Øving 13 for FY1004, høsten 2007

De sfærisk harmoniske funksjonene $Y_{\ell m}$

En partikkel i tre dimensjoner har posisjon $\vec{r}$ og impuls $\vec{p}$. Dreieimpulsoperatoren $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ er en vektor med komponenter

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y = -\mathrm{i}\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) , \\ L_y &= zp_x - xp_z = -\mathrm{i}\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \\ L_z &= xp_y - yp_x = -\mathrm{i}\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \end{aligned}$$

I polarkoordinater r, θ, φ med

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

og med de ortogonale enhetsvektorene

$$\begin{aligned} \vec{e}_r &= \frac{\vec{r}}{r} = \sin\theta \, (\cos\varphi \, \vec{e}_x + \sin\varphi \, \vec{e}_y) + \cos\theta \, \vec{e}_z \ , \\ \vec{e}_\theta &= \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \theta} = \cos\theta \, (\cos\varphi \, \vec{e}_x + \sin\varphi \, \vec{e}_y) - \sin\theta \, \vec{e}_z \ , \\ \vec{e}_\varphi &= \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial \vec{e}_r}{\partial \varphi} = -\sin\varphi \, \vec{e}_x + \cos\varphi \, \vec{e}_y \ , \end{aligned}$$

har vi at

$$\nabla = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

og

$$\vec{L} = -\mathrm{i}\hbar \, \vec{r} \times \nabla = -\mathrm{i}\hbar \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) .$$

Det gir at

$$\begin{aligned} L_x &= \vec{e}_x \cdot \vec{L} = -\mathrm{i}\hbar \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) , \\ L_y &= \vec{e}_y \cdot \vec{L} = -\mathrm{i}\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) , \\ L_z &= \vec{e}_z \cdot \vec{L} = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \ . \end{aligned}$$

Istedenfor operatorene L_x og L_y kan vi bruke operatorene

$$\begin{aligned} L_+ &= L_x + \mathrm{i}L_y = \hbar \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \mathrm{i} \cot\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) , \\ L_- &= L_x - \mathrm{i}L_y = \hbar \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + \mathrm{i} \cot\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) . \end{aligned}$$

Siden L_x og L_y er Hermiteske, $L_x^\dagger = L_x$ og $L_y^\dagger = L_y$, er $L_- = L_+^\dagger$.

Komponentene av dreieimpulsen oppfyller kommutasjonsrelasjonene

$$[L_x, L_y] = \mathrm{i}\hbar L_z \;, \qquad [L_y, L_z] = \mathrm{i}\hbar L_x \;, \qquad [L_z, L_x] = \mathrm{i}\hbar L_y \;.$$

Eller ekvivalent,

$$[L_z, L_+] = \hbar L_+ \;, \qquad [L_z, L_-] = -\hbar L_- \;, \qquad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z \;.$$

Fordi operatorene L_z og $\vec{L}^{\,2} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ kommuterer, har de felles egenfunksjoner. Denne oppgaven går ut på å finne de felles egenfunksjonene for L_z og $\vec{L}^{\,2}$, som vi kaller $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$. De er funksjoner av vinklene θ og φ, siden L_z og $\vec{L}^{\,2}$ er vinkeloperatorer som ikke involverer radialkoordinaten r.

a) Bruk uttrykkene for L_x, L_y og L_z gitt ovenfor til å vise at

$$\begin{aligned}\vec{L}^{\,2} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \;&=\; -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \, \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \, \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \\ &=\; -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \, \frac{\partial}{\partial\theta} \, \sin\theta \, \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \, \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) .\end{aligned}$$

Hint: Metoden for å finne et uttrykk for L_x^2, for eksempel, er å operere på en vilkårlig bølgefunksjon $\psi(r, \theta, \varphi)$. Da er $L_x^2\psi = L_x(L_x\psi)$.

b) La ℓ være et ikke-negativt heltall, $\ell = 0, 1, 2, \ldots$, og definer

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = C_\ell \, \sin^\ell\!\theta \; \mathrm{e}^{\mathrm{i}\ell\varphi} \;,$$

der C_ℓ er en normeringsfaktor som må bestemmes.

Vis at $L_z \, Y_{\ell\ell} = \ell\hbar \, Y_{\ell\ell}$, at $\vec{L}^{\,2} \, Y_{\ell\ell} = \ell(\ell+1)\hbar^2 \, Y_{\ell\ell}$, og at $L_+ Y_{\ell\ell} = 0$.

I tre dimensjoner normerer vi en bølgefunksjon $\psi = \psi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \varphi)$ slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z \; |\psi|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \; r^2 \sin\theta \; |\psi|^2 = 1 \;.$$

Når vi bytter integrasjonsvariable fra x, y, z til r, θ, φ, skal vi ha med Jacobi-determinanten

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = r^2 \sin\theta \;.$$

Vinkelfunksjonene $Y_{\ell m}$ normerer vi slik at

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \;\, \sin\theta \; |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 = 1 \;.$$

Normeringskravet for $Y_{\ell\ell}$ er da at

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \;\, \sin\theta \; |Y_{\ell\ell}|^2 = |C_\ell|^2 \, 2\pi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \;\, \sin^{2\ell+1}\!\theta = 1 \;.$$

Vi må beregne integralet

$$I_\ell = \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \, \sin^{2\ell+1}\theta \, .$$

For $\ell = 0$ har vi at $I_0 = 2$. Ved delvis integrasjon viser vi at for $\ell = 1, 2, 3, \ldots$ er

$$\begin{aligned} I_\ell \; &= \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \, \sin^{2\ell+1}\theta = \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \, \sin\theta \, \sin^{2\ell}\theta = - \cos\theta \, \sin^{2\ell}\theta \Big|_0^\pi + 2\ell \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \, \cos^2\theta \, \sin^{2\ell-1}\theta \\ &= 2\ell \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \, (1 - \sin^2\theta) \, \sin^{2\ell-1}\theta = 2\ell(I_{\ell-1} - I_\ell) \, . \end{aligned}$$

Det gir iterasjonsformelen

$$I_\ell = \frac{2\ell}{2\ell+1} \, I_{\ell-1} \, ,$$

med løsning

$$I_\ell = \frac{2 \cdot 4 \cdot \ldots \cdot (2\ell)}{3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2\ell+1)} \cdot 2 = \frac{2^{2\ell+1} (\ell!)^2}{(2\ell+1)!} \, .$$

Normeringskonstanten C_ℓ kan inneholde en vilkårlig valgt fasefaktor (et kompleks tall med absoluttverdi 1). Den vanligste konvensjonen (som kanskje ser litt kunstig ut?) er å velge

$$C_\ell = (-1)^\ell \, \frac{\sqrt{(2\ell+1)!}}{2^{\ell+1} \, \ell! \, \sqrt{\pi}} \, .$$

e) De normerte egenfunksjonene $Y_{\ell m} = Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ kan velges slik at

$$\begin{aligned} L_+ Y_{\ell m} \; &= \hbar \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(m + \frac{1}{2}\right)^2} \, Y_{\ell, m+1} \, , \\ L_- Y_{\ell m} \; &= \hbar \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(m - \frac{1}{2}\right)^2} \, Y_{\ell, m-1} \, . \end{aligned}$$

Bruk disse relasjonene (uten bevis) til å finne eksplisitte uttrykk for alle funksjonene $Y_{\ell m}$ for $\ell = 0$, $\ell = 1$ og $\ell = 2$, og $m = \ell, \ell-1, \ldots, -\ell$.

Det kan vises at $Y_{\ell,-m} = (-1)^m Y_{\ell m}^*$, derfor er det nok å finne $Y_{\ell m}$ for $m \geq 0$.