

Dodatek D

Wielomiany Legendre'a, itp.

Wielomiany Legendre'a i stowarzyszone z nimi funkcje są szeroko omawiane w wielu podręcznikach fizyki matematycznej. Nie będziemy więc dowodzić czy wyprowadzać ich własności. Celem niniejszego rozdziału jest po prostu zebranie informacji istotnych i pożytecznych w praktycznych zagadnieniach mechaniki kwantowej.

D.1 Wielomiany Legendre'a

Wielomiany Legendre'a stanowią zupełny zbiór funkcji ortogonalnych na odcinku $(-1, 1)$. Każdą funkcję na tym odcinku można więc przedstawić jako (na ogół nieskończoną) kombinację liniową wielomianów Legendre'a. Wielomiany te są zdefiniowane za pomocą tzw. wzoru Rodriguesa

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (1 - x^2)^n. \quad (\text{D.1})$$

Wzór Rodriguesa pozwala łatwo obliczyć kilka pierwszych wielomianów Legendre'a

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \\ P_1(x) &= x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{2} (3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{2} (5x^3 - 3x), \\ P_4(x) &= \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3). \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Można też znaleźć wyrażenie jawne

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{m \geq m_{\min}}^n (-1)^{n-m} \binom{n}{m} \frac{(2m)!}{(2m-n)!} x^{2m-n}, \quad (\text{D.3})$$

gdzie dolna granica sumy $m_{\min} = \frac{n}{2}$ dla n parzystego i $m_{\min} = \frac{n+1}{2}$ dla n nieparzystego. Z formuły tej wynikają następujące wnioski. Dla $n=2k$ (parzystego) wielomian $P_{2k}(x)$ zawiera wyraz wolny ($m = m_{\min} = k$) i parzyste potęgi x – jest funkcją parzystą

$$P_{2k}(-x) = P_{2k}(x). \quad (\text{D.4})$$

Jego wartość w zerze jest równa wyrazowi wolnemu i w/g (D.3) wynosi

$$\begin{aligned} P_{2k}(x) &= \frac{1}{2^{2k} (2k)!} (-1)^{2k-k} \binom{2k}{k} \frac{(2k)!}{(2k-2k)!} \\ &= (-1)^k \frac{(2k)!}{(2^k k!)^2} = (-1)^k \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!}. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Dla $n = 2k + 1$ (nieparzystego) brak wyrazu wolnego, bo $m_{\min} = k + 1$. Ponadto w $P_{2k+1}(x)$ występują jedynie nieparzyste potęgi x . Jest to więc funkcja nieparzysta

$$P_{2k+1}(-x) = -P_{2k+1}(x) \implies P_{2k+1}(0) = 0. \quad (\text{D.6})$$

Wielomiany Legendre'a na odcinku $(-1, 1)$ są ortogonalne, lecz nieunormowane, bowiem

$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \quad (\text{D.7})$$

Wielomiany $P_n(x)$ pojawiły się w literaturze matematycznej jako rozwiązania równania różniczkowego

$$(1-x^2) \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2x \frac{df(x)}{dx} + n(n+1)f(x) = 0, \quad (\text{D.8})$$

które można także zapisać w postaci równoważnej

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{df(x)}{dx} \right] + n(n+1)f(x) = 0. \quad (\text{D.9})$$

Wielomiany $P_n(x)$ nie są jedynymi rozwiązaniami równania (D.8). Inne rozwiązania nie są jednak wielomianami.

Wielomiany Legendre'a mają funkcję tworzącą

$$\frac{1}{\sqrt{1-2sx+s^2}} = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) s^n & \text{dla } |s| < 1, \\ \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) \frac{1}{s^{n+1}} & \text{dla } |s| > 1. \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

Weźmy $|s| < 1$ i połóżmy $x = \pm 1$, wówczas

$$\frac{1}{\sqrt{1 \mp 2s + s^2}} = \frac{1}{1 \mp s} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\pm 1) s^n. \quad (\text{D.11})$$

Ponieważ z rozwinięcia taylorowskiego wiadomo, że

$$\frac{1}{1 \mp s} = \sum_{n=0}^{\infty} (\pm 1)^n s^n, \quad (\text{D.12})$$

więc porównując dwa powyższe szeregi stwierdzamy, że

$$P_n(+1) = 1, \quad \text{oraz} \quad P_n(-1) = (-1)^n. \quad (\text{D.13})$$

Wielomiany te spełniają także szereg, często pożytecznych, relacji rekurencyjnych. I tak, na przykład

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x) \quad (\text{D.14a})$$

$$= x P_n(x) + \frac{x^2-1}{n+1} \frac{dP_n(x)}{dx}, \quad (\text{D.14b})$$

$$(2n+1)P_n(x) = \frac{dP_{n+1}(x)}{dx} - \frac{dP_{n-1}(x)}{dx}. \quad (\text{D.14c})$$

Dla przykładu udowodnimy ostatnią z rekurencji, tj. (D.14c). Ze wzoru Rodriguesa mamy

$$\begin{aligned} \frac{d P_{n+1}(x)}{dx} &= \frac{1}{2^{n+1} (n+1)!} \frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}} (x^2 - 1)^{n+1} = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} [x (x^2 - 1)^n] \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left[(x^2 - 1)^n + 2nx^2 (x^2 - 1)^{n-1} \right] \\ &= P_n(x) + \frac{1}{2^{n-1} (n-1)!} \frac{d^n}{dx^n} \left[x^2 (x^2 - 1)^{n-1} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Ponieważ $x^2 (x^2 - 1)^{n-1} = (x^2 - 1)^n + (x^2 - 1)^{n-1}$, więc

$$\begin{aligned} \frac{d P_{n+1}(x)}{dx} &= P_n(x) + \frac{1}{2^{n-1} (n-1)!} \frac{d^n}{dx^n} \left[(x^2 - 1)^n + (x^2 - 1)^{n-1} \right] \\ &= P_n(x) + 2nP_n(x) + \frac{d P_{n-1}(x)}{dx}, \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

skąd od razu wynika teza (D.14c).

D.2 Stowarzyszone funkcje Legendre'a

Stowarzyszone funkcje Legendre'a określone na przedziale $(-1, 1)$ są zdefiniowane za pośrednictwem zwykłych wielomianów $P_l(x)$ wzorem

$$\begin{aligned} P_l^m(x) &= \left(\sqrt{1-x^2} \right)^m \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \\ &= \frac{1}{2^l l!} \left(\sqrt{1-x^2} \right)^m \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l, \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

gdzie przyjmujemy $0 \leq m \leq l$. Oczywiście dla $m = 0$ stowarzyszone funkcje Legendre'a pokrywają się z wielomianami Legendre'a

$$P_l^0(x) \equiv P_l(x). \quad (\text{D.18})$$

Zwróćmy uwagę, że tak zdefiniowane funkcje $P_l^m(x)$ nie są na ogół wielomianami, bowiem dla m nieparzystego zawierają pierwiastek. Argument $x \in (-1, 1)$, więc $1 - x^2 \geq 0$ i obliczanie pierwiastka nie nastręcza problemów. Jednak nie ustalony jest znak pierwiastka. Funkcje $P_l^m(x)$ często stosuje się dla $x = \cos \theta$ (przy $\theta \in (0, \pi)$, jak we współrzędnych sferycznych). Wówczas można ustalić znak pierwiastka, wybierając

$$\sqrt{1-x^2} = \sqrt{1-\cos^2 \theta} = \sqrt{\sin^2 \theta} = \sin \theta, \quad (\text{D.19})$$

który w przedziale $\theta \in (0, \pi)$ jest zawsze nieujemny. Przy takim założeniu często pisze się

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l}, \quad (\text{D.20})$$

co kojarzy się z harmonikami sferycznymi. Do dyskusji tego skojarzenia jeszcze wrócimy, a na razie pozostaniemy przy funkcjach $P_l^m(x)$. Wybór $x = \cos \theta$ określa jednocześnie parzystość stowarzyszonych funkcji Legendre'a. Parzystość określamy bowiem jako własność związaną z odbiciem przestrzennym $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Odpowiada temu zmiana kątów sferycznych

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \text{oraz} \quad \varphi \rightarrow \pi + \varphi. \quad (\text{D.21})$$

W takim przypadku

$$\begin{aligned}\cos \theta &\rightarrow \cos(\pi - \theta) = -\cos \theta, \\ \sin \theta &\rightarrow \sin(\pi - \theta) = \sin \theta,\end{aligned}\tag{D.22}$$

A zatem przy odbiciu $\cos \theta$ zmienia znak, zaś $\sin \theta$ nie. W takim razie z (D.20) wynika, że

$$\begin{aligned}P_l^m(-\cos \theta) &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(-\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l} \\ &= (-1)^{l+m} P_l^m(\cos \theta),\end{aligned}\tag{D.23}$$

co dla $m = 0$ jest zgodne z własnościami parzystości zwykłych wielomianów Legendre'a.

Ze wzoru (D.17) dla $m > 0$ przykładowo mamy

$$\begin{aligned}P_1^1(x) &= \sqrt{1-x^2} = \sin \theta, \\ P_2^1(x) &= 3x\sqrt{1-x^2} = 3\sin \theta \cos \theta, \\ P_2^2(x) &= 3(1-x^2) = 3\sin^2 \theta = 3(1-\cos^2 \theta).\end{aligned}\tag{D.24}$$

Wylczenie dalszych $P_l^m(x)$ jest nieco żmudne, ale proste.

Stowarzyszone funkcje Legendre'a są na odcinku $(-1, 1)$ ortogonalne, w następującym sensie

$$\int_{-1}^1 dx P_l^m(x) P_k^m(x) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{lk}.\tag{D.25}$$

Funkcje $P_l^m(x)$ spełniają równanie różniczkowe

$$(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} P_l^m(x) - 2x \frac{d}{dx} P_l^m(x) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^m(x) = 0.\tag{D.26}$$

D.3 Harmoniki sferyczne

D.3.1 Związek ze stowarzyszonymi funkcjami Legendre'a

Wyprowadziliśmy uprzednio harmoniki sferyczne (patrz (C.67)) w następującej postaci

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l}\tag{D.27}$$

Porównując to określenie ze stowarzyszonymi funkcjami Legendre'a (D.20) Otrzymujemy

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta)\tag{D.28}$$

gdzie (przypominamy) $0 \leq m \leq l$, jak to wynika z definicji funkcji $P_l^m(x)$. Harmoniki z indeksami $m < 0$ otrzymamy przez relację sprzężenia zespolonego $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^*$. Pisząc w (D.28) $P_l^m(x) = P_l^{|m|}(x)$ sprzęgamy i dostajemy

$$Y_{l,-m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{-im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (m \geq 0).\tag{D.29}$$

Zamieniając po obu stronach m na $-m$ otrzymujemy

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (m < 0).\tag{D.30}$$

D.3.2 Parzystość harmonik sferycznych

Zwróćmy uwagę na własności parzystości harmonik sferycznych. Przy odbiciu przestrzennym należy dokonać zamian (D.21), a w konsekwencji (D.22) oraz

$$e^{im\varphi} \rightarrow e^{im(\pi+\varphi)} = (-1)^m e^{im\varphi}. \quad (\text{D.31})$$

Korzystając z parzystości (D.23) stowarzyszonych funkcji Legendre'a, z (D.28) dostajemy

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \varphi) &\xrightarrow{\text{odbicie}} Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) \\ &= (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (-1)^m e^{im\varphi} P_l^m(-\cos \theta) \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} (-1)^{l+m} P_l^m(\cos \theta) \\ &= (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

D.3.3 Harmoniki sferyczne to funkcje własne \vec{L}^2 i L_z

Sprawdźmy, że harmoniki sferyczne dane w (D.28) i (D.30) są rzeczywiście funkcjami własnymi (w reprezentacji położeniowej) operatorów L_z i \vec{L}^2 (orbitalnego momentu pędu). Zapiszmy więc

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = A_{lm} e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (\text{D.33})$$

gdzie stała normalizacyjna wynika z równania (D.28) dla $m \geq 0$ lub z (D.30) dla $m < 0$.

Równanie własne dla operatora L_z (w reprezentacji położeniowej, patrz (13.34b) ma postać

$$L_z Y_{lm} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}. \quad (\text{D.34})$$

Po wstawieniu harmoniki (D.33) od razu otrzymujemy

$$\begin{aligned} L_z Y_{lm} &= -i\hbar A_{lm} \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta) \\ &= m\hbar A_{lm} e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta) = m\hbar Y_{lm}, \end{aligned} \quad (\text{D.35})$$

tak jak być powinno.

Odpowiednie równanie dla operatora \vec{L}^2 jest bardziej złożone (patrz (13.34a))

$$\vec{L}^2 Y_{lm} = -\hbar^2 A_{lm} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] e^{im\varphi} P_l^{|m|}(\cos \theta). \quad (\text{D.36})$$

Różniczkowanie po φ jest trywialne

$$\vec{L}^2 Y_{lm} = -\hbar^2 A_{lm} e^{im\varphi} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P_l^{|m|}(\cos \theta). \quad (\text{D.37})$$

W pozostałej części równania podstawiamy $x = \cos \theta$. Wobec tego, zgodnie z (C.26) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 Y_{lm} &= -\hbar^2 A_{lm} e^{im\varphi} \left[\frac{1}{\sin \theta} \left(-\sin \theta \frac{d}{dx} \right) \left(-\sin^2 \theta \frac{d}{dx} \right) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^{|m|}(x) \\ &= -\hbar^2 A_{lm} e^{im\varphi} \left[\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} \right) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^{|m|}(x) \\ &= -\hbar^2 A_{lm} e^{im\varphi} \left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^{|m|}(x) \end{aligned} \quad (\text{D.38})$$

Z równania spełnianego przez stowarzyszone funkcje Legendre'a wynika, że

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} &= -\hbar^2 A_{lm} e^{im\varphi} \left[l(l+1) P_l^{|m|}(x) \right] \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}.\end{aligned}\tag{D.39}$$

A więc wszystko jest tak jak być powinno. Harmoniki sferyczne istotnie są funkcjami własnymi orbitalnego momentu pędu.
