为了方便later的复习需要，尽量写详细一些。

我们知道，一般典型情况下，势能仅仅是一个关于距离的函数，也就是说势能往往会是一个球对称函数。∴将某个力学量的本征方程转化在球坐标系中求解是一件有实用价值的事情。

以角动量算符为例：

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ 　坐标算符：$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ 　$\hat{r} = \vec{r}$ 　$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

由矢量的叉乘，我们有：

$$\begin{cases} \hat{L}_x = y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{L}_y = z\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \\ \hat{L}_z = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \end{cases} \quad \text{—— } \langle 1 \rangle$$

球坐标系：

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases} \quad \text{———— } \langle 2 \rangle$$

我们有：

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} \end{cases} \quad \text{—— } \langle 3 \rangle$$

∴有：$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})$ 　$\langle 4 \rangle$

$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]$ 　$\langle 5 \rangle$

我们看 $\hat{L}^2$ 算符只与"θ"，"φ"有关。∴合理地，设本征函数为 $Y(\theta,\varphi)$

∴ $-\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]Y = \lambda\hbar^2 Y(\theta,\varphi)$ 　$\langle 6 \rangle$

$\Rightarrow [\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]Y(\theta,\varphi) = -\lambda Y(\theta,\varphi)$ 　$\langle 7 \rangle$

$\lambda = l(l+1)$ 　$l = 0, 1, 2, 3 \cdots$

∴ $\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y = -l(l+1)\sin^2\theta\, Y$ 　$\langle 8 \rangle$

这是一个拉普拉斯方程：我们分离变量：

$Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ 　$\langle 9 \rangle$

将 $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ 代回 $\langle 8 \rangle$ 式

$$\left\{\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]+l(l+1)\sin^2\theta\right\}+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=0 \qquad \langle 10\rangle$$

"{ }"内的部分只含变量"θ"，第二部分则只含"φ"

∴这两边的部分都只能是常数.

我们取一个分离常数并记为 m^2

$$\therefore \begin{cases}\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right]+l(l+1)\sin^2\theta=m^2 & ① \\ \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=-m^2 & ②\end{cases} \qquad \langle 11\rangle$$

关于"φ"的②式很容易解:

② ⇒ $\Phi(\varphi)=e^{im\varphi}$ （这里我们将另一个解 $e^{-im\varphi}$ 包含进去了，因为我们允许 m 取到负值） ⟨12⟩

周期性的边界条件是很显然的:

$$\Phi(\varphi+2\pi)=\Phi(\varphi) \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \qquad \langle 13\rangle$$

现在回到关于"θ"的方程:

$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)\sin^2\theta-m^2\right]\Theta=0 \qquad \langle 14\rangle$$

若这里描述一下 $\lambda=-l(l+1)$ 的问题: ☆ 线内的内容可以忽略

不妨取 $m=0$. ∴ $\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\lambda\sin\theta\,\Theta=0$ ⟨15⟩

取 $\cos\theta=x$, ∴ $\frac{d}{d\theta}=\frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx}=-\sin\theta\frac{d}{dx}$

一∴ $\Theta(\theta)=\Theta(\arccos x)=y(x)$

$$\therefore \langle 15\rangle \Rightarrow \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dy}{dx}\right]-\lambda y=0 \qquad \langle 16\rangle$$

这是一个 Legendre DE（勒让德微分方程）

讨论 Legendre DE: $(1-x^2)y''-2xy'+\lambda y=0$ （λ = real constant） ⟨17⟩

直接见下张

Legendre DE:

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + \lambda y = 0 \quad (\lambda = \text{real constant}) \quad \langle 17\rangle$$

取: Frobenius series: $y = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{s+n}$

∴ $y = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{s+n}$, $y' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (s+n) x^{s+n-1}$,

$y'' = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (s+n)(s+n-1) x^{s+n-2}$

∴原方程 ⇒: $\sum_{n=0}^{\infty} c_n (s+n)(s+n-1) x^{s+n-2}$

$$- \sum_{n=0}^{\infty} c_n [(s+n)(s+n-1) - 2(s+n) + \lambda] x^{s+n} = 0. \quad \langle 18\rangle$$

观察这个指数方程. 通俗地说. 丫 n从0开始. ∴前两阶时.

两个部分的系数~~都~~必须为0. $n \geq 2$开始 可以推出递推公式,

① $n=0$. x^{s-2} 项有: $s(s-1)=0$, $s_1=0; s_2=1$

② $n=1$ x^{s-1} 项有: $c_1(s+1)s=0$ 如果 $s=1$ 则 $c_1=0$. 如果 $s=0$ $c_1 \in R$.

$s=0$时: 递推公式: $c_n = \frac{(n-2)(n-1)-\lambda}{n(n-1)} \quad (n \geq 2) \quad \langle 19\rangle$

∴通解形式: $y(x) = c_0 \sum_{n=\text{even}}^{\infty} c_n' x^n + c_1 \sum_{n=\text{odd}}^{\infty} c_n' x^n \quad \langle 20\rangle$

$s=1$ 时; 取奇列

现在用比值测试解系的收敛性: → (为了有收敛半径)

$$R_n = \left|\frac{c_n' x^n}{c_{n-2}' x^{n-2}}\right| = \left|\frac{(n-2)(n-1)-\lambda}{n(n-1)}\right| \cdot |x|^2 \quad \langle 21\rangle$$

$|x|<1$ 时 两个解系列都收敛. 当$|x|=1$时 比值法就失效了.

用积分法测试: $\int^M \frac{(t-2)(t-1)-\lambda}{t(t-1)} dt = \underbrace{\int^M \frac{(t-2)}{t} dt}_{\infty \ \boxed{\text{as } M\to\infty}} - \int^M \frac{\lambda}{t(t-1)} dt \quad \langle 22\rangle$

$\int^M \frac{(t-2)}{t} dt$ 在 $M\to\infty$ 时发散 $\to\infty$.

如果λ取 $l(l+1)$ 的形式. l是非负整数. 则会有个在全x都收敛的多项式形式的通解.

现在我们可以将<14>式写为:

$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)\sin^2\theta-m^2\right]\Theta=0 \qquad l=0,1,2\cdots$$

继续暂停回到刚才对勒让德方程的讨论:

如果 $\lambda=l(l+1)$ 则对于所有 x [包含 $|x|=1$, 不仅是 $|x|<1$]

那么有通解:

$$y(x)=c_0\sum_{n=\text{even}}^{\infty}c_n'x^n+c_1\sum_{n=\text{odd}}^{\infty}c_n'x^n$$

$c_1=0$ (l取偶) $\quad c_0=0$ (l取奇)

$$\therefore\ c_0c_0'=(-1)^{l/2}\frac{l!}{2^l\left[\left(\frac{l}{2}\right)!\right]^2} \quad (l=\text{偶数})$$

$$c_1c_1'=(-1)^{(l-1)/2}\frac{l!}{2^{l-1}\left[\left(\frac{l-1}{2}\right)!\right]^2} \quad (l=\text{奇数})$$

我们把标准解称为勒让德多项式: $P_l(x)$ $\quad l=0,1,2\cdots$

现在返回 $\hat{L}^2$ 算符的经过变量分离之后的 Legendre 方程:

$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)\sin^2\theta-m^2\right]\Theta=0 \qquad l=0,1,2\cdots \quad \langle 14\rangle$$

$\therefore$ 有形式如右的通解: $\boxed{\Theta(\theta)=AP_l^m(\cos\theta)}$

* 别忘了之前令 $\cos\theta=x$ 将 <14> 化为了勒让德方程

不取 $m=0$ 令 $\cos\theta=x$ 可以转化为关联勒让德方程

(当然我们讨论时为了方便起见取 $m=0$;
现在 m 也是可变量 P_l^m 称关联勒让德函数.
上述通解是勒让德多项式乘上与 m
有关的关联系数)

而

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{|m|/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|}P_l(x)$$

→ 勒让德多项式

由罗德里斯公式 (Rodrigues formula) 定义勒让德多项式:

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l(x^2-1)^l$$

小而总结，$\hat{L}^2$ 的本征方程在球坐标中分离变量。

变量"φ" $\rightarrow$ $\Phi(\varphi)=e^{im\varphi}$ $m=0,\pm1,\pm2\cdots$

变量"θ" $\rightarrow$ $\Theta(\theta)=AP_l^m(\cos\theta)$

$$=A\cdot(1-x^2)^{|m|/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|}\frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l(x^2-1)^l$$

当然我们还没解完，由上述解的表达式不难看出。

m取奇数解不是x的多项式而出现 $\sqrt{1-x^2}$ 因子。

但 $P_l^m(\cos\theta)$ 是关于 $\cos\theta$ 的多项式，因为 $\sqrt{1-\cos^2\theta}=\sin\theta$. [奇数m乘$\sin\theta$]

继续讨论 $|m|>l$ 时 $P_l^m=0$.

∴我们有：$l=0,1,2\cdots$; $m=-l,-l+1,\cdots-1,0,1,\cdots l-1,l$

现在我们有了 $\Phi(\varphi)$ 和 $\Theta(\theta)$ 应当有球谐函数 $Y(\theta,\varphi)$

但 $\Theta(\theta)$ 有系数 A（用于归一化）

∴现在还需将 $Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ 归一化

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|Y|^2\sin\theta d\theta d\varphi=1$$

由于 $Y_l^m(\theta,\varphi)=AP_l^m(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi}$ 而求出归一化常数 A.

最后结论：$\hat{L}^2$ 算符的本征函数（是球谐函数）

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\begin{cases}(-1)^m\sqrt{\dfrac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi\cdot(l+|m|)!}}\,e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta) & m\geq0\\[2ex] \sqrt{\dfrac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi\,(l+|m|)!}}\,e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta) & m\leq0\end{cases}$$

附：讨论 $\hat{L}^2$ 算符与 $\hat{L}$ 算符的分量的关系：

$$[\hat{L}^2, L_x] = [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x]$$
$$= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z$$
$$= L_y(-i\hbar L_z) + (i\hbar L_z)L_y + L_z(i\hbar L_y) + (i\hbar L_y)L_z$$
$$= 0$$

同理：$[\hat{L}^2, L_y] = [\hat{L}^2, L_z] = 0$

即 $\hat{L}^2$ 算符与 $\hat{L}$ 算符在 x, y, z 的分量算符都是对易的.

班级：物基二班
姓名：马士金
学号：2014301510099

参考文献（书目）

1、量子力学与原子物理学 —— 武汉大学出版社 张杨华 刘莲君 主编

2. Introduction to Quantum Mechanics —— （美）David J. Griffiths

3. MATHEMATICAL PHYSICS —— Butkov