\text{nur von Fkt. von } r \text{ und } \vartheta} + \underbrace{\frac{1}{\Phi}\frac{d^2}{d\varphi^2}\Phi}_{\text{nur Fkt von } \varphi} = 0$$

→ da beide Funktionen unabhängig voneinander sind, sich aber zu Null addieren müssen, sind beide gleich einer Konstanten, die wir $-m^2$ nennen wollen.

$$\Rightarrow -m^2 = \frac{1}{\Phi}\frac{d^2}{d\varphi^2}\Phi$$

$$\Rightarrow -m^2\Phi = \frac{d^2}{d\varphi^2}\Phi \quad \curvearrowright \quad \text{Lösung: } \boxed{\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi)} \quad \left(\text{normalisiert } \int_0^{2\pi}\Phi\Phi^*\,d\varphi = 1\right)$$

da $\exp(im\varphi)$ periodisch ist $\exp(im(\varphi+2\pi)) = \exp(im\varphi)\underbrace{\exp(i2\pi m)}_{\overset{!}{=}1}$

⇒ m muss ganzzahlig sein $m \in \mathbb{Z}$

- kümmern wir uns nun um die linke Funktion

$$-m^2 = \frac{\sin^2\vartheta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right) + \frac{\sin\vartheta}{\Theta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d}{d\vartheta}\Theta\right) \quad \Big|\ :\sin^2\vartheta$$

$$-m^2 = \frac{\sin\vartheta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R\right) + \frac{\sin\vartheta}{\theta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d}{d\vartheta}\theta\right) \qquad \Big| : \sin^2\vartheta$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)}_{\text{Funktion von } r} = \underbrace{-\frac{1}{\theta\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\theta}{d\vartheta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}}_{\text{Funktion von } \vartheta}$$

- beide Seiten sind wieder gleich einer Separationskonstanten $\lambda = l(l+1)$
- wir interessieren uns nur für die Winkellösung (Multiplikation mit θ)

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\theta}{d\vartheta}\right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right)\theta = 0$$

führe eine Substitution durch $x = \cos\vartheta$ $\qquad \frac{d}{d\vartheta} = -\sin\vartheta\frac{d}{dx} = -\sqrt{1-x^2}\,\frac{d}{dx}$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx}\left((1-x^2)\frac{d\theta}{dx}\right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\theta = 0$$

diese Gleichung entspricht exakt der DGL der zugeordneten Legendre-Polynome mit den Lösungen

$$P_l^{(m)}(x) = (-1)^m(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}P_l(x), \qquad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}\left(x^2-1\right)^l$$
$$= \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{\mathrm{d}^{m+l}}{\mathrm{d}x^{m+l}}\left(x^2-1\right)^l,$$

Legendre Polynome

- wir erhalten direkt die Bedingung $-l \le m \le l$
- mit der Orthonormierungsbedingung

$$\int_{-1}^{1} P_l^{(m)}(x)\,P_l^{(m)}(x)\,dx = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}$$ folgt für $\theta(\vartheta)$

$$\Rightarrow \theta(\vartheta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^{(m)}(\cos\vartheta)$$

- die Kugelflächenfunktionen ergeben sich nun aus der Kombination von $\theta(\vartheta)$ und $\phi(\varphi)$

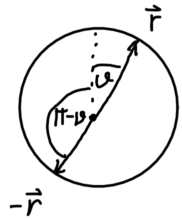
$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(\cos\vartheta)\,\exp(im\varphi)$$

<u>Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen:</u>

- Orthonormiert: $\iint Y_l^{*m}(\vartheta,\varphi)\,Y_{l'}^{m'}(\vartheta,\varphi)\,\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$

- Orthonormiert: $\iint Y_\ell^{*}(\vartheta,\varphi)\, Y_{\ell'}(\vartheta,\varphi) \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$

- Paritätsregeln: Was passiert bei $\vec{r} \to -\vec{r}$ $\quad \begin{pmatrix} r \\ \vartheta \\ \varphi \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} r \\ \pi-\vartheta \\ \varphi+\pi \end{pmatrix}$



  es ergibt sich $Y_\ell^m(\pi-\vartheta, \varphi+\pi) = (-1)^\ell \, Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)$

- Transformation von $m \to -m$

  $$Y_\ell^{-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m \, Y_\ell^{*m}(\vartheta,\varphi)$$

Tabelle 6.1: Liste der ersten Kugelflächenfunktionen für $l = 0, 1, 2$.

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$
$m = 1$		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\vartheta e^{+i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\vartheta \cos\vartheta e^{+i\varphi}$
$m = 0$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1)$
$m = -1$		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\vartheta \cos\vartheta e^{-i\varphi}$