$Y_{\ell m}$, j_ℓ , $\varphi_{n\,\ell\,m}$ — Formelsammlung

Die Quantenmechanik ist leider reich an technischen Details, deren Erarbeitung zunächst nur wenig Gewinn abwirft, wohl aber dann deren Einbau in physikalische Strukturen. Einmal im Leben (verifizieren) — und fortan von der Erinnerung zehren (z.B. von dieser hier).

Die **Kugel**flächen**funktionen** (salopp „Kugelfunktionen" , spherical harmonics) sind per def. die simultanen Eigenfunktionen zweier miteinander vertauschbarer, nur auf Kugelwinkel wirkender, hermitescher Operatoren, nämlich von

$$\vec{L}^{\,2} = (\vec{r}\times\vec{p})^2 = -\hbar^2 r^2 (\Delta - \Delta_r) = -\hbar^2 \left[\tfrac{1}{\sin(\vartheta)}\,\partial_\vartheta \sin(\vartheta)\,\partial_\vartheta + \tfrac{1}{\sin^2(\vartheta)}\partial_\varphi^2\right] \quad \text{und} \quad L_z = \tfrac{\hbar}{i}\partial_\varphi \qquad (Y.1)$$

zu Eigenwerten $\hbar^2\ell(\ell+1)$ bzw. $\hbar m$, wobei $\ell = 0,1,2,\dots$ und $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$.
Diese $Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$ (oder $Y_{\ell m}(\Omega)$) sind folglich othonormierbar und bilden ein VONS (**V**ollständiges **O**rtho**N**ormal-**S**ystem) im Raum der Funktionen $f(\vartheta,\varphi)$ über der Einheitskugel.

$$\int d\Omega\; Y^*_{\ell m}\, Y_{\ell' m'} = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{m m'} \quad , \quad Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \alpha_{\ell m}\, P_\ell^{|m|}(\cos(\vartheta))\, e^{im\varphi} \qquad (Y.2)$$

$$P_\ell^{|m|}(x) = (1-x^2)^{|m|/2}\,\partial_x^{|m|} P_\ell(x) \quad , \quad P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell\,\ell!}\partial_x^\ell\,(x^2-1)^\ell \qquad (Y.3)$$

zugeordnete Legendre–„Polynome" Legendre–Polynome

$$\alpha_{\ell m} = \sqrt{(2\ell+1)/4\pi}\,\sqrt{(\ell-|m|)!\,/\,(\ell+|m|)!}\,(-m/|m|)^m \qquad (0^0 := 1) \qquad (Y.4)$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad ; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\vartheta) \quad , \quad Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)\,e^{\pm i\varphi} \quad ; \qquad (Y.5)$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2(\vartheta)-1) \quad , \quad Y_{2\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin(\vartheta)\cos(\vartheta)e^{\pm i\varphi} \quad , \quad Y_{2\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2(\vartheta)e^{\pm i2\varphi} \quad . \qquad (Y.6)$$

Erzeugende Funktion:
$$\sqrt{\frac{1}{1-2ux+u^2}} = \sum_{\ell=0}^\infty u^\ell P_\ell(x) \quad , \quad \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \sum_{\ell=0}^\infty \frac{(r')^\ell}{r^{\ell+1}} P_\ell(\cos(\vartheta)) \quad \text{für } r' < r \qquad (Y.7)$$

Additionstheorem:
$$Y_{\ell 0}\left(\vartheta := \text{Winkel zwischen } \vec{r}, \vec{r}\,'\right) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\Omega)\; Y^*_{\ell m}(\Omega') \qquad (Y.8)$$

$$L_\pm := L_x \pm iL_y = \hbar\, e^{\pm i\varphi}\,(\pm\partial_\vartheta + i\,\mathrm{ctg}(\vartheta)\,\partial_\varphi) \quad , \quad \vec{L}^{\,2} = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \quad ; \qquad (Y.9)$$

$$L_\pm Y_{\ell m} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m\pm1)}\,Y_{\ell\, m\pm1} \quad , \quad Y_{\ell\ell} = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\,\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}\,\sin^\ell(\vartheta)\,e^{i\ell\varphi} \quad . \qquad (Y.10)$$

Sphärische Besselfunktionen lösen den Radialanteil der stationären Schrödinger–Gleichung im potentialfreien (meist Außen–)Raum

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{r}\partial_r^2 r + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R(r) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}R(r) \quad , \quad R(r) = A\,j_\ell(kr) + B\,n_\ell(kr) \quad , \quad \rho := kr \qquad (Y.11)$$

$$\Rightarrow \quad \left(-\frac{1}{\rho}\partial_\rho^2\rho + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - 1\right)\begin{Bmatrix} j_\ell(\rho) \\ n_\ell(\rho)\end{Bmatrix} = 0 \qquad \left(\begin{matrix}\text{Zusammenhang} \\ \text{mit halbzahligen} \\ \text{Bessel–Funktionen:}\end{matrix}\quad \begin{matrix} j_\ell = \sqrt{\pi/2\rho}\,J_{\ell+\frac12} \\ n_\ell = \sqrt{\pi/2\rho}\,Y_{\ell+\frac12}\end{matrix}\right) \qquad (Y.12)$$

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell\left(\frac{1}{\rho}\partial_\rho\right)^\ell \frac{\sin(\rho)}{\rho} \;\to\; \begin{cases} \rho^\ell/(2\ell+1)!! & (\rho\to0) \\ \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho-\ell\frac{\pi}{2}\right) & (\rho\to\infty)\end{cases} \qquad (Y.13)$$

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell\left(\frac{1}{\rho}\partial_\rho\right)^\ell \frac{\cos(\rho)}{\rho} \;\to\; \begin{cases} -(2\ell-1)!!\,\rho^{-\ell-1} & (\rho\to0) \\ -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho-\ell\frac{\pi}{2}\right) & (\rho\to\infty)\end{cases} \qquad (Y.14)$$

$$h_\ell^{(1)}(\rho) := j_\ell(\rho) + i\,n_\ell(\rho) \quad \to \quad \frac{1}{i\rho}e^{i\left(\rho-\ell\frac{\pi}{2}\right)} \quad ; \quad E<0\;:\; k\to i\kappa\;,\; i\rho\to-\kappa r \quad . \qquad (Y.15)$$

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos(\vartheta)} = \sum_{\ell=0}^\infty (2\ell+1)\,i^\ell\,j_\ell(kr)\,P_\ell(\cos(\vartheta)) \qquad (Y.16)$$

H–Atom–Energie–Eigenzustände $\quad \varphi_{n\ell m}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) \qquad (Y.17)$

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R_{n\ell}^2(r) = 1 \quad , \quad R_{n\ell}(r) = \left(\sum_{\nu=0}^{n-\ell-1} c_\nu\rho^\nu\right)\rho^\ell e^{-\rho/n} \quad , \quad \rho = \frac{r}{a} \quad , \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e_0^2} \quad , \quad e_0^2 := \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \qquad (Y.18)$$

$$c_{\nu+1} = \frac{2}{n}\,\frac{\nu+\ell+1-n}{(\nu+2\ell+2)\,(\nu+1)}\,c_\nu \quad ; \quad n = 1,2,\dots \quad ; \quad E = -\left(\frac{e_0^2}{2a}\right)\frac{1}{n^2} \quad ; \quad n' = n-\ell-1 = \begin{matrix}\text{Zahl der} \\ \text{radialen} \\ \text{Nullstellen}\end{matrix} \qquad (Y.19)$$

$$\begin{aligned} &R_{10} = a^{-3/2}2e^{-\rho} && n'=0 && R_{30} = a^{-3/2}\tfrac{2}{3\sqrt3}\left(1-\tfrac23\rho+\tfrac{2}{27}\rho^2\right)e^{-\rho/3} && n'=2 \\ &R_{20} = a^{-3/2}\tfrac{1}{\sqrt2}\left(1-\tfrac12\rho\right)e^{-\rho/2} && n'=1 && R_{31} = a^{-3/2}\tfrac{8}{27\sqrt6}\rho\left(1-\tfrac16\rho\right)e^{-\rho/3} && n'=1 \\ &R_{21} = a^{-3/2}\tfrac{1}{2\sqrt6}\rho e^{-\rho/2} && n'=0 && R_{32} = a^{-3/2}\tfrac{4}{81\sqrt{30}}\rho^2e^{-\rho/3} && n'=0 \end{aligned} \qquad (Y.20)$$

(hschulz@itp.uni-hannover.de)