Лекция 9

Разделение переменных в сферических координатах

9.1 Частица в центральном поле

Для определенности рассмотрим квантовомеханическую задачу о движении частицы в центральном поле, т.е. будем искать собственные функции гамильтониана

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r),$$

где потенциальная энергия U зависит только от расстояния r до начала координат, и будем полагать $\hbar = m = 1$. В сферических координатах оператор Лапласа разбивается на радиальную и угловую часть $\triangle_\Omega$:

$$\triangle = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\triangle_\Omega, \quad \triangle_\Omega = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Переменные разделяются, если искать решение стационарного уравнения Шредингера **(1.10)** в виде $\psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$:

$$-2\left(E - U(r)\right) = \frac{(r^2R')'}{r^2R} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{(\sin\theta\,\Theta')'}{\sin\theta\,\Theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\Phi''}{\Phi}\right]. \tag{9.1}$$

Уравнение на $\Phi(\varphi)$ снова получается вида $\Phi'' + m^2\Phi = 0$. Его решение мы знаем: $\Phi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$, где m — целое число. Теперь последовательно займемся уравнениями на $\Theta(\theta)$ и $R(r)$.

9.2 Угловое уравнение. Функции Лежандра

Угловое уравнение получается, если приравнять ко второй константе разделения λ выражение в квадратных скобках предыдущего уравнения

$$\frac{(\sin\theta\,\Theta')'}{\sin\theta\,\Theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} = \lambda. \tag{9.2}$$

Заменой $x = \cos\theta$ сводим его к уравнению с полиномиальными коэффициентами

$$\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2}\Theta = \lambda\Theta.$$

Сначала надо исследовать поведение при $x \to \pm 1$. Для этого ищем решение в окрестности точки $x = 1$ в виде $\Theta \sim \xi^\sigma, x = 1+\xi, \xi \to 0$. Приравнивая к нулю коэффициенты при самой старшей степени ξ, получим $-2\sigma^2 + m^2/2 = 0$, откуда $\sigma = \pm m/2$. Считая m неотрицательным, выбираем корень со знаком $+$, чтобы решение не имело особенности при $\xi \to 0$. Аналогично поступим с точкой $x = -1$, “южным” полюсом сферической системы координат. Ищем решение в виде

$$\Theta = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} u(x)$$

и получаем уравнение для функции u

$$(1-x^2)u'' - 2x(m+1)u' - [m(m+1)+\lambda]u = 0. \tag{9.3}$$

Вместо этого достаточно сложного рассмотрим более простое *уравнению Лежандра*

$$(1-x^2)y'' - 2xy' - \lambda y = 0, \tag{9.4}$$

последовательно дифференцируем последнее, получим

$$(1-x^2)y''' - 4xy'' - [2+\lambda]y' = 0$$
$$(1-x^2)y^{IV} - 6xy''' - [2+4+\lambda]y'' = 0 \ \ldots$$
$$(1-x^2)y^{(m+2)} - 2x(m+1)y^{(m+1)} - [m(m+1)+\lambda]\, y^{(m)} = 0.$$

В последней строчке выписано уравнение, которое получается после m-кратного дифференцирования и совпадает с **(9.3)** при $u = y^{(m)}$. Стало быть, решение **(9.3)** есть m-я производная решения уравнения Лежандра. Остается решить уравнение Лежандра.

Ищем решение в виде разложения в ряд $y = \sum c_n x^n$, подставляем в уравнение и выписываем рекуррентные соотношения на коэффициенты:

$$\begin{array}{lrl} 1: & 2c_2 - \lambda c_0 = 0 & c_2 = \frac{\lambda}{2}c_0 \\ x: & 2\cdot 3c_3 - (2+\lambda)c_1 = 0 & c_3 = \frac{\lambda+2}{2\cdot 3}c_1 \\ x^2: & 3\cdot 4c_4 - (2+4+\lambda)c_2 = 0 & c_4 = \frac{\lambda+4+2}{3\cdot 4}c_2 \end{array}$$

При произвольном фиксированном λ коэффициенты с большим номером будут одинаковыми, так как в числителе рекуррентного соотношения получается $2+4+\cdots+2m = m(m+1) \sim m^2, m \to \infty$, а в знаменателе $(m+1)(m+2) \sim m^2$. Пусть $c_0 \neq 0, c_1 = 0$, тогда останутся только четные коэффициенты. Такой ряд будет сходиться при $x^2 < 1$, как геометрическая прогрессия $1 + x^2 + x^4 + \cdots = 1/(1-x^2)$,

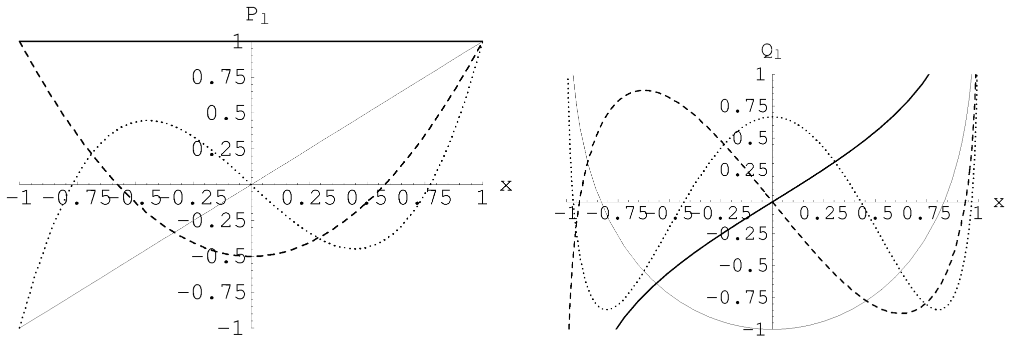

Рис. 9.1: Функции Лежандра первого рода $P_l(x)$ и второго рода $Q_l(x)$: толстая линия — $l = 0$, тонкая — $l = 1$, пунктир — $l = 2$, точки — $l = 3$.

а значит имеет особенность при $x \to \pm 1$. То же самое происходит для нечетных решений, когда $c_0 = 0, c_1 \neq 0$. Особенности не будет только при дискретных значениях λ, при которых ряд обрывается. Значит условие регулярности на полюсах позволяет найти не только решение, но и собственные значения $\lambda = -l(l+1)$. Решения уравнения Лежандра, не имеющие особенности при $x^2 \to 1$, содержат конечное число членов разложения. Эти многочлены называются *полиномами Лежандра*. Принятая нормировка дается *формулой Родрига*

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l. \tag{9.5}$$

Здесь $l = 0, 1, 2, \ldots$ — целое число, называемой орбитальным квантовым, которое показывает число нулей полинома Лежандра. Второе линейно независимое решение дается функциями $Q_l(x)$, которые имеют особенности в точках $x = \pm 1$ и называются *функциями Лежандра второго рода*. Функции Лежандра называют также *сферическими функциями*, рис. 9.1.

Осталось показать, что (9.5) есть решение уравнения (9.4). Для этого введем вспомогательную функцию $W_l(x) = (x^2 - 1)^l$. Если ее продифференцировать, получим

$$(x^2 - 1) W_l' - 2lxW_l = 0.$$

Дифференцируем это соотношение $l + 1$ раз:

$$\begin{gathered}
(x^2 - 1) W_l'' + (2 - 2l) x W_l' - 2l W_l = 0 \\
(x^2 - 1) W_l''' + (4 - 2l) x W_l'' + (2 - 4l) W_l' = 0 \\
(x^2 - 1) W_l^{IV} + (6 - 2l) x W_l''' + (4 + 2 - 6l) W_l'' = 0 \ \ldots \\
(1 - x^2) W_l^{(l+2)} + 2x W_l^{(l+1)} - l(l+1) W_l^{(l)} = 0.
\end{gathered}$$

В последней строке получилось уравнение Лежандра, значит $W_l^{(l)}$ удовлетворяет уравнению (9.4) и формула Родрига (9.5) доказана.

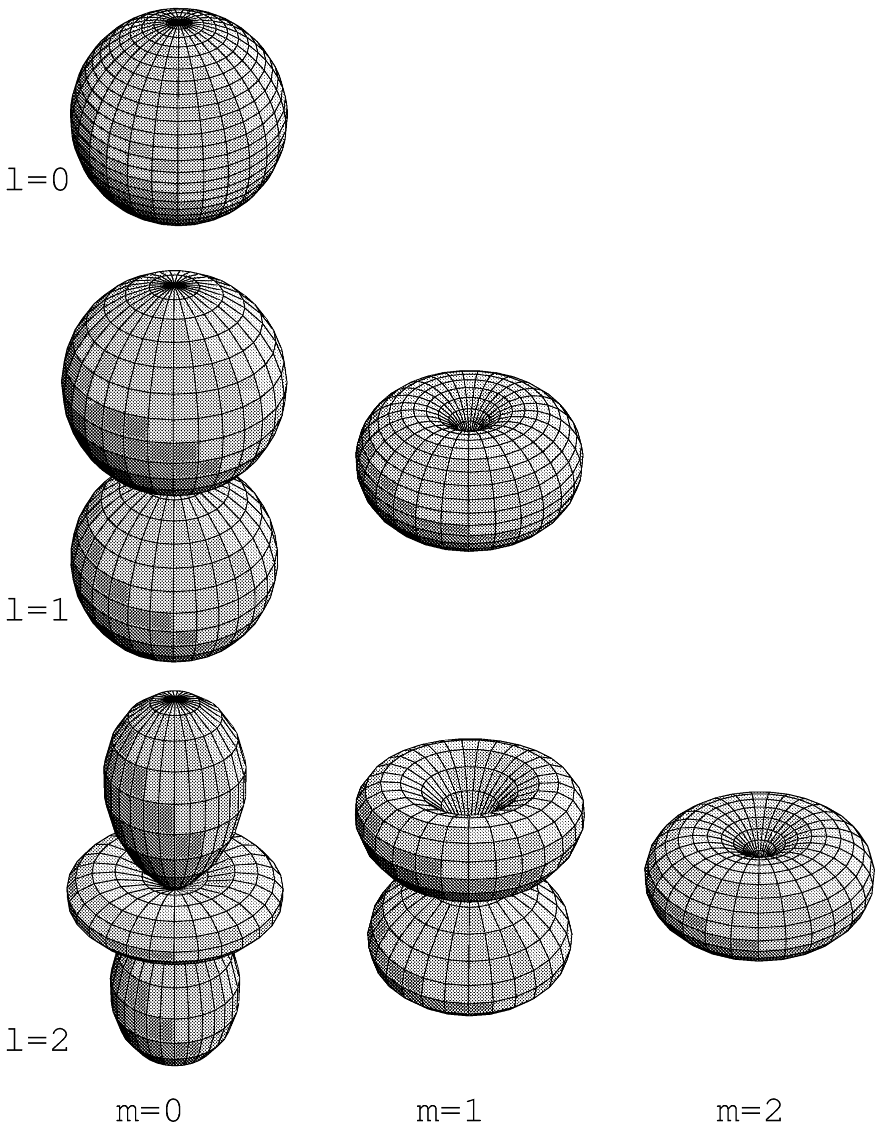

Рис. 9.2: Сферические гармоники $|Y_{lm}(\theta,\varphi)|$ при $l=0,1,2$, $0\leqslant m\leqslant l$.

Вернемся к уравнению **(9.3)**, его решения — производные полиномов Лежандра — называются *присоединенными функциями Лежандра*

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad m \geq 0.$$

Полное решение угловой задачи, собственные функции оператора $\triangle_\Omega$,

$$\triangle_\Omega Y_{lm}(\theta,\varphi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi),$$

называются *сферическими гармониками*. Сферические гармоники просто выражаются через присоединенные функции Лежандра первого рода

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = C_{lm} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_l^{|m|}(\cos\theta),$$

где C_{ml} нормировочные коэффициенты, подобранные так, чтобы сферические гармоники стали ортонормированными на единичной сфере

$$\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi) Y_{l'm'}(\theta,\varphi) \, \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}.$$

Для небольших значений орбитального квантового числа $l \leqslant 2$ графики сферических гармоник как функций полярного и азимутального углов изображены на рисунке **9.2**. При $l = 0$ получилась сфера, по мере увеличения l поверхность становится все более изрезанной. Функции с максимальным числом $m = l$ сосредоточены вблизи экватора. То, что мы изобразили абсолютную величину $|Y_{lm}|$, сделало картинки аксиально-симметричными, независящим от азимутального угла φ. Фактически на рисунке показаны присоединенные функции Лежандра. Теория сферических функций приведена в книге **[38]**, включая обобщение на комплексный аргумент и дробные индексы.

Упражнение 9.1. Найдите коэффициенты C_{lm}.

9.3 Радиальное уравнение. Сферические функции Бесселя

Вернемся к радиальному уравнению **(9.1)** и попробуем решить его для свободной частицы $U = 0$, когда оно сводится к уравнению Гельмгольца

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0. \tag{9.6}$$

Введем переменную $x = kr$ и новую неизвестную функцию $\chi(r) = R(r)r$. Получим уравнение без первой производной

$$\chi_l'' + \left[1 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \chi_l = 0,$$

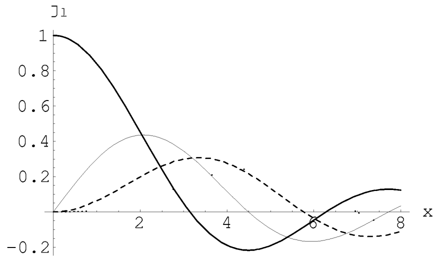

Рис. 9.3: Сферические функции Бесселя $j_l(x)$: толстая линия — $l = 0$, тонкая — $l = 1$, пунктир — $l = 2$, точки — $l = 3$.

где нижний индекс означает $l = 0, 1, \ldots$. При $l = 0$ уравнение легко решается: $\chi_0 = \sin x$, а второе решение $R = \cos x/x$ мы вынуждены отбросить как имеющее особенность при $x = 0$.

Теперь выполним другую замену неизвестной функции $R = u(x)/\sqrt{x}$ и получим

$$u'' + \frac{1}{x}u' + \left[1 - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{x^2}\right] u = 0.$$

Получилось знакомое уравнение Бесселя (8.2), но для функций с полуцелым индексом $u = J_{l+1/2}(x)$. Сопоставив с предыдущим решением для $l = 0$, сразу найдем выражение $J_{1/2}$ через элементарные функции

$$J_{\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x. \tag{9.7}$$

Нормировку мы нашли, после предельного перехода $x \to 0$ в обеих частях.

Покажем теперь, что все функции Бесселя с полуцелым индексом $l + 1/2$ выражаются через тригонометрические функции и степени x. Для этого воспользуемся рекуррентными соотношениями (8.6) и (8.7), вычитая которые друг из друга найдем

$$J_{\nu+1} = -x^{\nu} \frac{d}{dx} \left(x^{-\nu} J_{\nu}\right).$$

Отсюда последовательно получим

$$J_{\frac{3}{2}} = -x^{1/2} \frac{d}{dx} x^{-1/2} J_{\frac{1}{2}}, J_{\frac{5}{2}} = x^{5/2} \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2 \frac{J_{\frac{1}{2}}}{x^{1/2}}, \ldots$$

$$J_{l+\frac{1}{2}} = (-1)^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} x^{l+1/2} \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}.$$

Иногда вводят *сферические функции Бесселя*, определенные с более удобной для данной задаче нормировкой. Для них формула становится короче

$$j_l = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}, \quad j_l = x^l \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}.$$

Графики этих функций показаны на рис. 9.3.