Übungsblatt 9
Quantenmechanik (WS 2023/24)

Abgabe: Dienstag, den 19. Dezember 2023 vor Beginn der Vorlesung

Auf diesem Übungsblatt wollen wir weiterhin die speziellen Funktionen untersuchen, die bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung für Zentralpotentiale und das Wasserstoffatom auftreten.

Bitte nehmen Sie auch an der Lehrevaluation teil: Link

Aufgabe 1: Drehimpuls (10+10 Punkte)

In der Basis der Drehimpuls-Eigenfunktionen sind $\mathbf{L}^2$ und L_z diagonal,

$$\langle l', m'|\mathbf{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{1}$$

$$\langle l', m'|L_z|l, m\rangle = \hbar m\delta_{l'l}\delta_{m'm}. \tag{2}$$

(a) Geben Sie (mithilfe der Ergebnisse der Vorlesung) Ausdrücke für die Matrixelemente

$$\langle l', m'|L_\pm|l, m\rangle \tag{3}$$

der Auf- und Absteigeoperatoren an. Geben Sie explizite Matrixdarstellungen von $L_\pm$ für $l = 1/2$ an. [Die Komponentendarstellung $(a, b)^T$ soll hierbei dem Zustand $|\psi\rangle = a|1/2, 1/2\rangle + b|1/2, -1/2\rangle$ entsprechen.] Wie sehen die entsprechenden Matrixdarstellungen für $l = 1$ aus? [Die Komponentendarstellung $(a, b, c)^T$ soll hierbei dem Zustand $|\psi\rangle = a|1, 1\rangle + b|1, 0\rangle + c|1, -1\rangle$ entsprechen.]

(b) Wie (a) für die Drehimpulskomponenten L_x und L_y. Prüfen Sie anschließend explizit, dass Ihre Darstellungsmatrizen die Kommutatorrelation $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ erfüllen.

Aufgabe 2: Legendre-Polynome als orthogonale Polynome und assoziierte Legendre-Funktionen (10+10+10 Punkte)

Das Legendre-Polynom $P_l(x)$ ist ein Polynom l-ter Ordnung. Wir wollen hier einen weiteren Zugang kennenlernen, der sie als orthogonale Polynome auf dem Interval $[-1, 1]$ identifiziert.

(a) Zeigen Sie mithilfe der Legendreschen Differentialgleichung

$$\left\{\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right] + l(l+1)\right\} f(x) = 0, \tag{4}$$

dass die Legendre-Polynome für $l \neq l'$ die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^{1} dx P_l(x)P_{l'}(x) = 0 \tag{5}$$

erfüllen. *Hinweis*: Schreiben Sie hierfür die Differentialgleichungen für $P_l(x)$ und $P_{l'}(x)$ auf, multiplizieren Sie sie mit der jeweils anderen Funktion und ziehen Sie die Gleichungen dann voneinander ab. Integrieren Sie die resultierende Gleichung über x von -1 bis 1, nachdem Sie die Terme, die die Ableitungen enthalten, als totale Ableitung geschrieben haben.

10 Zusatzpunkte: Zeigen Sie, dass die Legendre-Polynome die Relation

$$\int_{-1}^{1} dx[P_l(x)]^2 = \frac{2}{2l+1} \tag{6}$$

erfüllen. Hierzu kann es hilfreich sein, zunächst die Rekursionsformel

$$lP_l(x) = x\frac{dP_l(x)}{dx} - \frac{dP_{l-1}(x)}{dx} \tag{7}$$

mithilfe der Erzeugendenfunktion zu beweisen.

(b) Konstruieren Sie die Legendre-Polynome für $l = 1, 2$ mithilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens, beginnend mit $P_0(x) = 1$ und der Konvention $P_l(1) = 1$.

(c) Zeigen Sie, dass die assoziierten Legendre-Funktionen, definiert durch

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x), \tag{8}$$

die Differentialgleichung

$$\left\{\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right] - \frac{m^2}{1-x^2} + l(l+1)\right\} f(x) = 0, \tag{9}$$

erfüllen. Zeigen Sie hierzu zunächst, dass die Substitution

$$f(x) = (1-x^2)^{m/2}u(x) \tag{10}$$

auf die Differentialgleichung

$$(1-x^2)u'' - 2(m+1)xu' + [l(l-1) - m(m+1)]u = 0 \tag{11}$$

führt. Zeigen Sie anschließend durch Ableiten dieser Differentialgleichung, dass u' die gleiche Differentialgleichung mit der Ersetzung $m \to m+1$ erfüllt. Zeigen Sie nun, dass die $P_l^m(x)$ Lösungen für allgemeine m sind.

Aufgabe 3: Lösung der Radialgleichung für das Wasserstoff-Atom (10+10+5 Punkte)

Wie bereits auf dem letzten Übungsblatt gezeigt, kann die Schrödinger-Gleichung für Zentralpotentiale geschrieben in Kugelkoordinaten mithilfe des Separationsansatzes $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)f(\theta)g(\varphi)$ gelöst werden. Zur Wiederholung: Setzen wir zunächst $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$ in

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\right] + V(r)\right\}\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{12}$$

ein, teilen durch $\psi(r,\theta,\varphi)$ und multiplizieren mit $2mr^2/\hbar^2$, so erhalten wir

$$-\frac{2mr^2}{\hbar^2 R}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r) + V(r)\right\}R + \frac{2mr^2}{\hbar^2}E = -\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\right\}Y. \tag{13}$$

Da die linke Seite nur von r und die rechte Seite nur von den Winkeln abhängt, müssen beide Seiten Konstanten sein. Setzen wir die Konstante gleich $l(l+1)$, so erhalten wir die Radialgleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right\}R(r) = ER(r) \tag{14}$$

sowie

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\varphi^2\right\}Y(\theta,\varphi) = -l(l+1)Y(\theta,\varphi). \tag{15}$$

Hier wollen wir uns ergänzend zur Vorlesung mit der Lösung der Radialgleichung für das Coulomb-Potential $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ beschäftigen. Aus der Lösung des Winkelanteils der Differentialgleichung wissen wir bereits, dass l die Werte $l = 0, 1, 2, \ldots$ annehmen kann.

(a) Substituieren Sie $u(r) = rR(r)$ und zeigen Sie, dass $u(r)$ die Gleichung

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2}\frac{1}{r} \right\} u(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2}u(r) \tag{16}$$

erfüllt. Zeigen Sie weiter, dass mit den Definitionen $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, $\rho = \kappa r$ und $\rho_0 = me^2/(2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa)$

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} - \left\{ 1 + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\rho_0}{\rho} \right\} u(\rho) = 0 \tag{17}$$

folgt.
(b) Angesichts des asymptotischen Verhaltens (s. Vorlesung) schreiben wir

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho). \tag{18}$$

Zeigen Sie, dass

$$\rho\frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{dv(\rho)}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0. \tag{19}$$

Schließlich haben wir in der Vorlesung gesehen, dass $\rho_0 = 2n$, so dass

$$\rho\frac{d^2v(\rho)}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{dv(\rho)}{d\rho} + 2[n - (l+1)]v = 0. \tag{20}$$

(c) Die assoziierten Laguerre-Polynome $L_q^k(x)$ erfüllen die Differentialgleichung

$$xy'' + (k+1-x)y' + qy = 0. \tag{21}$$

Zeigen Sie, dass $v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$. Drücken Sie ρ durch r, n und den Bohr-Radius a_0 aus.