Mecánica Cuántica I
DF - FCEx - UNLP
2do semestre 2023

PROF: Pablo Pisani
JTP: Lucas Manzo
AD: Tomás Vignau

Práctica adicional: funciones especiales

A.1 Polinomios de Hermite

1. En el presente ejercicio se estudian propiedades de los *polinomios de Hermite* $H_n(q)$, que son soluciones de la *ecuación de Hermite*

$$\left(\frac{d^2}{dq^2} - 2q\frac{d}{dq} + 2n\right)H_n(q) = 0 \ , \qquad n \in \mathbb{N}_0 \ .$$

   a. Probar que dos polinomios de Hermite $H_n(q)$ y $H_m(q)$ son ortogonales si $n \neq m$, respecto del producto interno

$$(H_n, H_m) := \int_{-\infty}^{\infty} dq \, e^{-q^2} H_n(q) H_m(q) \ .$$

   Sugerencia: comenzar escribiendo la ecuación de Hermite para $H_n(q)$ en su forma de Sturm-Liouville. Luego multiplicarla por $H_m(q)$ e integrar.

   b. Derivando la ecuación de Hermite, probar que $H_n'(q) \propto H_{n-1}(q)$. En particular, si se normalizan los polinomios de manera tal que el coeficiente principal de $H_n(q)$ sea $a_n = 2^n$, probar

$$H_n'(q) = 2nH_{n-1}(q) \ .$$

   c. Volviendo a usar la normalización del inciso anterior, probar la identidad

$$H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - H_n'(q) \ .$$

   Sugerencia: usar la ecuación de Hermite para $H_{n+1}(q)$ y aplicar la identidad del inciso anterior.

d. Volviendo a usar la normalización de los incisos anteriores, probar la fórmula de Rodrigues

$$H_n(q) = (-1)^n \, e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} \; .$$

Sugerencia: comenzar escribiendo la ecuación de Hermite para $H_n(q)$ en su forma de Sturm-Liouville. Definir luego la función $\xi_n(q) = e^{q^2} H_n(q)$ para obtener la ecuación $\xi'_{n-1}(q) + \xi_n(q) = 0$. Completar la demostración por inducción.

e. Volviendo a usar la normalización de los incisos anteriores, probar

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \, e^{-q^2} H_n(q) H_m(q) = \sqrt{\pi} \, 2^n n! \, \delta_{nm} \; .$$

Sugerencia: repetir los pasos del inciso 1a considerando la posibilidad que sea $n = m$. En dicho caso en que los índices sean iguales, probar la validez de la identidad para $n = 0$ y luego probarla para n arbitrario por inducción.

f. Se define la exponencial de la derivada mediante la serie de potencias

$$e^{t \frac{d}{dq}} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \frac{d^n}{dq^n} \; .$$

Sabiendo entonces que para toda función analítica $f(q)$ vale $e^{t \frac{d}{dq}} f(q) = f(q+t)$ (probarlo), emplear la fórmula de Rodrigues para probar la identidad

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(q) = e^{2qt - t^2} \; .$$

Nota: el lado derecho de esta igualdad se conoce como la *funcional generatriz* de los polinomios de Hermite.

g. Evaluar la identidad anterior en $q = 0$ para probar que $H_{2n}(0) = (-1)^n \, (2n)!/n!$.

A.2 Polinomios de Legendre y armónicos esféricos

2. Defínanse los siguientes operadores:

$$\frac{\hat{L}_z}{\hbar} = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \; , \qquad \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \, \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \; .$$

a. Probar que las autofunciones $\Phi(\phi)$ del operador $\hat{L}_z/\hbar$ son $\Phi(\phi) \propto e^{im\phi}$, con autovalor $m \in \mathbb{C}$. Imponiendo la condición de periodicidad $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, probar que $m \in \mathbb{N}_0$.

b. A partir del inciso anterior y de la sustitución $u = \cos\theta$, probar que la ecuación de autovalores $(\hat{L}^2/\hbar^2) Y(\theta, \phi) = \lambda \, Y(\theta, \phi)$ se convierte en la *ecuación de Legendre*

$$\left\{\frac{d}{du}\left[(1-u^2)\frac{d}{du}\right]+\left[\lambda-\frac{m^2}{1-u^2}\right]\right\}P(u)=0\ ,$$

donde $Y(\theta,\phi)=P(u)\Phi(\phi)$. ¿Cuál es el rango de la variable u?

c. Considerando el caso $m=0$, y proponiendo una solución en serie de potencias (método de Frobenius-Fuchs) de la forma

$$P(u)=\sum_{i=0}^{\infty}a_i\,u^i\ ,$$

hallar una relación de recurrencia entre los coeficientes a_i. Justificar que puedan considerarse a las soluciones pares e impares separadamente.

d. Continuando en el caso $m=0$, escribir al autovalor λ como $\lambda=l(l+1)$ y probar que si $l\notin\mathbb{N}_0$ entonces la serie anterior se comporta como una serie geométrica para grandes valores del índice i, la cual diverge para $u=1$. Para evitar esta divergencia, se corta la serie en $i=l\in\mathbb{N}_0$, resultando así que la solución son los *polinomios de Legendre* $P_l(u)$.

e. A partir de ahora, considerar el caso $m>0$. Se denominarán $P_l^m(u)$ a las soluciones de la ecuación de Legendre. Proponiendo una sustitución de la forma $P_l^m(u)=(1-u^2)^{m/2}Q_l^m(u)$, probar que la nueva función $Q_l^m(u)$ satisface la ecuación diferencial

$$\left\{(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}-2(m+1)u\,\frac{d}{du}+\Big(\lambda-m(m+1)\Big)\right\}Q_l^m=0\ .$$

f. Derivando m veces a la ecuación diferencial de Legendre para el caso $m=0$, probar

$$\left\{(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}-2(m+1)u\,\frac{d}{du}+\Big(l(l+1)-m(m+1)\Big]\right)\frac{d^mP_l}{du^m}=0\ .$$

Concluir así que $Q_l^m=d^mP_l/du^m$ y que $\lambda=l(l+1)$. Notar que, en particular, los autovalores no dependen de m.

g. Sabiendo de los incisos 2c y 2d que los polinomios de Legendre P_l son polinomios de grado l, probar que las soluciones halladas deben satisfacer $0\leq m\leq l$. Para $m<0$ pueden definirse los polinomios $P_l^m\equiv P_l^{-|m|}$ como proporcionales a $P_l^{|m|}$, de manera que el rango completo del parámetro m resulta ser $-l\leq m\leq l$.

h. Reconstruyendo los incisos anteriores en reversa, escribir a las autofunciones de $\hat{L}^2/\hbar^2$ como

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=N_{lm}\,(\sin\theta)^m\frac{d^m}{d(\cos\theta)^m}P_l(\cos\theta)\,e^{im\phi}\ ,$$

donde N_{ml} es una constante de normalización. Estas funciones son conocidas como *armónicos esféricos*. Los correspondientes son $l(l+1)$.

i. Escribir los tres armónicos esféricos con $l=1$. Luego escribir a las tres coordenadas (x,y,z) en términos del radio r y de $Y_1^m(\theta,\phi)$.

3. Seguir los siguientes pasos para probar propiedades de los polinomios asociados de Legendre, que implican propiedades de los armónicos esféricos.

   a. Probar que los polinomios de Legendre $P_l(u)$ (es decir, para $m = 0$) son proporcionales a $\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l$.
   Sugerencia: comenzar definiendo la función $y_l(u) := (u^2-1)^l$ y verificar que satisface la ecuación diferencial $(1-u^2)y_l'(u) + 2lu\,y_l(u) = 0$. Luego derivar l veces esta ecuación diferencial para ver que $d^l y_l/du^l$ satisface la ecuación diferencial de Legendre.

   b. Normalizando a los polinomios de Legendre $P_l(u)$ (es decir, para $m = 0$) según $P_l(1) = 1$, probar la fórmula de Rodrigues

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l\, l!}\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l \ .$$

   Sugerencia: escribir $(u^2-1)^l = (u+1)^1(u-1)^l$ y derivar aplicando la regla del producto.

   c. Recordando que en los incisos 2e y 2f se probó que para $m \geq 0$ vale $P_l^m(u) \propto (1-u^2)^{m/2} d^m P_l(u)/du^m$, verificar que si se define al factor de proporcionalidad como $(-1)^m$ (valor conocido como *fase de Condon-Shortley*) entonces

$$P_l^m(u) = \frac{(-1)^m}{2^l\, l!}(1-u^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{du^{l+m}}(u^2-1)^l \ .$$

   Observación: esta expresión, que generaliza la fórmula de Rodrigues, permite probar las diversas relaciones de recurrencia que existen en la literatura para los polinomios $P_l^m(u)$.

   d. Si bien la expresión del inciso anterior se obtuvo formalmente para m dentro del rango $0 \leq m \leq l$, notar que la misma es aplicable a todo el rango $-l \leq m \leq l$. Usándola entonces para definir a los polinomios asociados de Legendre $P_l^{-|m|}(u)$, probar la identidad

$$P_l^{-|m|}(u) = (-1)^{|m|}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\,P_l^{|m|}(u) \ .$$

   Sugerencia: escribir $(u^2-1)^l = (u+1)^1(u-1)^l$ y derivar aplicando la regla del producto.

4. Seguir los siguientes pasos para probar las relaciones de ortonormalidad entre los polinomios asociados de Legendre, que implica la ortonormalidad entre armónicos esféricos.

   a. Probar que dos polinomios asociados de Legendre $P_l^m(u)$ y $P_{l'}^m(u)$ son ortogonales si $l \neq l'$ respecto del producto interno

$$(P_l^m, P_{l'}^m) := \int_{-1}^{1} du\, P_l^m(u) P_{l'}^m(u) \ .$$

b. Probar la identidad

$$\int_{-1}^{1} du\left(P_l^m(u)\right)^2 = \frac{(-1)^{l+m}}{(2^l l!)^2}\int_{-1}^{1} du\,(u^2-1)^l\,\frac{d^{l+m}}{du^{l+m}}\left((1-u^2)^m\frac{d^{l+m}}{du^{l+m}}(u^2-1)^l\right)\,.$$

Sugerencia: utilizar el resultado del inciso 3c y luego integrar por partes $l+m$ veces.

c. Resolviendo integral del inciso anterior del lado derecho, probar

$$\int_{-1}^{1} du\left(P_l^m(u)\right)^2 = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\,.$$

Sugerencia: notar que la derivada dentro de la integral es un polinomio de orden cero, es decir, una constante. Entonces comenzar determinando el valor de dicha constante.

d. Los resultados de los incisos 4a y 4c pueden resumirse en una única expresión:

$$(P_l^m, P_{l'}^m) := \int_{-1}^{1} du\, P_l^m(u) P_{l'}^m(u) = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\,\delta_{ll'}\,.$$

Usarla para probar la relación de ortonormalidad de los armónicos esféricos:

$$\begin{aligned}(Y_{lm}, Y_{l'm'}) &:= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\phi) Y_{l'm'}(\theta,\phi)^* \\ &= (N_{lm})^2 \frac{4\pi}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\,\delta_{ll'}\delta_{mm'}\,.\end{aligned}$$

Sugerencia: comenzar integrando respecto a ϕ.

e. Determinar la constante de normalización N_{lm} tal que $(Y_{lm}, Y_{l'm'}) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$.

5. Seguir los siguientes pasos para hallar la funcional generatriz de los polinomios de Legendre:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2ut+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l\, P_l(u)\,, \qquad |t|<1\,. \tag{A}$$

a. Empleando el operador laplaciano en coordenadas esféricas, mostrar por separación de variables que si $f(\boldsymbol{x})$ es una función que no depende del ángulo ϕ tal que $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = 0$, entonces

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l\, r^l P_l(\cos\theta)\,.$$

b. Sean $\boldsymbol{x} = (x,y,z)$ y $\boldsymbol{x}_0 = (x_0,y_0,z_0)$ dos puntos cualesquiera del espacio tales que $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_0$. Escribiendo al operador laplaciano en coordenadas cartesianas, probar que

$$\nabla^2\left(\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|}\right) = 0\,.$$

c. Para el caso $\boldsymbol{x}_0 = (0, 0, 1)$ y $|\boldsymbol{x}| = t$, probar $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0| = \sqrt{1 - 2t\,\cos\theta + t^2}$.

d. Los tres incisos anteriores implican

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l\, t^l P_l(u) \ ,$$

donde $u = \cos\theta$. Para determinar las constantes A_l, evaluar en $u = 1$ (recordando $P_l(1) = 1$) y considerar $|t| < 1$. Esto prueba la ecuación (A).

A.3 Polinomios de Laguerre

6. En el presente ejercicio se estudian propiedades de los *polinomios asociados de Laguerre* $L_n^{(\alpha)}(x)$, que son soluciones de la *ecuación asociada de Laguerre.* Concretamente, se busca llegar a la correspondiente fórmula de Rodrigues.

$$\left(x\frac{d^2}{dx^2} + (\alpha+1-x)\frac{d}{dx} + n\right)L_n^{(\alpha)}(x) = 0 \ , \qquad n \in \mathbb{N}_0 \ .$$

a. Derivando esta ecuación diferencial, probar que $dL_n^{(\alpha)}(x)/dx \propto L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x)$. En particular, si se normalizan los polinomios de manera tal que el coeficiente principal de $L_n^{(\alpha)}(q)$ sea $a_n^{(\alpha)} = (-1)^n/n!$, probar

$$\frac{dL_n^{(\alpha)}(x)}{dx} = -L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x) \ .$$

b. Probar que la ecuación asociada de Laguerre puede escribirse en la forma de Sturm-Liouville

$$\left\{\frac{d}{dx}\left(x^{\alpha+1}e^{-x}\frac{d}{dx}\right) + n\,x^{\alpha}e^{-x}\right\}L_n^{(\alpha)}(x) = 0 \ .$$

c. Volviendo a usar la normalización del inciso 6a, probar la fórmula de Rodrigues

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha}\,e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^{n+\alpha}e^{-x}) \ .$$

Sugerencia: empleando la forma de Sturm-Liouville y el resultado del problema 6a, escribir

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha}e^x}{n}\frac{d}{dx}\left(x^{\alpha+1}e^{-x}L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x)\right) \ .$$

Repetir este procedimiento n veces y observar quién es $L_0^{(\alpha+n)}(x)$.

7. Seguir los siguientes pasos para hallar la función generatriz de los polinomios asociados de Laguerre.

a. Recordar que la fórmula integral de Cauchy permite escribir a la n-ésima derivada de una función como

$$\frac{d^n}{dx^n} f(x) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_\gamma dz \frac{f(z)}{(z-x)^{n+1}} \ ,$$

donde γ es una curva de integración cerrada en el plano complejo que encierra a la singularidad $z = x$. Utilizar esta integral junto con la fórmula de Rodrigues hallada en el ejercicio anterior para probar

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha}\, e^x}{2\pi i} \oint_\gamma ds \frac{s^{n+\alpha} e^{-s}}{(s-x)^{n+1}} \ .$$

b. Mediante la sustitución $z = (s-x)/s$, probar

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} dz \frac{e^{-zx/(1-z)}}{(1-z)^{\alpha+1} z^{n+1}} \ ,$$

donde γ' es una curva cerrada en el plano complejo que encierra al origen $z = 0$.

c. En particular, considerar que γ' es una circunferencia de radio menor a 1. Sea t un parámetro tal que $|t/z| < 1$ para todo punto z contenido en γ'. Utilizando el teorema de los residuos, probar entonces que vale la relación

$$\sum_{n=0}^{\infty} t^n L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{e^{-tx/(1-z)}}{(1-t)^{\alpha+1}} \ .$$

El lado derecho es la funcional generatriz de los polinomios asociados de Laguerre.

8. Seguir los siguientes pasos para probar las relaciones de ortogonalidad entre polinomios asociados de Laguerre.

a. Probar que dos polinomios de Laguerre $L_n^{(\alpha)}(x)$ y $L_{n'}^{(\alpha)}(x)$, con $n \neq n'$ y con $\alpha > -1$, son ortogonales respecto al producto interno

$$(L_n^{(\alpha)}, L_{n'}^{(\alpha)}) := \int_0^\infty dx\, x^\alpha e^{-x}\, L_n^{(\alpha)}(x) L_{n'}^{(\alpha)}(x) \ .$$

Sugerencia: partir de la forma de Sturm-Liouville para la ecuación asociada de Laguerre con índice n. Luego multiplicarla por $L_{n'}^{(\alpha)}(x)$ e integrar.

b. Sea $p(x)$ un polinomio arbitrario de orden n, de modo que es posible escribir $p(x) = \sum_{k=0}^n b_k x^k$. Probar

$$\int_0^\infty dx\, x^\alpha e^{-x}\, p(x) L_n^{(\alpha)}(x) = (-1)^n b_n \int_0^\infty dx\, x^{n+\alpha} e^{-x} \ .$$

c. La función Gamma está definida por medio de la integral

$$\Gamma(s) := \int_0^\infty dx\, x^{s-1} e^{-x} \ .$$

Considerar ahora que el polinomio $p(x)$ del inciso anterior es $L_n^{(\alpha')}(x)$. Recordando que los polinomios asociados de Laguerre están normalizados de manera tal que su coeficiente dominante es $(-1)^n/n!$, probar

$$\int_0^\infty dx\, x^\alpha e^{-x}\, L_n^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha')}(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \,.$$

Observación: para el caso $\alpha = \alpha'$, este resultado junto con el del inciso 8a se pueden resumir en una única expresión:

$$\int_0^\infty dx\, x^\alpha e^{-x}\, L_n^{(\alpha)}(x) L_{n'}^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}\,\delta_{nn'} \,. \tag{B}$$

d. A partir de la fórmula de Rodrigues, probar que el coeficiente de orden $n-1$ correspondiente al polinomio $L_n^{(\alpha)}(x)$ es $a_{n-1}^{(\alpha)} = (-1)^{n-1}\frac{n+\alpha}{(n-1)!}$

e. Sea $q(x)$ un polinomio arbitrario de orden $n+1$, de modo que es posible escribir $p(x) = \sum_{k=0}^{n+1} c_k x^k$. Probar

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dx\, x^\alpha e^{-x}\, q(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= (-1)^n \int_0^\infty dx\, \Big((n+1)c_{n+1}\, x + c_n\Big)\, x^{n+\alpha} e^{-x} \\ &= (-1)^n \Big((n+1)c_{n+1}\Gamma(n+\alpha+2) + c_n\Gamma(n+\alpha+1)\Big) \,.\end{aligned}$$

f. Considerar ahora que el polinomio $q(x)$ del inciso anterior es $xL_n^{(\alpha)}(x)$. Usando el resultado del inciso 8d, probar

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty dx\, x^{\alpha+1} e^{-x} \Big(L_n^{(\alpha)}(x)\Big)^2 \\ &\qquad = \frac{1}{n!}\Big((n+1)\,\Gamma(n+\alpha+2) - n(n+\alpha)\,\Gamma(n+\alpha+1)\Big) \,.\end{aligned}$$

g. Probar mediante una integración por partes que la función Gamma satisface

$$\Gamma(s+1) = s\,\Gamma(s) \,.$$

Luego usar esta propiedad para probar finalmente

$$\int_0^\infty dx\, x^{\alpha+1} e^{-x} \Big(L_n^{(\alpha)}(x)\Big)^2 = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}(2n+\alpha+1) \,. \tag{C}$$

La ecuación (B) es la relación de ortogonalidad entre polinomios de Laguerre. La ecuación (C) es una propiedad útil en el estudio del átomo de hidrógeno, similar a una relación de ortogonalidad.