

Uitwerkingen Sferische oplossing

Dr. H. (Harm) van der Lek

9 oktober 2025

Versie 4

Deze versie is geschikt voor boeken met versienummer groter dan B30

Inhoudsopgave

1	De Laplace-operator ∇^2 in poolcoördinaten.	2
2	Oplossen van P vergelijking	8
3	Opgave 1. Impulsmomentoperatoren	13
4	Opgave 2. Afgeleide operatoren	15
5	Opgave 3. $\hat{L}_+$ op voorbeelden.	18
6	Opgave 4. $\hat{L}_+$ op P.	19
7	De Laplace-operator ∇^2 herbezocht.	21

In dit document geven we een aantal detailuitwerkingen van opgaven uit §A.12, Sferische oplossing.

1 De Laplace-operator ∇^2 in poolcoördinaten.

We willen de ∇^2 -operator ($= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$) omzetten naar poolcoördinaten (r, ϑ, φ) . Zie bladzijde 257. Dit kan op verschillende manieren. Heel elegant kan dit via de theorie van covariant differentiëren uit de differentiaalmeetkunde. Zie hiervoor de §7. Hier gaan we het ‘met de hand’ doen.

We gaan daarbij uit van (A.106) op bladzijde 265:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi & \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi & -\frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi & \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi & \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \\ \cos \vartheta & -\frac{1}{r} \sin \vartheta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \vartheta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

We schrijven dit expliciet uit:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \quad (3)$$

Om nu bijvoorbeeld $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ uit te rekenen moeten we de operator uit de eerste regel hierboven twee keer toepassen. Aangezien het om 3 termen gaat krijgen we dus in totaal 9 combinaties. Laten we eens een voorbeeld nemen,

de eerste term eerst en dan de tweede:

$$\begin{aligned}
& \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \\
&= \sin \vartheta \cos \varphi \left[-\frac{1}{r^2} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right] + \sin \vartheta \cos \varphi \left[\frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta} \right] \\
&= -\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \varphi \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \varphi \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta} \\
&= -\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}
\end{aligned}$$

U ziet deze twee termen staan in de laatste kolom van tabel 1 in de rij (1,2). Dit zijn dan slechts 2 van de 41 termen die er in het totaal zullen ontstaan. Het is dus verstandig om deze rekenpartij heel systematisch op te zetten. Ik ga dat op de volgende wijze aanpakken. Als voorbeeld neem ik de berekening van $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Eerst schrijf ik (1) als volgt op:

$$\frac{\partial}{\partial x} = A_{xr} \frac{\partial}{\partial r} + A_{x\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + A_{x\phi} \frac{\partial}{\partial \varphi} = O_{xr} + O_{x\vartheta} + O_{x\varphi}$$

Bedenk dat $O_{..}$ *operatoren* zijn, dus dat zij niet persé hoeven te commuteren. Bij het uitschrijven van $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ ontstaan er dus, zoals gezegd, 9 combinaties. In tabel 1 hebben we voor elke combinatie een rij opgenomen. Bijvoorbeeld weer de combinatie (1,2). Dat betekent dat we het operator product $O_{xr}O_{x\vartheta} = A_{xr} \frac{\partial}{\partial r} [A_{x\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta}]$ willen uitrekenen. In de eerste kolom berekenen we dan eerst zorgvuldig $\frac{\partial}{\partial r} [A_{x\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta}]$ met behulp van de productregel:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right] = -\frac{1}{r^2} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$$

Dit vermenigvuldigen we dan met $A_{xr} = \sin \vartheta \cos \varphi$ en zetten dat in de laatste kolom:

$$\begin{aligned}
& \sin \vartheta \cos \varphi \left(-\frac{1}{r^2} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta} \right) \\
&= -\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}
\end{aligned}$$

We berekenen de termen van $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

$$\begin{aligned}
1: \quad O_{xr} &:= \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} &:= A_{xr} \frac{\partial}{\partial r} \\
2: \quad O_{x\vartheta} &:= \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} &:= A_{x\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \\
3: \quad O_{x\varphi} &:= -\frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} &:= A_{x\varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned} \tag{4}$$

4

			Differentiaal toegepast	vermenigvuldigd met factor $A_{x..}$
1	1	$\frac{\partial}{\partial r}$	$\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r^2}$	$\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r^2}$
2	1	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$\cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	$\frac{1}{r} \cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$
3	1	$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	$-\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$	$\frac{1}{r} \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$
1	2	$\frac{\partial}{\partial r}$	$-\frac{1}{r^2} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	$-\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$
2	2	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$-\frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$	$-\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$
3	2	$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	$-\frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$	$\frac{1}{r^2} \cot \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r^2} \cot \vartheta \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$
1	3	$\frac{\partial}{\partial r}$	$\frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$	$\frac{1}{r^2} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$
2	3	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$\frac{1}{r \sin^2 \vartheta} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$	$\frac{\cos^2 \vartheta}{r^2 \sin^2 \vartheta} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$
3	3	$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	$-\frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$	$\frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$

Tabel 1: Berekening van $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

We berekenen de termen van $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$.

$$\begin{aligned}
1: \quad O_{yr} &:= \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} &:= A_{yr} \frac{\partial}{\partial r} \\
2: \quad O_{y\vartheta} &:= \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} &:= A_{y\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \\
3: \quad O_{y\varphi} &:= \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} &:= A_{y\phi} \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned} \tag{5}$$

5

			Differentiaal toegepast	vermenigvuldigd met factor $A_{y..}$
1	1	$\frac{\partial}{\partial r}$	$\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r^2}$	$\sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r^2}$
2	1	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$\cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	$\frac{1}{r} \cos^2 \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$
3	1	$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	$\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$	$\frac{1}{r} \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$
1	2	$\frac{\partial}{\partial r}$	$-\frac{1}{r^2} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	$-\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$
2	2	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$-\frac{1}{r} \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$	$-\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2} \cos^2 \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$
3	2	$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	$\frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$	$\frac{1}{r^2} \cot \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2} \cot \vartheta \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$
1	3	$\frac{\partial}{\partial r}$	$-\frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$	$-\frac{1}{r^2} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$
2	3	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$-\frac{1}{r \sin^2 \vartheta} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$	$-\frac{\cos^2 \vartheta}{r^2 \sin^2 \vartheta} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$
3	3	$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	$-\frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$	$-\frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$

Tabel 2: Berekening van $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$

We gaan nu de termen van $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ berekenen.

$$\begin{aligned} 1: O_{zr} &:= \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} := A_{zr} \frac{\partial}{\partial r} \\ 2: O_{z\vartheta} &:= -\frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} := A_{z\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \end{aligned} \quad (6)$$

			Differentiaal toegepast	vermenigvuldigd met factor $A_{y..}$
1	1	$\frac{\partial}{\partial r}$	$\cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial r^2}$	$\cos^2 \vartheta \frac{\partial^2}{\partial r^2}$
2	1	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$-\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial r} + \cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	$\frac{1}{r} \sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$
1	2	$\frac{\partial}{\partial r}$	$\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	$\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta \frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$
2	2	$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	$-\frac{1}{r} \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$	$\frac{1}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2} \sin^2 \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$

Tabel 3: Berekening van $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

We verzamelen nu alle termen en organiseren die per differentiaal: Uit

	rijen	resultaat voor $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$	resultaat voor $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$
$\frac{\partial}{\partial r}$	2.1 en 3.1	$\frac{1}{r} \cos^2 \vartheta + \frac{1}{r}$	$\frac{1}{r} \sin^2 \vartheta$
$\frac{\partial}{\partial \vartheta}$	1.2, 2.2 en 3.2	$-\frac{2}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta + \frac{1}{r^2} \cot \vartheta$	$\frac{2}{r^2} \sin \vartheta \cos \vartheta$
$\frac{\partial}{\partial \varphi}$	1.3, 2.3 en 3.3		
$\frac{\partial^2}{\partial r^2}$	1.1	$\sin^2 \vartheta$	$\cos^2 \vartheta$
$\frac{\partial^2}{\partial r \partial \vartheta}$	2.1 en 1.2	$\frac{2}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta$	$-\frac{2}{r} \sin \vartheta \cos \vartheta$
$\frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$	3.1 en 1.3		
$\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$	2.2	$\frac{1}{r^2} \cos^2 \vartheta$	$\frac{1}{r^2} \sin^2 \vartheta$
$\frac{\partial^2}{\partial \vartheta \partial \varphi}$	3.2 en 2.3		
$\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$	3.3	$\frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta}$	

Tabel 4: Samenvatting voor $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ (kolom 3) en $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ (kolom 4)

de laatste twee kolommen kunnen we nu het resultaat aflezen:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2} \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (7)$$

Dit is nog niet helemaal wat er in de boeken staat en wat we hadden voorspeld. Stel dat we even geen boek kunnen vinden om te spieken (en zo te checken dat het klopt), maar we weten nog wel dat de eerste twee termen (met de afgeleiden naar r) samengenomen waren. Het idee is dat deze termen ontstaan zijn door de product regel toe te passen op iets van de vorm $\frac{\partial}{\partial r}[a(r)\frac{\partial}{\partial r}]$:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[a(r) \frac{\partial}{\partial r} \right] = a(r) \frac{\partial^2}{\partial r^2} + a'(r) \frac{\partial}{\partial r}$$

Als we dit vergelijken met de eerste twee termen van (7) dan zien we dat we graag zouden willen dat de verhouding tussen $a'(r)$ en $a(r)$ gelijk moet zijn aan $\frac{2}{r}$:

$$\frac{a'(r)}{a(r)} = \frac{2}{r}$$

Nu is dit een differentiaalvergelijking. Misschien dat u de oplossing zo ziet. U kunt ook bijvoorbeeld $a(r) = r^n$ proberen (dat werkt, en dan blijkt $n = 2$ te moeten zijn). Het kan ook deftig als volgt:

$$\frac{d}{dr}[\ln(a(r))] = \frac{2}{r} \quad \Rightarrow \quad \ln(a(r)) = 2 \ln(r) \quad \Rightarrow \quad a(r) = Cr^2$$

Dus dit brengt ons op het idee om het volgende te bekijken:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r}$$

Dus kunnen we concluderen dat de eerste twee termen van (7) als volgt zijn te schrijven:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (8)$$

Iets soortgelijks doen we voor de 3-de en 4-de term van (7). Die hebben te maken met de afgeleiden naar ϑ . We proberen hier:

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \left[b(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right] = b(\vartheta) \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + b'(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta}$$

Aan (7) zien we dat we graag zouden hebben dat:

$$\frac{b'(\vartheta)}{b(\vartheta)} = \cot \vartheta := \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta}$$

Dan is er niet veel fantasie voor nodig om te zien dat $b(\vartheta) = \sin \vartheta$ een goede keus is. Dan hebben we:

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) = \sin \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}$$

Dus ook (hebben we straks nog nodig):

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) = \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \quad (9)$$

Dan worden de 3-de en 4-de term van (7) samengevoegd tot de volgende term:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2} \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} = \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \quad (10)$$

Al we nu (7), (8) en (10) combineren dan krijgen we dus eindelijk (na 7 bladzijden rekenen):

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (11)$$

2 Oplossen van P vergelijking

We pakken nu de differentiaalvergelijking (A.100) op bladzijde 262 aan:

$$\frac{d}{dw} \left[(1 - w^2) \frac{dP}{dw} \right] = \left(\frac{m^2}{1 - w^2} - \lambda \right) P \quad (12)$$

Voor $m = 0$ kan deze vergelijking opgelost worden door reeksontwikkeling. Voor $m > 0$ gaat dit niet rechtstreeks. We gaan nu in het algemeen proberen een oplossing te vinden van de vorm:

$$P(w) = (1 - w^2)^{\frac{m}{2}} L(w) \quad \text{met} \quad m \geq 0$$

De hoop is dat we een reeksontwikkeling kunnen vinden voor L . Hoe het idee ontstaat om deze vorm van $P(w)$ te proberen ziet u in §6.

Invullen. Neem voor het gemak even:

$$G(w) := (1 - w^2)^{\frac{m}{2}} \quad \Rightarrow \quad G' = -2w \frac{m}{2} (1 - w^2)^{\frac{m}{2}-1} = -mw(1 - w^2)^{\frac{m}{2}-1}$$

Dan $P = GL$ en dus:

$$P' = G'L + GL' = -mw(1 - w^2)^{-1}P + (1 - w^2)^{\frac{m}{2}} L'$$

ook:

$$(1 - w^2)P' = -mwP + (1 - w^2)^{\frac{m}{2}+1} L'$$

En dan linkerkant van (12):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dw} [(1 - w^2)P'] &= -mP - mwP' - 2w \left(\frac{m}{2} + 1 \right) (1 - w^2)^{\frac{m}{2}} L' + (1 - w^2)^{\frac{m}{2}+1} L'' \\ &= -mP + m^2 w^2 (1 - w^2)^{-1} P - mw(1 - w^2)^{\frac{m}{2}} L' - w(m + 2)(1 - w^2)^{\frac{m}{2}} L' \\ &\quad + (1 - w^2)^{\frac{m}{2}+1} L'' \\ &= -mP + m^2 w^2 (1 - w^2)^{-1} P - 2w(m + 1)(1 - w^2)^{\frac{m}{2}} L' + (1 - w^2)^{\frac{m}{2}+1} L'' \end{aligned}$$

We brengen de rechterkant van (12) naar links. De tweede term hierboven combineren we dan met de eerste term:

$$m^2 w^2 (1 - w^2)^{-1} P - \frac{m^2}{1 - w^2} P = m^2 (w^2 - 1)(1 - w^2)^{-1} P = -m^2 P$$

Dus de vergelijking wordt nu:

$$-mP - m^2P - 2w(m+1)(1-w^2)^{\frac{m}{2}}L' + (1-w^2)^{\frac{m}{2}+1}L'' + \lambda P = 0$$

Dan komt nu de grote opluchting. De factor $G = (1-w^2)^{\frac{m}{2}}$ is vervelend als we naar een reeksoplossing willen, maar we kunnen deze eruit wegdelven (P wordt dan L):

$$-mL - m^2L - 2w(m+1)L' + (1-w^2)L'' + \lambda L = 0$$

Oftewel:

$$\{\lambda - m(m+1)\}L - 2(m+1)wL' + (1-w^2)L'' = 0 \quad (13)$$

Reeksontwikkeling. Hier gaan we dan een reeks invullen.

$$\begin{aligned} L(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} a_i w^i &\Rightarrow L(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} a_i w^i \\ L'(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} i a_i w^{i-1} &\Rightarrow wL'(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} i a_i w^i \\ L''(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) a_i w^{i-2} &\Rightarrow w^2 L''(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) a_i w^i \\ & &\Rightarrow L''(w) &= \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) a_{i+2} w^i \end{aligned}$$

Als we deze reeksen invullen bij (13) en we kijken naar de coëfficiënt van w^i , dan krijgen we:

$$\{\lambda - m(m+1)\}a_i - 2(m+1)ia_i + (i+2)(i+1)a_{i+2} - i(i-1)a_i = 0 \quad (14)$$

We verzamelen de factoren die voor a_i staan:

$$\begin{aligned}
& \{\lambda - m(m+1)\} - 2(m+1)i - i(i-1) \\
&= \lambda - m(m+1) - 2mi - 2i - i^2 + i \\
&= \lambda - m(m+1) - 2mi - i^2 - i \\
&= \lambda - m(m+1) - 2mi - i(i+1)
\end{aligned}$$

Dus (14) leidt tot de volgende recurrente betrekking:

$$a_{i+2} = \frac{m(m+1) + 2mi + i(i+1) - \lambda}{(i+2)(i+1)} a_i \quad (15)$$

De verdere procedure lijkt nu veel op die van de harmonische oscillator. Zie bladzijde 222 van het boek. Het lijkt erop dat we a_0 en a_1 vrij kunnen kiezen en dan staat de rest van de serie vast via (15). En in feite is er weer sprake van een *even* reeks (die begint met $a_0 : a_0 + a_2 w^2 + a_4 w^4 + \dots$) en een *oneven* reeks (die begint met $a_1 : a_1 w + a_3 w^3 + a_5 w^5 + \dots$). We moeten kijken naar het geval dat één of beide van deze reeksen niet eindigt. Laten we alleen naar de even reeks kijken. Er geldt:

$$\frac{m(m+1) + 2mi + i(i+1) - \lambda}{(i+2)(i+1)} \approx \frac{i^2 - \lambda}{i^2} \rightarrow 1 \quad \text{als } i \rightarrow \infty$$

De reeks gaat dus lijken op $1 + w^2 + w^4 + \dots$. Gelukkig herkennen we die, want we kennen de reeks $1 + x + x^2 + \dots = \frac{1}{1-x}$, dus

$$1 + w^2 + w^4 + \dots = \frac{1}{1 - w^2}$$

Als w in de buurt van ± 1 komt dan wordt dit oneindig. Aangezien $w = \cos \vartheta$ gebeurt dit als ϑ dicht bij 0 of π ligt. Dit is onacceptabel dus *moet* de reeks eindigen. Dat betekent weer dat de teller van (15) op een bepaald moment 0 moet worden, zeg bij $i = k$. Dus dan is

$$\lambda = m(m+1) + 2mk + k(k+1) \quad \text{voor een zekere } k = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

Het getal k is even of oneven. In het eerste geval breekt de oneven reeks niet af en moet dus helemaal 0 zijn en andersom. De oplossing is dus een veelterm van graad k .

Introductie van l . We kijken nog nauwkeuriger naar de uitdrukking voor λ bij (16). Daarbij hebben we in het achterhoofd dat we graag naar iets van de vorm $l(l+1)$ willen

$$\begin{aligned}\lambda &= m(m+1) + 2mk + k(k+1) = m(m+1) + mk + mk + k(k+1) \\ &= m(m+k+1) + k(k+m+1) = (m+k)(m+k+1)\end{aligned}$$

Dus als we nemen:

$$l := m + k$$

dan hebben we inderdaad $\lambda = l(l+1)$.

Conclusie. De acceptabele oplossingen voor vergelijking (12) zijn (op een constante na):

Geassocieerde Legendre-functies

$$P_{lm}(w) = (1-w^2)^{\frac{|m|}{2}} L_{l-|m|}(w) \quad \text{met } l \text{ en } m \text{ geheel en } 0 \leq |m| \leq l$$

Hierbij is $L_{l-|m|}$ dus een veelterm van graad $l-|m|$. Als m even is dan is P_{lm} zelf ook een polynoom. Met behulp van (15) kunnen we een aantal voorbeelden van deze *Legendre-functies* berekenen. Als u de officiële standaard wilt hebben moet u de volgende keuze voor $a_{l-|m|}$ maken:

$$a_{l-|m|} = \frac{(2l)!}{2^l l! m!}$$

We beginnen dan dus bij de hoogste w -macht: $a_{l-|m|} w^{l-|m|}$ en dalen dan af via de omgekeerde van de recurrente betrekking (15):

$$a_i = \frac{(i+2)(i+1)}{(m+i)(m+i+1) - l(l+1)} a_{i+2}$$

Op internet kunt u makkelijk voorbeelden vinden.

3 Opgave 1. Impulsmomentoperatoren

OPGAVE 1

Bereken de impulsmomentoperatoren $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ en $\hat{L}_z$ in termen van de poolcoördinaten met behulp van (A.106).

Zie in het boek (A.91) op bladzijde 257 voor de definitie van de transformatie naar poolcoördinaten. Verder gebruiken we de uitdrukkingen voor $\frac{\partial}{\partial x}$ en dergelijke zoals vermeld in (1), (2) en (3). Hier gaan we:

De operator $\hat{L}_x$.

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

Dus

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \hat{L}_x &= y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ &= r \sin \vartheta \sin \varphi \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \\ &\quad - r \cos \vartheta \left(\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= -\sin^2 \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cos^2 \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Resultaat:

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

De operator $\hat{L}_y$.

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Dus

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \hat{L}_y &= z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\
&= r \cos \vartheta \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad - r \sin \vartheta \cos \varphi \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \\
&= \cos^2 \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin^2 \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \\
&= \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}$$

Resultaat:

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

De operator $\hat{L}_z$.

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Dus

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \hat{L}_z &= x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \\
&= r \sin \vartheta \cos \varphi \left(\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad - r \sin \vartheta \sin \varphi \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
&= \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}$$

Resultaat:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

4 Opgave 2. Afgeleide operatoren

OPGAVE 2

Bereken de operatoren $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ en $\hat{L}_+$ in termen van de poolcoördinaten met behulp van (A.107).

De factor $i\hbar$ is wat vervelend in lange berekeningen. Daarom schrijven we de resultaten van de vorige opgave even als volgt op. Impuls operatoren in poolcoördinaten:

$$-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (17)$$

$$-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_y = -\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (18)$$

$$-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z = -\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (19)$$

Berekening $\hat{L}^2$. Neem aan beide kanten kwadraat van (17):

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}_x^2 &= \left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2 \\ &= \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &\quad + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= \sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} - \sin\varphi\frac{1}{\sin^2\vartheta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi\cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta\partial\varphi} \\ &\quad + \cot\vartheta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial^2}{\partial\vartheta\partial\varphi} \\ &\quad + \cot^2\vartheta\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \cot^2\vartheta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned}$$

Nu praktisch hetzelfde voor $\hat{L}_y^2$. Neem aan beide kanten kwadraat van (18):

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}_y^2 &= \left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2 \\
&= -\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) - \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
&+ \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
&= \cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cos\varphi\frac{1}{\sin^2\vartheta}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cos\varphi\cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta\partial\varphi} \\
&+ \cot\vartheta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial^2}{\partial\vartheta\partial\varphi} \\
&+ \cot^2\vartheta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \cot^2\vartheta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}$$

We gaan nu de som van beide bovenstaande uitdrukkingen uitrekenen en daarmee dus $-\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}_x^2 - \frac{1}{\hbar^2}\hat{L}_y^2$. Ze bevatten allebei 7 termen. Kijken we bijvoorbeeld in beide uitdrukkingen naar de tweede term dan zien we dat deze tegen elkaar wegvallen. Dit geldt ook voor de 3-de, 5-de en de 7-de. De som van eerste termen worden eenvoudig $\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}$ immers $\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1$. Ook de vierde en de zesde termen leveren iets op. Zo zien we dat geldt:

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) = \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot^2\vartheta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (20)$$

Als we tenslotte van (19) beide kanten kwadrateren dan krijgen we:

$$-\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}_z^2 = \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Tellen we dit op bij (20) en gebruiken we ook (9) nog dan krijgen we:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\hbar^2}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) &= \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + (\cot^2\vartheta + 1)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
&= \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}
\end{aligned}$$

Hierbij hebben we ook nog gebruikt dat

$$\cot \vartheta^2 + 1 = \frac{\cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta} + \frac{\sin^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta} = \frac{1}{\sin^2 \vartheta}$$

Het resultaat is nu:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

En hiermee hebben we (A.108a) dus te pakken.

Berekening $\hat{L}_+$. We berekenen ook maar gelijk $\hat{L}_-$. We herhalen de impuls operatoren in poolcoördinaten. Vermenigvuldig (17) en (18) daartoe met i :

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned}$$

Op basis hiervan $\hat{L}_\pm$ uitrekenen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \hat{L}_\pm &:= \frac{1}{\hbar} \hat{L}_x \pm i \frac{1}{\hbar} \hat{L}_y \\ &= i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \mp \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= (\pm \cos \varphi + i \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta (\mp \sin \varphi + i \cos \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= \pm (\cos \varphi \pm i \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta (\pm i \sin \varphi + \cos \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= e^{\pm i\varphi} \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned}$$

We verkrijgen dus het resultaat (A.108b):

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

5 Opgave 3. $\hat{L}_+$ op voorbeelden.

OPGAVE 3

Laat de operator $\hat{L}_+$ uit (A.108b) los op de functies Y_{20} , Y_{21} en Y_{22} uit de voorbeelden (A.103).

De voorbeelden zagen er als volgt uit:

$$\begin{aligned} Y_{20} &= 3 \cos^2 \vartheta - 1 \\ Y_{21} &= \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \\ Y_{22} &= \sin^2 \vartheta e^{i2\varphi} \end{aligned}$$

Hier moeten we dus de operator

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

op loslaten. en we verwachten (hopen) dan dat we, via de ladder, van $Y_{20} \rightarrow Y_{21} \rightarrow Y_{22} \rightarrow Y_{20} \rightarrow 0$ zullen klimmen. Vooraf is goed om op te merken dat we iet persé precies op de functie uit hoeven te komen. Als het een constante scheelt is dat niet erg. Het gaat er immers om dat het resultaat de verwachte eigenwaarden zal hebben. Om dezelfde reden passen we steeds $\frac{1}{\hbar} \hat{L}_+$ toe in plaats van $\hat{L}_+$ zelf.

Het geval Y_{20} . De functie Y_{20} hangt niet van φ af dus in feite hoeven we alleen maar naar ϑ te differentiëren en te vermenigvuldigen met $e^{i\varphi}$:

$$\frac{1}{\hbar} \hat{L}_+ Y_{20} = e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (3 \cos^2 \vartheta - 1) = e^{i\varphi} \cdot -6 \sin \vartheta \cos \vartheta = -6 Y_{21}$$

Klaar!

Het geval Y_{21} .

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar} \hat{L}_+ Y_{21} &= e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \\
&= e^{i\varphi} \{ e^{i\varphi} (-\sin^2 \vartheta + \cos^2 \vartheta) + i \cot \vartheta \sin \vartheta \cos \vartheta i e^{i\varphi} \} \\
&= e^{i2\varphi} \{ -\sin^2 \vartheta + \cos^2 \vartheta - \cos^2 \vartheta \} \\
&= -\sin^2 \vartheta e^{i2\varphi} = -Y_{22}
\end{aligned}$$

Klopt dus.

Het geval Y_{22} .

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar} \hat{L}_+ Y_{22} &= e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sin^2 \vartheta e^{i2\varphi} \\
&= e^{i\varphi} \{ e^{i2\varphi} 2 \sin \vartheta \cos \vartheta + i \cot \vartheta \sin^2 \vartheta 2i e^{i2\varphi} \} \\
&= e^{i3\varphi} \{ 2 \sin \vartheta \cos \vartheta - 2 \sin \vartheta \cos \vartheta \} = 0
\end{aligned}$$

Aan het eind van de ladder!

6 Opgave 4. $\hat{L}_+$ op P .

OPGAVE 4

Laat de operator $\hat{L}_+$ werken op de functie $P(\cos \vartheta)$. Doe dit nogmaals op het resultaat. Ziet u het patroon ontstaan? Zo, ja, wat is de uitdrukking voor $L_{lm}(w)$ in termen van $L_{l0}(w) = P(w)$?

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar} \hat{L}_+ P(\cos \vartheta) &= e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) P(\cos \vartheta) \\
&= e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} P(\cos \vartheta) = -e^{i\varphi} \sin \vartheta P'(\cos \vartheta)
\end{aligned}$$

Op dit laatste resultaat passen we $\frac{1}{\hbar}\hat{L}_+$ nog een keer toe:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\hat{L}_+\{-e^{i\varphi}\sin\vartheta P'(\cos\vartheta)\} &= -e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)e^{i\varphi}\sin\vartheta P'(\cos\vartheta) \\
&= -e^{i\varphi}\{e^{i\varphi}[\cos\vartheta P'(\cos\vartheta) - \sin^2\vartheta P''(\cos\vartheta)] - i\cot\vartheta e^{i\varphi}\sin\vartheta P'(\cos\vartheta)\} \\
&= -e^{i2\varphi}\{[\cos\vartheta P'(\cos\vartheta) - \sin^2\vartheta P''(\cos\vartheta)] + \cos\vartheta P'(\cos\vartheta)\} \\
&= e^{i2\varphi}\sin^2\vartheta P''(\cos\vartheta)
\end{aligned}$$

U kunt het nu nog een keer doen, maar we kunnen ook vast gokken dat het patroon is:

$$\left(\frac{1}{\hbar}\hat{L}_+\right)^m P(\cos\vartheta) = (-1)^m e^{im\varphi} \sin^m\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta) \quad (21)$$

en het nu vervolgens met volledige inductie naar m bewijzen:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{\hbar}\hat{L}_+\right)^{m+1} P(\cos\vartheta) &= \frac{1}{\hbar}\hat{L}_+\left(\frac{1}{\hbar}\hat{L}_+\right)^m P(\cos\vartheta) \\
&= \frac{1}{\hbar}\hat{L}_+\left[(-1)^m e^{im\varphi} \sin^m\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta)\right] \\
&= (-1)^m e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left[e^{im\varphi} \sin^m\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta)\right] \\
&= (-1)^m e^{i\varphi}\left\{\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left[e^{im\varphi} \sin^m\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta)\right] + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\left[e^{im\varphi} \sin^m\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta)\right]\right\} \\
&= (-1)^m e^{i\varphi}\{e^{im\varphi}\left[m\sin^{m-1}\vartheta\cos\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta) - \sin^{m+1}\vartheta P^{(m+1)}(\cos\vartheta)\right] \\
&\quad + i\cot\vartheta ime^{im\varphi}\sin^m\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta)\} \\
&= (-1)^m e^{i\varphi}e^{im\varphi}\{m\sin^{m-1}\vartheta\cos\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta) - \sin^{m+1}\vartheta P^{(m+1)}(\cos\vartheta) \\
&\quad - \cos\vartheta m\sin^{m-1}\vartheta P^{(m)}(\cos\vartheta)\} \\
&= (-1)^m e^{i(m+1)\varphi}\left\{-\sin^{m+1}\vartheta P^{(m+1)}(\cos\vartheta)\right\} \\
&= (-1)^{m+1} e^{i(m+1)\varphi} \sin^{m+1}\vartheta P^{(m+1)}(\cos\vartheta)
\end{aligned}$$

Dus inderdaad geldt (21) ook als we m vervangen door $m+1$.

Welke conclusie kunnen we nu uit dit patroon trekken? Welnu: we wisten, via de laddermethode uit §A.11 dat als we $\hat{L}_+$ m keer op een oplossing Y_{l0} loslaten, dan krijgen we iets met eigenwaarde $m\hbar$, dus iets dat we Y_{lm} zouden willen noemen en deze functie heeft de gedaante:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} P_{lm}(\cos \vartheta)$$

Vergelijken we dit met de rechterkant van (21), dan zien we dat (we negeren de constanten $\hbar$ en $(-1)^m$) we hebben:

$$P_{lm}(\cos \vartheta) = \sin^m \vartheta P^{(m)}(\cos \vartheta)$$

Bedenken we nu dat $\cos \vartheta = w$ en dus dat $\sin \vartheta = \sqrt{1 - \cos^2 \vartheta}$ dan zien we dat

$$P_{lm}(w) = (1 - w^2)^{\frac{1}{2}m} P^{(m)}(w)$$

waarschijnlijk een goede gok is voor de oplossing van de vergelijking (A.100) op bladzijde 262 (in dit document (12)).

7 De Laplace-operator ∇^2 herbezoekt.

In deze paragraaf een uiterst korte schets hoe we tot de formule voor ∇^2 in poolcoördinaten kunnen komen via een compact argument uit de differentiaalmeetkunde. Het idee is dat we een zogenaamde metriek hebben. Officieel is dat een (0,2)-tensor.

Deze tensor definieert een afstand ds tussen twee punten P en Q . In het geval dat we coördinaten hebben gekozen, kun je deze afstand ook uitdrukken in een matrix van getallen. Dan is $P = (x^1, \dots, x^N)$ en $Q = (x^1 + dx^1, \dots, x^N + dx^N)$ en ds wordt bepaald via de formule

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (22)$$

De rechterkant van (22) wordt ook wel een *lijnelement* genoemd. Hierbij is $g_{\mu\nu}$ een N bij N matrix, waarvan de elementen kunnen afhangen van de coördinaten. Er wordt gesommeerd over de indices μ en ν : de Einstein sommatie conventie. Verder noemen we de determinant van deze matrix g .

Nu is (22) erg abstract dus we geven twee voorbeelden. Ten eerste de gewone rechthoekige (orthonormale) coördinaten (x, y, z) (dus $N = 3$). De afstand tussen twee dicht bij elkaar liggende punten is dan, volgens de driedimensionale Pythagoras:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (23)$$

De 3 bij 3 matrix $g_{\mu\nu}$ is in dit geval dus heel simpel:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (24)$$

En de elementen hangen niet eens van de coördinaten af. Verder is hier $g = 1$.

Ons tweede belangrijke voorbeeld komt natuurlijk van de poolcoördinaten. Zie hiervoor weer figuur A.15 op bladzijde 257. Deze coördinaten zijn wel orthogonaal, de assen staan loodrecht op elkaar, maar niet orthonormaal. Als we r variëren (en ϑ en φ vasthouden) dan gaat de afstand (s) evenredig mee $ds = dr$. Als we ϑ variëren, dan zien we dat $ds = r d\vartheta$. En tenslotte variëren we φ : $ds = r \sin \vartheta d\varphi$. Dus het lijnelement wordt nu:

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\vartheta^2 + r^2 \sin^2 \vartheta d\varphi^2 \quad (25)$$

Dit komt overeen met de matrix¹:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \vartheta \end{pmatrix} \quad (26)$$

Sommige van deze elementen (g_{22} en g_{33}) hangen nu dus wel van de coördinaten af. Verder is nu $g = r^4 \sin^2 \vartheta$ en dus $\sqrt{g} = r^2 \sin \vartheta$.

Stel nu dat V^μ een (contravariant) vectorveld is. Dat wil zeggen dat de componenten op een bepaalde manier transformeren, als we overgaan

¹Het feit dat het weer een diagonaalmatrix is hangt samen met de orthogonaliteit.

op andere coördinaten. Men kan nu bewijzen dat de uitdrukking (weer sommeren over μ)

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^\mu} (\sqrt{g} V^\mu) \quad (27)$$

een scalarveld is. Dat wil zeggen: dit is een functie van de coördinaten en de waarden hangen niet af van welk coördinaatsysteem je kiest. In feite komt dit overeen met $\vec{\nabla} \cdot \vec{V}$. Laten we maar eens kijken naar de (x, y, z) coördinaten. Dan was $g = 1$ dus wordt (27):

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} (V^\mu) = \frac{\partial}{\partial x} V^x + \frac{\partial}{\partial y} V^y + \frac{\partial}{\partial z} V^z = \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \quad (28)$$

Maar nu willen we naar $\nabla^2 u$ toe, waarbij u een scalaire functie is. Bekijken we nu $\frac{\partial u}{\partial x^\mu}$, dan lijkt dat een vectorveld

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \quad \frac{\partial u}{\partial y} \quad \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (29)$$

de rol van V^μ goed zou kunnen spelen. En voor de poolcoördinaten:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial r} \quad \frac{\partial u}{\partial \vartheta} \quad \frac{\partial u}{\partial \varphi} \right) \quad (30)$$

Als we in het geval (29) dit vectorveld voor V^μ nemen, dan komen we goed in de buurt want als we dat invullen in (28) dan krijgen we inderdaad $\nabla^2 u$. Maar in dit geval gaat het (door de eenvoud van de (x, y, z) coördinaten) toevallig goed.

De complicatie zit 'm in de vraag wat voor soort vector we krijgen als we de gradiënt van u nemen, zoals in (29) en (30). Het blijkt dat het hier dan zogenaamde *covariante* vectoren betreft. Daarom hebben we die bewust als een rijmatrix geschreven. Maar nu kunnen we van een covariante vector een *contravariante* vector maken met behulp van de matrix $g_{\mu\nu}$, of beter met de inverse van die matrix, die we dan met boven indices schrijven: $g^{\mu\nu}$. Dus we nemen:

$$V^\mu := g^{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x^\nu}$$

Laten we dit eens doen voor de poolcoördinaten:

$$V^\mu := g^{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x^\nu} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} & \frac{\partial u}{\partial \vartheta} & \frac{\partial u}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \vartheta} \\ \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial u}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

Dan komt nu de finale: we vullen dit in bij (27) met $\sqrt{g} = r^2 \sin \vartheta$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial x^\mu} (r^2 \sin \vartheta V^\mu) = \\ & \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r^2 \sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial \vartheta} (r^2 \sin \vartheta \frac{1}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \vartheta}) + \frac{\partial}{\partial \varphi} (r^2 \sin \vartheta \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial u}{\partial \varphi}) \right] = \\ & \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left[\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial u}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial \vartheta}) + \frac{\partial}{\partial \varphi} (\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial u}{\partial \varphi}) \right] = \\ & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial u}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

En dit klopt met (11) op bladzijde 8. Klaar!