Methods of Mathematical Physics

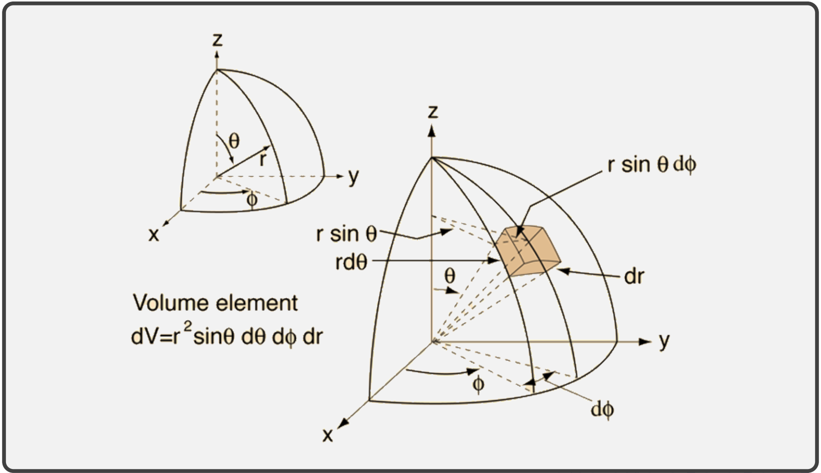
§23 球面谐函数$Y_{\ell m}$

Lecturer: 黄志琦

http://zhiqihuang.top/mmp

本讲内容

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

同样直接给出球面谐函数的求解结果：

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：$Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ $(-\ell \leq m \leq \ell)$。

在文献中常常把$Y_{\ell m}$叫做球谐函数。

$\ell=0$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:

$$
\begin{aligned}
Y_{10}(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \\
Y_{1,\pm1}(\theta,\phi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}.
\end{aligned}
$$

$\ell = 2$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$e^{im\phi}$:

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

- 在单位球面上按复数内积规则正交归一化:

$$\int d\Omega\, Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)Y_{\ell',m'}(\theta,\phi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}.$$

其中$\int d\Omega$是球面积分$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$的简写。

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?

球面谐函数的微分表示

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\left[\sin^m\theta\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\right)^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]e^{im\phi}$$

准备工作：乘积多重导数公式

设f,g为x的函数，我们都知道

$$(fg)' = f'g + fg'.$$

这个公式可以推广到任意阶导数：

$$(fg)^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!} f^{(k)} g^{(n-k)},$$

其中 $f^{(k)}$表示f的k重导数。

(和二项式定理一样，这个公式最简明有效的证明方法是用数学归纳法，请自行完成。)

准备工作：推广的乘积多重导数公式

设ρ, f, g为x的函数，则

$$\left(\rho\frac{d}{dx}\right)^n (fg) = \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!} \left[\left(\rho\frac{d}{dx}\right)^k f\right] \left[\left(\rho\frac{d}{dx}\right)^{n-k} g\right],$$

证明思路：令$y = \int \frac{dx}{\rho}$并对变量y应用乘积的多重导数公式。

思考题

记算符 $\hat{D} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}$，请验证:

- $\hat{D}\sin^2\theta = 2\cos\theta$;
- $\hat{D}^2\sin^2\theta = -2$;
- 对整数$n > 2$，$\hat{D}^n\sin^2\theta = 0$.
- $\hat{D}\cos\theta = -1$;
- 对整数m，$\hat{D}\sin^m\theta = m\sin^{m-2}\theta\cos\theta$;
- 对整数m，$\hat{D}(\sin^m\theta\cos\theta) = m\sin^{m-2}\theta - (m+1)\sin^m\theta$;

球面谐函数的微分表达式

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\left[\sin^m\theta\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\right)^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]e^{im\phi}$$

证明概要

记

$$N_{\ell m} := \frac{1}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}};$$

$$\Psi_{\ell m}(\theta) := \sin^m\theta\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\right)^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta.$$

则只要证明微分方程和归一化:

- $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Psi_{\ell m}\right] + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Psi_{\ell m} = 0.$$
- $$\int_0^\pi [\Psi_{\ell m}(\theta)]^2 \sin\theta d\theta = \frac{1}{2\pi N_{\ell m}^2} = 4^\ell(\ell!)^2\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\frac{2}{2\ell+1}.$$

第一部分：微分方程

令 $\hat{D} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}$，在恒等式

$$\sin^2\theta\,\hat{D}\sin^{2\ell}\theta = 2\ell\cos\theta\sin^{2\ell}\theta$$

两边作用 $\hat{D}^{\ell+m}$，得到

$$\begin{aligned} & \sin^2\theta\,\hat{D}^{\ell+m+1}\sin^{2\ell}\theta + 2(\ell+m)\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta \\ & -(\ell+m)(\ell+m-1)\,\hat{D}^{\ell+m-1}\sin^{2\ell}\theta \\ = \; & 2\ell\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta - 2\ell(\ell+m)\,\hat{D}^{\ell+m-1}\sin^{2\ell}\theta. \end{aligned}$$

稍作整理：

$$\begin{aligned} & \sin^2\theta\,\hat{D}^{\ell+m+1}\sin^{2\ell}\theta + 2m\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta \\ & +(\ell+m)(\ell-m+1)\,\hat{D}^{\ell+m-1}\sin^{2\ell}\theta = 0. \end{aligned} \tag{1}$$

第一部分：微分方程

两边同乘以$\sin^m\theta$,

$$\sin^{m+2}\theta\,\hat{D}^{\ell+m+1}\sin^{2\ell}\theta+2m\sin^m\theta\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta$$
$$+(\ell+m)(\ell-m+1)\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m-1}\sin^{2\ell}\theta=0.$$

上式可以写成

$$\sin^2\theta\,\hat{D}\left[\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]+m\sin^m\theta\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta$$
$$+(\ell+m)(\ell-m+1)\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m-1}\sin^{2\ell}\theta=0.$$

第一部分：微分方程

两边作用 $\hat{D}$，得到

$$\hat{D}\left\{\sin^2\theta\,\hat{D}\left[\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]\right\}+m^2\sin^{m-2}\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta$$
$$-m(m+1)\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta+m\sin^m\theta\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m+1}\sin^{2\ell}\theta$$
$$+(\ell+m)(\ell-m+1)m\sin^{m-2}\cos\theta\,\hat{D}^{\ell+m-1}\sin^{2\ell}\theta$$
$$+(\ell+m)(\ell-m+1)\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta=0.$$

利用前面的方程(1)，把上式蓝色部分替换掉，得到：

$$\hat{D}\left\{\sin^2\theta\,\hat{D}\left[\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]\right\}+m^2\sin^{m-2}\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta$$
$$-m(m+1)\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta-2m^2\sin^{m-2}\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta$$
$$+2m^2\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta$$
$$+(\ell+m)(\ell-m+1)\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta=0.$$

第一部分：微分方程

把同类项都写到一起就得到了最后的结果

$$\hat{D}\left\{\sin^2\theta\,\hat{D}\left[\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]\right\} + \left[\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\sin^m\theta\,\hat{D}^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta = 0.$$

即

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Psi_{\ell m}\right] + \left[\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Psi_{\ell m} = 0.$$

第一部分证毕。

第二部分：归一化

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\pi} [\Psi_{\ell m}(\theta)]^2 \sin\theta d\theta \\
=\ &\int_0^{\pi} \sin^{2m}\theta \left[\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\right)^{\ell+m}\sin^{2\ell}\theta\right]\sin\theta d\theta \\
=\ &\int_{-1}^{1} (1-x^2)^m \left[\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}}(1-x^2)^{\ell}\right]^2 dx
\end{aligned}$$

在最后一步我们做了变量替换$x=\cos\theta$。

第二部分：归一化

分部积分$\ell+m$次，注意$1-x^2$在端点总是消失，就得到

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\pi [\Psi_{\ell m}(\theta)]^2 \sin\theta d\theta \\
= \ & (-1)^{\ell+m}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^\ell \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}}\left[(1-x^2)^m\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}}(1-x^2)^\ell\right]dx \\
= \ & \frac{(2\ell)!(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^\ell dx
\end{aligned}
$$

注意蓝色部分之所以为常数，是因为$(1-x^2)^m\frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}}(1-x^2)^\ell$是$\ell+m$次多项式，求导$\ell+m$次后只有最高次幂有非零贡献。

第二部分：归一化

最后，做变量替换$t = \frac{1+x}{2}$，得到

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\pi [\Psi_{\ell m}(\theta)]^2 \sin\theta d\theta \\
= \quad & \frac{2^{2\ell+1}(2\ell)!(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \int_0^1 t^\ell (1-t)^\ell dt \\
= \quad & \frac{2^{2\ell+1}(2\ell)!(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \frac{[\Gamma(\ell+1)]^2}{\Gamma(2\ell+2)} \\
= \quad & \frac{2^{2\ell+1}(2\ell)!(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \frac{(\ell!)^2}{(2\ell+1)!} \\
= \quad & 4^\ell (\ell!)^2 \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \frac{2}{2\ell+1}
\end{aligned}
$$

第二部分证毕。

Homework

- 证明球面谐函数的正交性。
- 列出所有$\ell = 3$的球面谐函数
- 利用球面谐函数的微分表示证明：对相反的两个方向$\mathbf{n} = (\theta, \phi)$和$-\mathbf{n} = (\pi - \theta, \pi + \phi)$，有

$$Y_{\ell m}(\mathbf{n}) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(-\mathbf{n})$$