12. Tutorium - Lösungen **16.1.2015**

- ANMERKUNG: Jeder ist selber für den sinnvollen Umgang mit Lösungszetteln verantwortlich. Letztendlich geht es darum, was man selber lernt und versteht.

12.1 Multiple Choice Fragen

a)

$$\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}=\frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}}=\frac{1}{r_1}\frac{1}{\sqrt{1+t^2-2t\cos\theta}}=\frac{1}{r_1}\sum_{m=0}^{\infty}t^m P_m(\cos\theta)$$

wobei $t=r_2/r_1$.

$$\int_{-1}^{1}P_n(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta}}d(\cos\theta)=\int_{-1}^{1}P_n(\cos\theta)\frac{1}{r_1}\sum_{m=0}^{\infty}t^m P_m(\cos\theta)d(\cos\theta)$$
$$=\frac{1}{r_1}\sum_{m=0}^{\infty}t^m\int_{-1}^{1}P_n(x)P_m(x)dx=\frac{1}{r_1}\sum_{m=0}^{\infty}t^m\delta_{nm}\frac{2}{2n+1}=\frac{2}{2n+1}\frac{1}{r_1}t^n=\frac{2}{2n+1}\frac{r_2^n}{r_1^{n+1}}$$

b) $Y_0^0(\theta,\phi)=(4\pi)^{-1/2}P_0^0(\cos\theta)=(4\pi)^{-1/2}$.

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\bar{Y}_\ell^m(\theta,\phi)Y_0^0(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta,\phi)\sin\theta d\phi d\theta=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\bar{Y}_\ell^m(\theta,\phi)\frac{1}{\sqrt{4\pi}}Y_\ell^m(\theta,\phi)\sin\theta d\phi d\theta=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Die Kugelflächenfunktionen sind orthonormal zueinander.

c)

$$\int_0^{\infty}r^3\left(2e^{-r}L_0^1(2r)\right)^2\,dr=4\int_0^{\infty}r^3e^{-2r}\,dr=-\,2r^3e^{-2r}\big|_{r=0}^{\infty}+6\int_0^{\infty}r^2e^{-2r}\,dr$$
$$=-\,3r^2e^{-2r}\big|_{r=0}^{\infty}+6\int_0^{\infty}re^{-2r}\,dr=-\,3re^{-2r}\big|_{r=0}^{\infty}+3\int_0^{\infty}e^{-2r}\,dr=-\frac{3}{2}\,e^{-2r}\big|_{r=0}^{\infty}=\frac{3}{2}$$

Alternative Lösung :

$$\int_0^{\infty}r^3\left(2e^{-r}L_0^1(2r)\right)^2\,dr=4\int_0^{\infty}r^3e^{-2r}\,dr=4\int_0^{\infty}\left(\frac{t}{2}\right)^3e^{-t}\,\frac{1}{2}dt=\frac{1}{4}\int_0^{\infty}t^3e^{-t}dt=\frac{1}{4}\Gamma(4)=\frac{3}{2}$$

Anmerkung : $R(r)=2e^{-r}L_0^1(2r)$ ist die Grundzustand-Wellenfunktion des Wasserstoffatoms.

d) $y''+\lambda y(x)=0\to a_2(2)=1,\ a_1(x)=0\to p(x)=e^0=1$.

e) $y(x)=ae^{i\sqrt{\lambda}x}+be^{-i\sqrt{\lambda}x}$

$y(0)=a+b=0\to b=-a,\ y(L)=ae^{i\sqrt{\lambda}L}-ae^{-i\sqrt{\lambda}L}=2ia\sin(\sqrt{\lambda}L)\to\sqrt{\lambda}L=n\pi\to\lambda=(n\pi/L)^2$.

Anmerkung : Die Eigenfunktionen sind $y_n(x)=a(e^{i\sqrt{\lambda}x}-e^{-i\sqrt{\lambda}x})=2ia\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$. $(n=0,1,2,\cdots)$

f) $y(x)=ae^{i\sqrt{\lambda}x}+be^{-i\sqrt{\lambda}x}$

$y(0)=y(L)$ und $y'(0)=y'(L)\to a+b=ae^{i\sqrt{\lambda}L}+be^{-i\sqrt{\lambda}L}$ und $i\sqrt{\lambda}a-i\sqrt{\lambda}b=i\sqrt{\lambda}ae^{i\sqrt{\lambda}L}-i\sqrt{\lambda}be^{-i\sqrt{\lambda}L}$
$\to a+b=ae^{i\sqrt{\lambda}L}+be^{-i\sqrt{\lambda}L}$ und $a-b=ae^{i\sqrt{\lambda}L}-be^{-i\sqrt{\lambda}L}\to a=ae^{i\sqrt{\lambda}L}$ und $b=be^{-i\sqrt{\lambda}L}\to\sqrt{\lambda}L=2n\pi$
$\to\lambda=(2n\pi/L)^2$

Anmerkung : Die Eigenfunktionen sind $y_n(x)=e^{i(2n\pi/L)x}$. $(n=\cdots,-2,-1,0,1,2,\cdots)$

12.2 Legendre-Polynome

a) Ersetzung von $(n+1)P_{n+1}(x)$ durch $(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$ (Rekursionsformel) :

$$\begin{aligned} & (n+1)\left[P_{n+1}(x)P_n(y) - P_n(x)P_{n+1}(y)\right] \\ = \ & \left[(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)\right]P_n(y) - P_n(x)\left[(2n+1)yP_n(y) - nP_{n-1}(y)\right] \\ = \ & (2n+1)(x-y)P_n(x)P_n(y) + n\left[P_n(x)P_{n-1}(y) - P_{n-1}(x)P_n(y)\right] \end{aligned}$$

Wenn $n \geq 1$ gilt

$$(2n+1)P_n(x)P_n(y) = \frac{1}{x-y}\left((n+1)\left[P_{n+1}(x)P_n(y) - P_n(x)P_{n+1}(y)\right] - n\left[P_n(x)P_{n-1}(y) - P_{n-1}(x)P_n(y)\right]\right)$$

b) $X_n \equiv \frac{n+1}{x-y}\left[P_{n+1}(x)P_n(y) - P_n(x)P_{n+1}(y)\right]$
$\longrightarrow$ das Ergebnis von Bsp.a $(2n+1)P_n(x)P_n(y) = X_n - X_{n-1}$.

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{N-1}\frac{2n+1}{2}P_n(x)P_n(y) = \frac{1}{2}\underbrace{P_0(x)P_0(y)}_{=1} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N-1}\underbrace{(2n+1)P_n(x)P_n(y)}_{\text{Bsp.a}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N-1}(X_n - X_{n-1}) \\ = \ & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N-1}X_n - \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{N-2}X_n = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}X_{N-1} - \frac{1}{2}X_0 \\ = \ & \frac{1}{2} + \frac{N}{2}\frac{P_N(x)P_{N-1}(y) - P_{N-1}(x)P_N(y)}{x-y} - \frac{1}{2}\frac{P_1(x)P_0(y) - P_0(x)P_1(y)}{x-y} \\ = \ & \frac{N}{2}\frac{P_N(x)P_{N-1}(y) - P_{N-1}(x)P_N(y)}{x-y} \end{aligned}$$

c) Ersetzungen $x \to x_i$ und $y \to x_j$ in Bsp.b

$$\sum_{n=0}^{N-1}\frac{2n+1}{2}P_n(x_i)P_n(x_j) = \frac{N}{2}\frac{P_N(x_i)P_{N-1}(x_j) - P_{N-1}(x_i)P_N(x_j)}{x_i - x_j}$$

Wenn $i \neq j$, $\sum_{n=0}^{N-1}(2n+1)P_n(x_i)P_n(x_j)/2 = 0$. Wenn $i = j$ wird x_j in der rechten Seite der Gleichung durch $x_i + \varepsilon$ ersetzt. Nach der Taylorentwicklung $P_N(x_i + \varepsilon) = \underbrace{P_N(x_i)}_{=0} + P_N'(x_i)\varepsilon + O(\varepsilon^2)$ wird der Grenzwert im Limes $\varepsilon \to 0$ gerechnet.

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{N-1}\frac{2n+1}{2}P_n(x_i)P_n(x_i) = -\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{N}{2\varepsilon}\left[\underbrace{P_N(x_i)}_{=0}P_{N-1}(x_i+\varepsilon) - P_{N-1}(x_i)P_N(x_i+\varepsilon)\right] \\ = \ & -\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{N}{2\varepsilon}\left[-P_{N-1}(x_i)P_N'(x_i)\varepsilon + O\left(\varepsilon^2\right)\right] = \frac{N}{2}P_{N-1}(x_i)P_N'(x_i) = \frac{1}{w_i} \end{aligned}$$

$$\to \quad \sum_{n=0}^{N-1}\frac{2n+1}{2}P_n(x_i)P_n(x_j) = \frac{1}{w_i}\delta_{ij}$$

d)

$$
\begin{aligned}
& \int_{-1}^{1} f_i(x) f_j(x) dx \\
= & \int_{-1}^{1} \left(\sqrt{w_i} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{2n+1}{2} P_n(x_i) P_n(x) \right) \left(\sqrt{w_j} \sum_{m=0}^{N-1} \frac{2m+1}{2} P_m(x_j) P_m(x) \right) dx \\
= & \sqrt{w_i w_j} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} \frac{(2n+1)(2m+1)}{4} P_n(x_i) P_m(x_j) \underbrace{\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx}_{=\delta_{nm} 2/(2n+1)} \\
= & \sqrt{w_i w_j} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{2n+1}{2} P_n(x_i) P_n(x_j) \\
= & \delta_{ij}
\end{aligned}
$$

e)

$$
\psi(x_i) = \sum_{j=1}^{N} b_j f_j(x_i) = \sum_{j=1}^{N} b_j \sqrt{w_j} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{2n+1}{2} P_n(x_j) P_n(x_i) = \sum_{j=1}^{N} b_j \frac{1}{\sqrt{w_j}} \delta_{ij} = \frac{b_i}{\sqrt{w_i}} \quad \to \quad b_i = \sqrt{w_i} \psi(x_i)
$$

$$
\psi(x) = \sum_{i=1}^{N} \sqrt{w_i} \psi(x_i) f_i(x)
$$

Alternative Lösung : $\psi(x) = \sum_{i=1}^{N} b_i f_i(x) = \sum_{n=0}^{N-1} a_n P_n(x)$ wobei $a_n = \frac{2n+1}{2} \sum_{i=1}^{N} b_i \sqrt{w_i} P_n(x_i)$

$$
\begin{aligned}
b_i &= \int_{-1}^{1} \psi(x) f_i(x) dx = \sum_{n=0}^{N-1} a_n \int_{-1}^{1} P_n(x) f_i(x) dx = \sum_{n=0}^{N-1} a_n \int_{-1}^{1} P_n(x) \left(\sqrt{w_i} \sum_{m=0}^{N-1} \frac{2n+1}{2} P_m(x_i) P_m(x) \right) dx \\
&= \sqrt{w_i} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} a_n \frac{2n+1}{2} P_m(x_i) \int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = \sqrt{w_i} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} a_n P_m(x_i) \delta_{nm} \\
&= \sqrt{w_i} \sum_{n=0}^{N-1} a_n P_n(x_i) = \sqrt{w_i} \psi(x_i)
\end{aligned}
$$

f)

$$
\int_{-1}^{1} f_i(x) dx \quad = \quad \int_{-1}^{1} \sqrt{w_i} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{2n+1}{2} P_n(x_i) P_n(x) dx = \sqrt{w_i} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{2n+1}{2} P_n(x_i) 2\delta_{n0} = \sqrt{w_i}
$$

$$
\int_{-1}^{1} \psi(x) dx = \int_{-1}^{1} \sum_{i=1}^{N} \psi(x_i) \sqrt{w_i} f_i(x) dx = \sum_{i=1}^{N} w_i \psi(x_i)
$$

Anmerkung : Das Endergebnis ist bekannt als Gauß-Legendre-Quadratur, eine praktische Methode der numerischen Integration. Andere Formen des Gewichts (aus der Rekursionsformel $(x^2-1)P_n'(x) = nxP_n(x) - nP_{n-1}(x)$)

$$
w_i = \frac{2}{N P_{N-1}(x_i) P_N'(x_i)} = \frac{2}{(1-x_i^2)(P_N'(x_i))^2} .
$$

werden oft verwendet.