Wykład VI

- Definicja i równanie na funkcje sferyczne,
- Ortogonalność funkcji sferycznych,
- Normy funkcji sferycznych.

Iloczyn skalarny w zmiennych kątowych

$$(f,g)=\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta\, \bar{f}(\vartheta,\varphi) g(\vartheta,\varphi)$$

$$\xi \equiv \cos\vartheta \Rightarrow (f,g)=\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\xi\;\; \bar{f}(\xi,\varphi) g(\xi,\varphi)$$

Równanie na funkcje sferyczne

Niech $f = f(r,\vartheta,\varphi) = f(r,\xi,\varphi)$ spełnia równanie Laplace'a w zmiennych sferycznych

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \xi}\left[\left(1-\xi^2\right)\frac{\partial f}{\partial \xi}\right] + \frac{1}{r^2\left(1-\xi^2\right)}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = 0$$

Żeby otrzymać równanie na f w powyższej formie, laplasjan we współrzędnych sferycznych przekształcamy w następujący sposób

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right].$$

Dokonując podstawienia $\xi = \cos\theta$, mamy

$$\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{\partial\cos\theta}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial\cos\theta} = -\sin\theta\frac{\partial}{\partial\cos\theta} = -(1-\xi^2)^{1/2}\frac{\partial}{\partial\xi}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} =$$
$$\frac{1}{(1-\xi^2)^{1/2}}[-(1-\xi^2)^{1/2}]\frac{\partial}{\partial\xi}\left\{(1-\xi^2)^{1/2}[-(1-\xi^2)^{1/2}]\frac{\partial}{\partial\xi}\right\} + \frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} =$$
$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{\partial}{\partial\xi}\right] + \frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \xi}\left[\left(1-\xi^2\right)\frac{\partial f}{\partial \xi}\right] + \frac{1}{r^2\left(1-\xi^2\right)}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = 0$$

Rozwiązania poszukujemy w postaci $f(r,\xi,\varphi) = r^l Y(\xi,\varphi), \quad l = 0,1,2,\ldots$

$$\boxed{l(l+1)Y + \frac{\partial}{\partial \xi}\left[\left(1-\xi^2\right)\frac{\partial Y}{\partial \xi}\right] + \frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = 0}$$

Rozdzielenie zmiennych $Y(\xi,\varphi) = T(\xi)\Phi(\varphi)$

$$\left(1-\xi^2\right)\left\{l(l+1) + \frac{1}{T}\frac{d}{d\xi}\left[\left(1-\xi^2\right)\frac{dT}{d\xi}\right]\right\} = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}$$

Przyrównując obie strony do stałej λ otrzymujemy

$$\Phi'' = -\lambda\Phi \Rightarrow \Phi(\varphi) = e^{i\sqrt{\lambda}\varphi}$$

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow \lambda = m^2,\ m = 0,\pm1,\pm2,\ldots \Rightarrow \Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$$

$$\left(1-\xi^2\right)T'' - 2\xi T' + l(l+1)T = \frac{\lambda}{1-\xi^2}T$$

$$\left(1-\xi^2\right)T''-2\xi T'+l(l+1)T=\frac{m^2}{1-\xi^2}T$$

Funkcji T poszukujemy w postaci jak obok.
$P_{l,m}$ jest pewną funkcją z indeksami, odpowiadającymi stałym l, m w równaniu na funkcję T

$$T(\xi)=\left(1-\xi^2\right)^{m/2}P_{lm}(\xi)$$

$$\left(1-\xi^2\right)P''_{lm}-2\xi(m+1)P'_{lm}+\left[l(l+1)-m(m+1)\right]P_{lm}=0$$

$$m=0\Rightarrow\left(1-\xi^2\right)P''_{l0}-2\xi P'_{l0}+l(l+1)P_{l0}=0\Rightarrow P_{l0}=P_l\qquad(\blacksquare)$$

Jest to równanie różniczkowe dla wielomianów Legendre'a stopnia l, w związku z tym funkcja $P_{l,m}$ jest wielomianem Legendre'a P_l

Różniczkując stronami równanie na P_{lm} po ξ otrzymujemy

$$\left(1-\xi^2\right)\left(P'_{lm}\right)''-2\xi(m+2)\left(P'_{lm}\right)'+\left[l(l+1)-(m+1)(m+2)\right]P'_{lm}=0\overset{(\blacksquare)}{\Rightarrow}P'_{lm}=P_{l,m+1}$$

Wniosek $$P_{l,m}=\left(P_{l,0}\right)^{(m)}=\left(P_l\right)^{(m)}=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[\left(1-\xi^2\right)^l\right]^{(l+m)},\quad m=-l,-l+1,-l+2,\dots l$$

- Ogólny wzór na funkcje sferyczne

$$\boxed{Y_{lm}(\xi,\varphi)=N_{lm}\left(1-\xi^2\right)^{|m|/2}\left(P_l(\xi)\right)^{(|m|)}e^{im\varphi}}$$

Symbol $(*)^{(m)}$ oznacza pochodną rzędu m względem ξ.
W ostatnim przekształceniu skorzystaliśmy ze wzoru Rodriguesa dla wielomianów Legendre'a.
Stałe $N_{l,m}$ są stałymi normującymi (wyznaczonymi poniżej).

Ortogonalność funkcji sferycznych

$$\left(Y_{lm},Y_{l'm'}\right)=N_{lm}N_{l'm'}\int_{-1}^{1}d\xi\left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}+\frac{|m'|}{2}}P_l^{(|m|)}(\xi)P_{l'}^{(|m'|)}(\xi)\int_0^{2\pi}d\varphi\, e^{i(-m+m')\varphi}$$

$$=2\pi\delta_{m,m'}N_{lm}N_{l'm}\int_{-1}^{1}d\xi\left(1-\xi^2\right)^{|m|}P_l^{(|m|)}(\xi)P_{l'}^{(|m|)}(\xi)=(\spadesuit)$$

$$=2\pi\delta_{m,m'}N_{lm}N_{l'm}(-1)^m\int_{-1}^{1}d\xi\left[\left(1-\xi^2\right)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]^{(m)}P_{l'}(\xi)\quad(\blacklozenge)$$

Przyjmijmy dla uproszczenia $m>0$, $l'>l$ i scałkujmy $m-1$ razy przez części

$$\begin{aligned}
(\spadesuit) &= \int_{-1}^{1}(1-\xi^2)^{|m|}P_l^{(|m|)}(\xi)P_{l'}^{(|m|)}(\xi)d\xi=\int_{-1}^{1}(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)P_{l'}^{(m)}(\xi)d\xi\\
&= \underbrace{(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)P_{l'}^{(m-1)}(\xi)}_{=0\text{ dla }\xi=\pm1}\Bigg|_{-1}^{1}-\int_{-1}^{1}\left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]'P_{l'}^{(m-1)}(\xi)d\xi=-\int_{-1}^{1}\left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]'P_{l'}^{(m-1)}(\xi)d\xi\\
&= -\underbrace{\left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]'P_{l'}^{(m-1)}(\xi)}_{=0\text{ dla }\xi=\pm1\ (\clubsuit)}\Bigg|_{-1}^{1}+\int_{-1}^{1}\left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]''P_{l'}^{(m-2)}(\xi)d\xi\\
&= \int_{-1}^{1}\left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]''P_{l'}^{(m-2)}(\xi)d\xi=\ldots=\int_{-1}^{1}\left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]^{(m)}P_{l'}(\xi)d\xi,
\end{aligned}$$

ponieważ znów

$$(\clubsuit)\ =\ \left[(1-\xi^2)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]'\Bigg|_{-1}^{1}==\left[-2m\xi\underbrace{(1-\xi^2)^{m-1}}_{=0\text{ dla }\xi=\pm1}P_l^{(m)}(\xi)+\underbrace{(1-\xi^2)^m}_{=0\text{ dla }\xi=\pm1}P_l^{(m+1)}(\xi)\right]\Bigg|_{-1}^{1}=0$$

$$W(\xi) = \left[\left(1-\xi^2\right)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]^{(m)}$$ jest wielomianem stopnia l-m+$2m$-m=l (▲)

$$\Rightarrow \int_{-1}^{1} d\xi\, W(\xi) P_{l'}(\xi) = 0 \quad \text{dla } l \neq l'$$

Ponieważ $P_{l'}$ jest ortogonalne do wszystkich wielomianów stopnia $l < l'$

(▲)

Zobaczmy, że $W(\xi) = w\xi^l + \ldots$, czyli W jest wielomianem stopnia l, a w współczynnikiem przy najwyższej potędze ξ^l.

$m = 0 \Rightarrow W(\xi) = ((1-\xi^2)^0 P_l^{(0)}(\xi))^{(0)} = P_l(\xi) = a_l\xi^l + \ldots \Rightarrow w = a_l$,

$m = 1 \Rightarrow W(\xi) = ((1-\xi^2)P_l'(\xi))' = (-\xi^2 a_l l \xi^{l-1} + \ldots)' = -a_l l(\xi^{l+1})' + \ldots = -a_l l(l+1)\xi^l + \ldots \Rightarrow w = -a_l l(l+1)$,

$m = 2 \Rightarrow W(\xi) = ((1-\xi^2)^2 P_l''(\xi))'' = (\xi^4 l(l-1)a_l\xi^{l-2} + \ldots)'' + \ldots a_l l(l-1)(\xi^{l+2})'' + \ldots = a_l l(l-1)(l+2)(l+1)\xi^l + \ldots$
$= a_l(l-1)l(l+1)(l+2)\xi^l + \ldots = \frac{(l+2)!}{(l-2)!}\xi^l + \ldots \Rightarrow w = (-1)^2\frac{(l+2)!}{(l-2)!}$

Ogólnie $w = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!}$

- Wniosek: funkcje sferyczne dla różnych indeksów są ortogonalne

$$\boxed{\left(Y_{lm}, Y_{l'm'}\right) = N_{lm}^2 \delta_{ll'}\delta_{mm'}}$$

Podstawiając $l = l'$ we wzorze (♦) z poprzedniej transparencji możemy obliczyć normę funkcji sferycznej (patrz następna transparencja).

Norma funkcji sferycznych

$$W(\xi)=\left[\left(1-\xi^2\right)^m P_l^{(m)}(\xi)\right]^{(m)}=w\xi^l+\ldots \qquad w=(-1)^m a_l\frac{(l+m)!}{(l-m)!}$$

w – współczynnik przy najwyższej potędze wielomianu W

a_l – współczynnik przy najwyższej potędze wielomianu P_l

$$\left\|Y_{lm}\right\|^2=\left(Y_{lm},Y_{lm}\right)=2\pi N_{lm}^2\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\int_{-1}^{1}d\xi\left(a_l\xi^l+\ldots\right)P_l(\xi)=$$

ponieważ P_l jest ortogonalne do wszystkich potęg $\xi^{l'}$ stopnia $l'<l$

$$=2\pi N_{lm}^2\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\int_{-1}^{1}d\xi\; a_l\xi^l P_l(\xi)=2\pi N_{lm}^2\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\int_{-1}^{1}d\xi\; P_l(\xi)P_l(\xi)=$$

$$=2\pi N_{lm}^2\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{2}{2l+1}=1\Rightarrow N_{lm}=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

Korzystamy ze wzoru na normę wielomianu Legendre'a P_l

$$Y_{lm}(\xi,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}}P_l^{(|m|)}(\xi)e^{im\varphi}, \qquad \begin{array}{c} l=0,1,2,3,\ldots \\ m=-l,-l+1,\ldots l\end{array}$$

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\sin^{|m|}\vartheta\,\frac{d^{|m|}P_l(\cos\vartheta)}{d(\cos\vartheta)^{|m|}}e^{im\varphi}$$

- Funkcje sferyczne dla małych indeksów

$$Y_{0,0}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,0}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta$$

$$Y_{1,1}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{i\varphi}=\overline{Y}_{1,-1}(\vartheta,\varphi)$$

$$Y_{2,0}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\vartheta-1\right)$$

$$Y_{2,1}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{i\varphi}=\overline{Y}_{2,-1}(\vartheta,\varphi)$$

$$Y_{2,2}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{2i\varphi}=\overline{Y}_{2,-2}(\vartheta,\varphi)$$