Methods of Mathematical Physics

§19 Spherical Harmonics

Lecturer: 黄志琦

https://github.com/zqhuang/SYSU_MMP

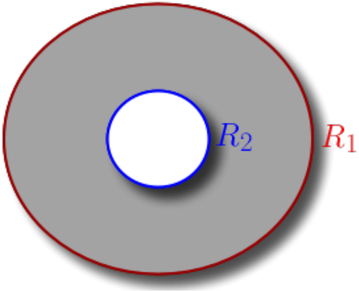
本讲内容

- 一些简单问题的回顾
- 单位球面上的谐函数

一些简单问题的回顾

· · · · · ·

思考题

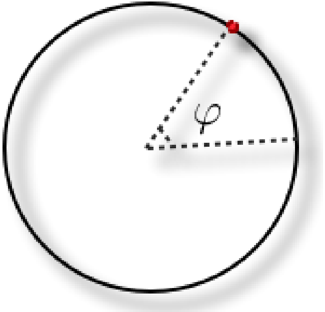


一个圆环($R_1 \geq r \geq R_2$)上的满足边界上值为零的谐函数有哪些?
它们满足的一般正交定理具体写出来是怎样的?

思考题

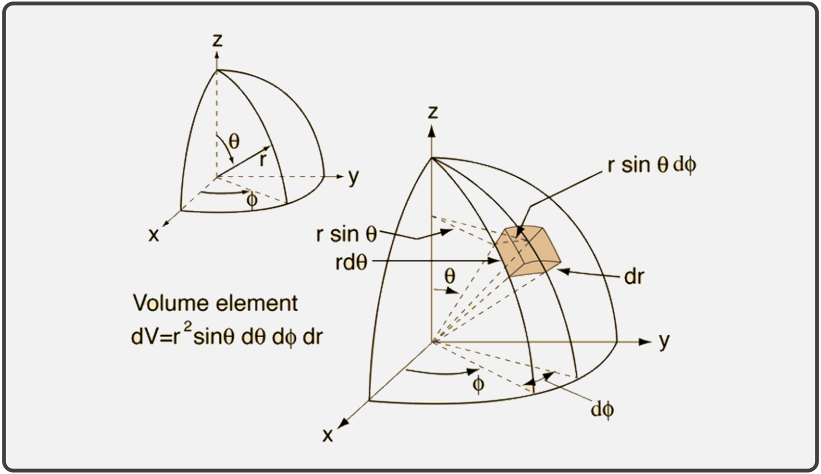
单位圆周是一个一维空间，用坐标ϕ 来描述。

对单位圆周，思考如下问题：



- $\nabla^2 Q = -k^2 Q$里的k^2取什么值时才能使谐函数有解?
- 不同的k^2对应的谐函数是正交的吗?
- 对一个固定的k^2，谐函数有哪些？它们是正交的吗?
- 回忆实对称矩阵的本征值理论并和上述讨论结果做比较。

单位球面上的谐函数


z
θ
r
y
φ
x
z
r sin θ dφ
r sin θ
rdθ
θ
dr
Volume element
dV=r²sinθ dθ dφ dr
y
φ
dφ
x

单位球面上的谐函数

在球坐标(r,θ,ϕ)里固定$r=1$，就得到单位球面：这是一个二维空间。

单位球面上的谐函数满足：

$$\nabla^2 Q = -k^2 Q$$

其中拉普拉斯算符用θ,ϕ的坐标明确写出来就是

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

(如对此有疑问，请回顾第15讲正交曲面坐标系的知识)

单位球面上的谐函数

因为推导比较复杂，先给出结果，把证明留到你们瞌睡的时候再讲:

单位球面上谐函数存在的条件是$k^2 = \ell(\ell+1)$，$\ell = 0, 1, 2, \ldots$。对每个ℓ，存在$2\ell+1$个解：$Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ $(-\ell \leq m \leq \ell)$。

在文献中常常省略“单位”二字，简单地把$Y_{\ell m}$叫做球面谐函数或球谐函数。

$\ell = 0$的情况

$\ell = 0$的情况只有$2\ell + 1 = 1$个球面谐函数，它是个常数：

$$\boxed{Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}}$$

$\ell = 1$的情况

$\ell = 1$的情况有$2\ell + 1 = 3$个球面谐函数:

$$\begin{aligned} Y_{10}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos\theta, \\ Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}. \end{aligned}$$

$\ell = 2$的情况

$\ell = 2$的情况有$2\ell + 1 = 5$个球面谐函数:

$$
\begin{aligned}
Y_{20}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(3\cos^2\theta - 1\right), \\
Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}, \\
Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}.
\end{aligned}
$$

$Y_{\ell m}$“大致长什么样”

- $Y_{\ell m}$可以写成θ的一个函数$\Psi_{\ell m}(\theta)$乘以$e^{im\phi}$:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi)=\Psi_{\ell m}(\theta)e^{im\phi}$$

  - 当m为偶数时，$\Psi_{\ell m}(\theta)$可以写成$\cos\theta$的ℓ次多项式；
  - 当m为奇数时，$\Psi_{\ell m}(\theta)$可以写成$\sin\theta$乘以$\cos\theta$的$\ell-1$次多项式。

- 在单位球面上按复数内积规则正交归一化:

$$\int_0^{\pi}d\theta\int_0^{2\pi}\sin\theta d\phi\, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)Y_{\ell',m'}(\theta,\phi)=\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}.$$

思考题

显然谐函数乘以任何一个非零常数仍然是谐函数，所以谐函数的归一化是人为规定的。

谐函数的正交性也是人为规定的吗?

谐函数是如何得到的

不是重点

Chebyshev多项式

$$T_n(\cos\theta) = \cos(n\theta); \quad U_n(\cos\theta) = \frac{\sin[(n+1)\theta]}{\sin\theta}$$

温习小学知识

把$\cos(2\theta)$写成$\cos\theta$的多项式。

温习小学知识

把$\cos(3\theta)$写成$\cos\theta$的多项式。

温习小学知识

把$\frac{\sin(2\theta)}{\sin\theta}$写成$\cos\theta$的多项式。

温习小学知识

把$\dfrac{\sin(3\theta)}{\sin\theta}$写成$\cos\theta$的多项式。

温习小学知识

把$\frac{\sin(4\theta)}{\sin\theta}$写成$\cos\theta$的多项式。

思考题

证明: $\cos(n\theta)$和$\frac{\sin[(n+1)\theta]}{\sin\theta}$分别可以写成$\cos\theta$的$n$次多项式:

$$\cos(n\theta) = T_n(\cos\theta); \quad \frac{\sin[(n+1)\theta]}{\sin\theta} = U_n(\cos\theta).$$

其中的n次多项式T_n和U_n分别称为第一类Chebyshev多项式和第二类Chebyshev多项式。

递推

利用三角函数的加法公式，容易得到：

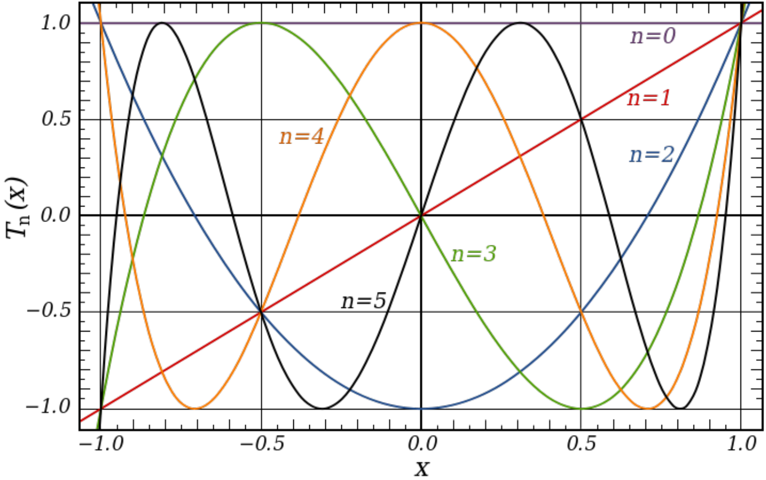
$$\begin{aligned} T_{n+2}(x) &= xT_{n+1}(x) + (x^2 - 1)U_n(x), \\ U_{n+1}(x) &= xU_n(x) + T_{n+1}(x). \end{aligned}$$

由此可以从$T_0 = 1, U_0 = 1, T_1 = x$出发递推出所有Chebyshev多项式：

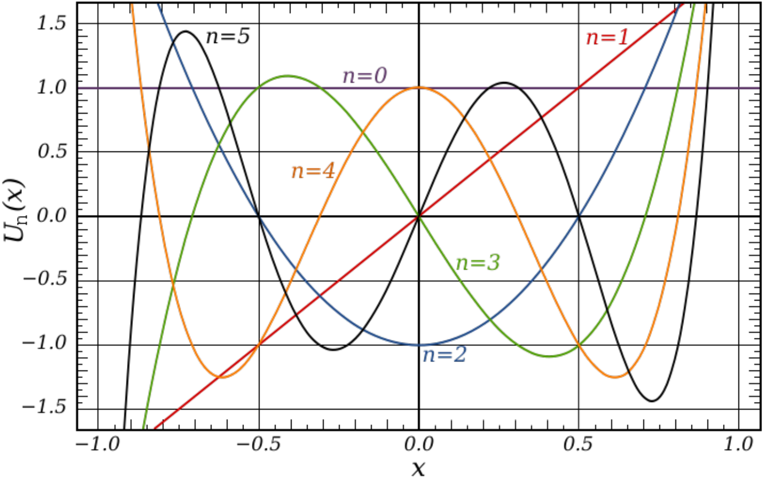
前几个Chebyshev多项式

$$
\begin{aligned}
T_0(x) &= 1; & U_0(x) &= 1; \\
T_1(x) &= x; & U_1(x) &= 2x; \\
T_2(x) &= 2x^2 - 1; & U_2(x) &= 4x^2 - 1; \\
T_3(x) &= 4x^3 - 3x; & U_3(x) &= 8x^3 - 4x; \\
T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1; & U_4(x) &= 16x^4 - 12x^2 + 1; \\
T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x; & U_5(x) &= 32x^5 - 32x^3 + 6x; \\
\ldots & & \ldots &
\end{aligned}
$$

前几个$T_n(x)$的图



前几个$U_n(x)$的图



回到球面谐函数的计算

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Q}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Q}{\partial\phi^2}=-k^2 Q$$

分离变量，令$Q=\Psi(\theta)\Lambda(\phi)$

$$\frac{(\sin\theta\Psi')'}{\Psi\sin\theta}+\frac{\Lambda''}{\Lambda\sin^2\theta}=-k^2.$$

显然必须有

$$\frac{\Lambda''}{\Lambda}=\mathrm{const.}$$

又显然Λ满足周期性边界条件$\Lambda(\phi+2\pi)=\Lambda(\phi)$，所以得到

$$\Lambda(\phi)=e^{\pm im\phi},\ m=0,1,2,\ldots$$

分离变量：θ的函数

对固定的m， $\Psi(\theta)$满足：

$$\frac{(\sin\theta\Psi')'}{\Psi\sin\theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} = -k^2$$

或者重新组织一下：

$$\Psi'' + \cot\theta\,\Psi' + \left(k^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Psi = 0.$$

分离变量：θ的函数——自带边界条件

在北极$\theta = 0$和南极$\theta = \pi$处，Ψ必须满足下列边界条件：
对$m = 0$，

$$\Psi' = (-\Psi'' - k^2\Psi)\tan\theta = 0;$$

对$m > 0$，

$$\Psi = \frac{\Psi''\sin^2\theta + \Psi'\sin\theta\cos\theta}{m^2 - k^2\sin^2\theta} = 0.$$

如果解是振荡型的，上述边界条件就要求$[0, \pi]$里包含了半整数个振荡周期。这告诉我们k^2的允许取值很可能只能是一些离散的值。

分离变量：θ的函数——粗略估算

在进行严格求解之前，我们先猜想一个解的大致样子。
当$\theta \ll 1$时，方程可以近似写为：

$$\Psi'' + \frac{1}{\theta}\Psi' + \left(k^2 - \frac{m^2}{\theta^2}\right)\Psi = 0.$$

这个方程很眼熟，实际上，如果做变量替换$x = k\theta$，就可以化为标准的贝塞尔方程。也就是说，当$\theta \ll 1$时解大约是$J_m(k\theta)$。

如果$k^2 \gg m^2$，$J_m(k\theta)$的第一个峰的位置远小于1。那么，可以粗略地把$J_m(k\theta)$的半周期当成$\frac{\pi}{k}$。要求在$[0, \pi]$内有整数个半周期，即要求$k = \ell, \ell \in Z, \ell \gg m$。

我们对这个猜测并不是很有信心：因为θ比较大时解未必还和$J_m(k\theta)$相似，$\ell \gg m$的条件不满足时我们也无法证明解并不存在。

分离变量：θ的函数——严格求解的结果

严格求解的结果却出乎意料地和猜测非常接近：$k = \sqrt{\ell(\ell+1)}, \quad \ell \geq m.$

严格地得到这个结论的方法大致有两种：

- 代数方法
- 算符方法

算符推导方法简洁优美，以后在学习量子力学时会接触到。我们这里只介绍比较繁琐的代数方法。

分离变量：θ的函数——$m=0$的情况

在$[0,\pi]$内的函数$\Psi(\theta)$可以用$\cos(n\theta)$, $\sin(n\theta)$ （$n=0,1,2\ldots$) 进行展开。

我们先考虑$m=0$，也就是解具有绕z轴的旋转对称性的情况。这时的方程为

$$\frac{1}{\sin\theta}(\Psi'\sin\theta)'+k^2\Psi=0.$$

Ψ在$[0,\pi]$两端的导数为零，只有$\cos(n\theta)$满足条件，所以**猜测**：

$$\Psi(\theta)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\cos(n\theta)$$

分离变量：θ的函数——$m=0$的情况

因为我们已经知道$\cos(n\theta)$可以写成$\cos\theta$的多项式，所以还可以写成

$$\Psi(\theta)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\cos^n\theta$$

逐项求导得到

$$\Psi'\sin\theta=\sum_{n=1}^{\infty}(-c_n n)\cos^{n-1}\theta\sin^2\theta$$

把$\sin^2\theta$换成$1-\cos^2\theta$，并按幂次重新整理，得到

$$\Psi'\sin\theta=-c_1+\sum_{n=0}^{\infty}[nc_n-(n+2)c_{n+2}]\cos^{n+1}\theta$$

分离变量：θ的函数——$m=0$的情况

再次求导，得到

$$\frac{1}{\sin\theta}\left(\Psi'\sin\theta\right)' = \sum_{n=0}^{\infty}(n+1)\left[(n+2)c_{n+2} - nc_n\right]\cos^n\theta$$

微分方程

$$\frac{1}{\sin\theta}\left(\Psi'\sin\theta\right)' + k^2\Psi = 0$$

就转化为

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{(n+1)(n+2)c_{n+2} + \left[k^2 - n(n+1)\right]c_n\right\}\cos^n\theta = 0$$

分离变量：θ的函数——$m = 0$的情况

于是我们得到系数的递推关系：

$$c_{n+2} = \frac{n(n+1) - k^2}{(n+1)(n+2)} c_n.$$

这个递推式在n很大时（即递推式里k^2可以忽略时）给出的渐近行为是$nc_n \to \text{const.}$。

分离变量：θ的函数——$m=0$的情况

由一开始的定义：

$$\Psi(\theta)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\cos(n\theta)$$

可以推出

$$\sum_{n=0}^{\infty}c_{2n}=\frac{\Psi(0)+\Psi(\pi)}{2},\quad \sum_{n=0}^{\infty}c_{2n+1}=\frac{\Psi(0)-\Psi(\pi)}{2}$$

这似乎和我们掌握的$nc_n\to\mathrm{const.}$有矛盾？（级数$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}$显然发散.）

解决矛盾的办法就是让$k^2=\ell(\ell+1)$，这样递推公式会在$n=\ell$中断（$c_{\ell+2}=c_{\ell+4}=\ldots=0$）。奇偶性跟$\ell$不同的$n$对应的$c_n$则全部为零。

$m \neq 0$的情况

$m \neq 0$的情况的推导是类似的，留为作业。

课后作业(题号44-45)

44 证明球面谐函数的正交性。

45 当$m > 0$时证明单位球面谐函数有解的条件是

$$k^2 = \ell(\ell+1),\ \ \ell = m, m+1, \ldots$$