

Methods of Mathematical Physics

§19 Spherical Harmonics

Lecturer: 黄志琦

https://github.com/zqhuang/SYSU_MMP

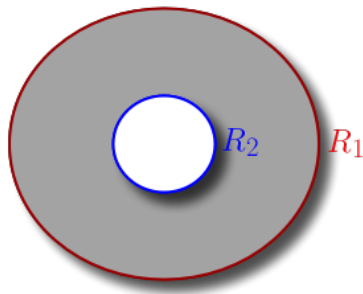
本讲内容

- ▶ 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

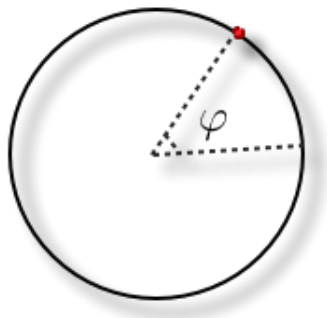


一个圆环($R_1 \geq r \geq R_2$)上的满足边界上值为零的谐函数有哪些？
它们满足的一般正交定理具体写出来是怎样的？

思考题

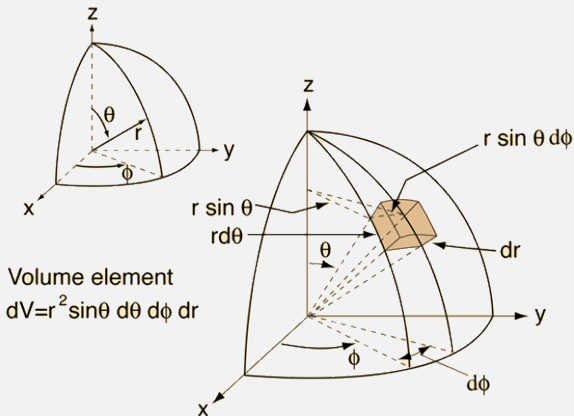
单位圆周是一个一维空间，
用坐标 ϕ 来描述。

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



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 $k^2 = \ell(\ell + 1)$, $\ell = 0, 1, 2, \dots$ 。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：

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

$\ell = 1$ 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:

$$Y_{20}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$

$Y_{\ell m}$ “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 $\frac{\sin(3\theta)}{\sin \theta}$ 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

$$T_0(x) = 1;$$

$$T_1(x) = x;$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1;$$

$$T_3(x) = 4x^3 - 3x;$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1;$$

$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x;$$

...

$$U_0(x) = 1;$$

$$U_1(x) = 2x;$$

$$U_2(x) = 4x^2 - 1;$$

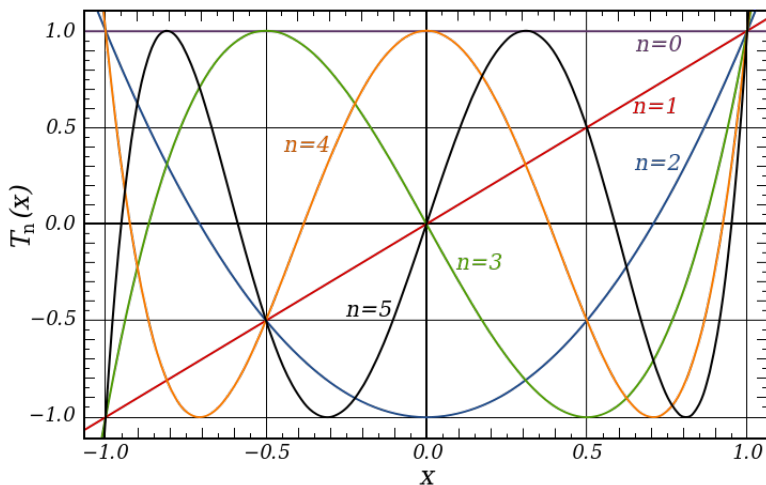
$$U_3(x) = 8x^3 - 4x;$$

$$U_4(x) = 16x^4 - 12x^2 + 1;$$

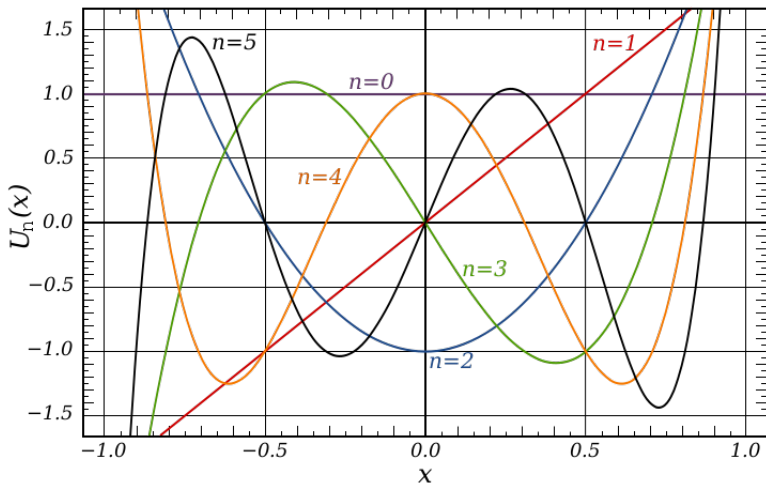
$$U_5(x) = 32x^5 - 32x^3 + 6x;$$

...

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

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

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

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

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 $k = \ell, \ell \in \mathbb{Z}, \ell \gg m$ 。

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： $k = \sqrt{\ell(\ell+1)}$, $\ell \geq m$.

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 $\cos(n\theta)$, $\sin(n\theta)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) 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**(这种猜测其实是有bug的, 下一讲我们会详细分析):

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

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

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

微分方程

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

就转化为

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

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 $nc_n \rightarrow \text{const.}$ 。

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 $nc_n \rightarrow \text{const.}$ 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 ($c_{\ell+2} = c_{\ell+4} = \dots = 0$)。奇偶性跟 ℓ 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

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