Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική ΙΙ *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις ΙΙΙ: Σφαιρικές Αρμονικές

Στις σημειώσεις αυτές δίνομε την αναπαράσταση των ιδιοανυσμάτων της τροχιακής στροφορμής στο χώρο των θέσεων.

Θα ξεκινήσουμε από τις εξισώσεις που προσδιορίζουν τις ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών $\hat{\vec{L}}^2$ και $\hat{L}_z$:

$$\hat{\vec{L}}^2 \left| n,l,m \right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \left| n,l,m \right\rangle \qquad \text{και} \qquad \hat{L}_z \left| n,l,m \right\rangle = \hbar m \left| n,l,m \right\rangle \tag{3.1}$$

Στη σχέση αυτή συμπεριλάβαμε όλους τους κβαντικούς αριθμούς οι οποίοι είναι αναγκαίοι για τον πλήρη καθορισμό της κατάστασης ενός συστήματος που έχει σφαιρική συμμετρία.
Αν μεταγράψουμε τις παραπάνω σχέσεις στο χώρο των θέσεων θα έχουμε

$$\int d^3r' \left\langle \vec{r} \right| \hat{\vec{L}}^2 \left| \vec{r}' \right\rangle \left\langle \vec{r}' \middle| n,l,m \right\rangle = \hbar^2 l(l+1) \left\langle \vec{r} \middle| n,l,m \right\rangle \;\Rightarrow\; L^2 \Psi_{nlm}(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{nlm}(\vec{r}) \tag{3.2}$$

και

$$\int d^3r' \left\langle \vec{r} \right| \hat{L}_z \left| \vec{r}' \right\rangle \left\langle \vec{r}' \middle| n,l,m \right\rangle = \hbar m \left\langle \vec{r} \middle| n,l,m \right\rangle \;\Rightarrow\; L_z \Psi_{nlm}(\vec{r}) = m\hbar \Psi_{nlm}(\vec{r}) \tag{3.3}$$

Στις εξισώσεις αυτές χρησιμοποιήσαμε τα αποτελέσματα της προηγούμενης άσκησης και γράψαμε

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \text{ και } L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{3.4}$$

Αφού οι διαφορικοί τελεστές (3.4) αφορούν μόνο στις γωνίες είναι προφανές ότι μπορούμε να ψάξουμε για λύση των εξισώσεων (3.2) και (3.3) η οποία να έχει την παραγοντοποιημένη μορφή

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3.5}$$

και επομένως να γράψουμε :

$$L^2 \Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) \Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) \quad \text{και} \quad L_z \Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = m\hbar \Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3.6}$$

Ορισμένες εξηγήσεις είναι αναγκαίες εδώ .
(i) Οι δείκτες στην ακτινική συνάρτηση R_{nl} δεν περιλαμβάνουν τον κβαντικό αριθμό m (ο οποίος συνδέεται με μια συγκεκριμένη κατεύθυνση) αφού η συνάρτηση αυτή δεν πρέπει να αλλάζει αν το σύστημά μας στραφεί.
(ii) Τα ανύσματα $\left| n,l,m \right\rangle$ στα οποία στηρίζεται η περιγραφή του συστήματος θεωρούμε ότι αποτελούν μια πλήρη και ορθοκανονική βάση :

$$\left\langle n',l',m' \middle| n,l,m \right\rangle = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \tag{3.7}$$

$$\sum_{n,l,m} \left| n,l,m \right\rangle \left\langle n,l,m \right| = I \tag{3.8}$$

Αν περάσουμε στο χώρο των θέσεων οι παραπάνω σχέσεις θα μας δώσουν

$$\int d^3r \langle n',l',m'|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|n,l,m\rangle = \int_o^\infty drr^2 R^*_{n'l'}(r)R_{nl}(r)\int d\Omega \Upsilon^*_{l',m'}(\theta,\varphi)\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = \delta_{n,n'}\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$$
$$\sum_{n,l,m}\langle\vec{r}|n,l,m\rangle\langle n,l,m|\vec{r}'\rangle = \sum_{n,l,m} R_{nl}(r)R^*_{nl}(r')\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi)\Upsilon^*_{l,m}(\theta',\varphi') = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{3.9}$$

(γράψαμε $\int d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta$)

Οι σχέσεις (3.9) μας οδηγούν στο συμπέρασμα :

$$\int_0^\infty drr^2 R^*_{n'l'}(r)R_{nl}(r) = \delta_{nn'}\delta_{ll'} \tag{3.10}$$

$$\int d\Omega \Upsilon^*_{l',m'}(\theta,\varphi)\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.11}$$

$$\sum_n R_{nl}(r)R^*_{nl}(r') = \frac{1}{r^2}\delta(r-r') \tag{3.12}$$

$$\sum_{l,m}\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi)\Upsilon^*_{l,m}(\theta',\varphi') = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi') \equiv \delta(\Omega-\Omega') \tag{3.13}$$

Οι σχέσεις (3.10) και (3.12) εκφράζουν την ορθογωνιότητα και την πληρότητα των ακτινικών συναρτήσεων και οι σχέσεις (3.11) και (3.13) την ορθογωνιότητα και την πληρότητα των γωνιακών συναρτήσεων .

(iii) Οι συναρτήσεις $\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi)$ είναι οι λεγόμενες **σφαιρικές αρμονικές** και όπως φαίνεται από την παραπάνω συζήτηση εκφράζουν το πλάτος πιθανότητας μια κατάσταση η οποία χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς l και m να βρεθεί στη διεύθυνση που προσδιορίζεται από τις γωνίες θ και φ.

Οι συναρτήσεις αυτές μπορούν τώρα να προσδιορισθούν από τις εξισώσεις (3.2) και (3.3) τις οποίες μπορούμε να ξαναγράψουμε :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + l(l+1)\right)\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = 0 \tag{3.14}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = m\hbar\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3.15}$$

Καθώς οι διαφορικοί τελεστές δεν αναμειγνύουν τις μεταβλητές θ και φ μπορούμε να αναζητήσουμε λύση της μορφής

$$\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = P_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) \tag{3.16}$$

Από την εξ. (3.15) βλέπουμε αμέσως ότι

$$\frac{\partial}{\partial \varphi}\Phi_m(\varphi) = im\Phi_m(\varphi) \quad \Rightarrow \quad \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \tag{3.17}$$

Θέλουμε η συνάρτηση $\Phi_m(\varphi)$ να είναι μονότιμη

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi) \tag{3.18}$$

πράγμα που είναι απαραίτητο αν θέλουμε το ανάπτυγμα μιας οποιασδήποτε συνάρτησης στη βάση που συγκροτούν οι ιδιοκαταστάσεις της θέσης να είναι μοναδικό, κι έτσι είναι προφανές ότι ο αριθμός m **πρέπει να είναι ακέραιος** . Το σημαντικό αυτό συμπέρασμα είναι αναπόδραστα συνδεδεμένο με την δυνατότητα αναπαράστασης της τροχιακής στροφορμής στο χώρο των θέσεων και θα πρέπει να συγκριθεί με το γενικότερο συμπέρασμα το οποίο προκύπτει από την αλγεβρική διαδικασία προσδιορισμού των ιδιοτιμών της στροφορμής και σύμφωνα με το οποίο ο αριθμός αυτός μπορεί να παίρνει και ημιακέραιες τιμές.

Γράφοντας τώρα $\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = P_{lm}(\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ η εξίσωση (3.14) θα πάρει τη μορφή :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + l(l+1)\right) P_{lm}(\theta) = 0 \tag{3.19}$$

Η εξίσωση αυτή είναι γνωστή στη βιβλιογραφία ως συσχετισμένη (associated) εξίσωση Legendre και οι λύσεις της είναι γνωστές ως συσχετισμένες (associated) συναρτήσεις Legendre .Για να τη διαχειρισθούμε θα επιστρατεύσουμε τους τελεστές $\hat{L}_\pm$ για τους οποίους ξέρουμε ότι

$$\hat{L}_\pm \left| l,m \right\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \left| l, m \pm 1 \right\rangle \tag{3.20}$$

και των οποίων η αναπαράσταση στον χώρο των θέσεων μπορεί να διαβαστεί από τις σχέσεις (3) της προηγούμενης άσκησης.
Αν δούμε τώρα τις εξισώσεις (3.20) στο χώρο των θέσεων θα διαβάσουμε :

$$-i\hbar e^{i\varphi}\left(i\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\Upsilon_{l,m+1}(\theta,\varphi) \tag{3.21}$$

$$-i\hbar e^{-i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\Upsilon_{l,m-1}(\theta,\varphi) \tag{3.22}$$

Ας ξεκινήσουμε από την (3.21) η οποία για $m = l$ απλοποιείται στην

$$-i\hbar e^{i\varphi}\left(i\frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\Upsilon_{l,l}(\theta,\varphi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l\cot\theta\right) P_{ll}(\theta) = 0 \tag{3.23}$$

Η τελευταία εξίσωση λύνεται εύκολα :

$$P_{ll}(\theta) = C_l \sin^l\theta \tag{3.24}$$

Τη σταθερά C_l μπορούμε να την προσδιορίσουμε από τη συνθήκη νορμαλισμού (3.11).
Πράγματι. Από την (3.24) βρίσκουμε ότι

$$\Upsilon_{l,l}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}C_l e^{il\varphi}\sin^l\theta$$

και επομένως θα πρέπει

$$\left|C_l\right|^2\int_0^{2\pi}d\theta\sin^{2l+1}\theta=1 \tag{3.25}$$

Το ολοκλήρωμα που εμφανίζεται μπορεί να υπολογιστεί εύκολα αν κάνουμε δύο παρατηρήσεις. Πρώτα μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι

$$I_0=\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta \underset{\cos\theta=x}{=} \int_{-1}^{1}dx=2 \tag{3.26}$$

και στη συνέχεια , με κατά παράγοντες ολοκλήρωση ,να δούμε ότι

$$I_l=\int_0^{\pi}d\theta\sin^{2l+1}\theta=\int_{-1}^{1}dx(1-x^2)^l=2l\int_{-1}^{1}dxx^2(1-x^2)^{l-1}=2l\int_{-1}^{1}dx(1-x^2)^{l-1}-2l\int_{-1}^{1}dx(1-x^2)^l$$

ή ότι

$$(2l+1)I_l=2lI_{l-1} \tag{3.27}$$

Από τις σχ. (3.26) και (3.27) βρίσκουμε αμέσως

$$\begin{aligned} I_l&=\frac{2l}{2l+1}I_{l-1}=\frac{2l}{2l+1}\frac{2(l-1)}{2(l-1)+1}I_{l-2}=...=\frac{2l}{2l+1}\frac{2(l-1)}{2(l-1)+1}\cdots\frac{2}{2+1}2=\\ &=\frac{2^l l!}{1\cdot3\cdot5\cdots(2l+1)}2=\frac{2\cdot4\cdot6\cdots(2l)}{1\cdot2\cdot3\cdot4\cdot5\cdots(2l+1)}2^l l!2=\frac{(2^l l!)^2}{(2l+1)!}2 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Έχουμε επομένως προσδιορίσει ότι

$$\left|C_l\right|=\frac{1}{2^l l!}\left[\frac{(2l+1)!}{2}\right]^{1/2} \tag{3.29}$$

Τη φάση της σταθεράς νορμαλισμού δεν μπορούμε να την προσδιορίσουμε με την παραπάνω διαδικασία. Η συνήθης σύμβαση είναι να τη διαλέξουμε $(-1)^l$.
Μετά από όλα αυτά έχουμε διαπιστώσει ότι :

$$\Upsilon_{l,l}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[\frac{(2l+1)!}{4\pi}\right]^{1/2}\sin^l\theta e^{i\varphi l} \tag{3.30}$$

Μπορούμε τώρα να μεταβάλλουμε τον δεύτερο από τους δείκτες της συνάρτησης (3.30) εφαρμόζοντας επανειλημμένα τη σχέση (3.22) :

$$\begin{aligned} \Upsilon_{l,l-1}&=\frac{1}{\hbar\sqrt{2l}}L_-\Upsilon_{l,l}\ ,\\ \Upsilon_{l,l-2}&=\frac{1}{\hbar\sqrt{2l}}\frac{1}{\hbar\sqrt{2(2l-1)}}L_-^2\Upsilon_{l,l}\ ,...,\\ \Upsilon_{l,l-k}&=\frac{1}{\sqrt{(2l)}\sqrt{2(2l-1)}\cdots\sqrt{k(2l-(k-1))}}\frac{1}{\hbar^k}L_-^k\Upsilon_{l,l} \end{aligned} \tag{3.31}$$

όπου γράψαμε $\qquad L_- = -i\hbar e^{-i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$

Αν εφαρμόσουμε τη σχέση (3.31) για $k = l - m$ θα πάρουμε :

$$\Upsilon_{l,m} = \frac{1}{\sqrt{(2l)}\sqrt{2(2l-1)}\cdots\sqrt{(l-m)(2l-(l-m-1))}}\frac{1}{\hbar^{l-m}}L_-^{l-m}\Upsilon_{l,l} =$$

$$= \frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[\frac{(2l+1)!}{4\pi}\right]^{1/2}\frac{1}{\sqrt{(2l)\cdots(l+m+1)1\cdot 2\cdots(l-m)}}\frac{1}{\hbar^{l-m}}L_-^{l-m}\left[\sin^l\theta e^{il\varphi}\right] = \tag{3.32}$$

$$= \frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2}\frac{1}{\hbar^{l-m}}L_-^{l-m}\left[\sin^l\theta e^{il\varphi}\right]$$

Για το τελευταίο βήμα κάναμε την παρατήρηση :

$$(2l+1)! = (2l+1)(2l)! = (2l+1)2l(2l-1)\cdots(l+m+1)(l+m)!$$

Για να ολοκληρωθεί το αποτέλεσμα πρέπει να προσδιορίσουμε τη μορφή του τελευταίου παράγοντα στη σχέση (3.32).

Θα βοηθηθούμε πολύ αν κάνουμε ορισμένες παρατηρήσεις .
Μπορούμε κατ' αρχή να ελέγξουμε ότι :

$$\begin{aligned} L_-\left[e^{il\varphi}f(\theta)\right] &= -\hbar e^{i(l-1)\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + l\cot\theta\right)f(\theta) = \\ &= -\hbar e^{i(l-1)\varphi}\frac{1}{\sin^l\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin^l\theta f(\theta)\right] = \hbar e^{i(l-1)\varphi}\frac{1}{\sin^{l-1}\theta}\frac{d}{d\cos\theta}\left[\sin^l\theta f(\theta)\right] \end{aligned} \tag{3.33}$$

Αν γράψουμε τώρα $\dfrac{1}{\sin^{l-1}\theta}\dfrac{d}{d\cos\theta}\left[\sin^l\theta f(\theta)\right] = \tilde{f}(\theta)$ και επαναλάβουμε τη διαδικασία (3.33) θα βρούμε

$$L_-^2\left[e^{il\varphi}f(\theta)\right] = \hbar^2 e^{i(l-2)\varphi}\frac{1}{\sin^{l-2}\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^2\left[\sin^l\theta f(\theta)\right]$$

και αν αυτό το παιχνίδι το παίξουμε k φορές θα πάρουμε :

$$L_-^k\left[e^{il\varphi}f(\theta)\right] = \hbar^k e^{i(l-k)\varphi}\frac{1}{\sin^{l-k}\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^k\left[\sin^l\theta f(\theta)\right] \tag{3.34}$$

Συνδυάζοντας την (3.34) με την (3.32) θα έχουμε

$$\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\right]^{1/2} e^{im\varphi}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{l-m}\sin^{2l}\theta \tag{3.35}$$

Η σχέση αυτή προσδιορίζει τις σφαιρικές αρμονικές .

Μια χρήσιμη ιδιότητά της είναι η

$$\Upsilon_{l,-m}(\theta,\varphi)=(-1)^m\Upsilon^*_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3.36}$$

και μπορεί να αποδειχθεί εύκολα αν σκεφθούμε ότι $\Upsilon_{l,-m}(\theta,\varphi)=\Upsilon_{l,m}(-\theta,-\varphi)$.
Είναι χρήσιμο να γράψουμε μερικές από τις πρώτες σφαιρικές αρμονικές :

$$\begin{gathered}\Upsilon_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\ ,\ \Upsilon_{0,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}\ ,\ \Upsilon_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \\ \Upsilon_{2,\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\varphi}\ ,\ \Upsilon_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}\ ,\ \Upsilon_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)\end{gathered} \tag{3.37}$$

Πριν κλείσουμε μια ακόμη παρατήρηση.
Αν κάνουμε την αλλαγή $\vec{r}\to-\vec{r}$ που ισοδυναμεί με την αλλαγή $\theta\to\pi-\theta$ και $\varphi\to\pi+\varphi$ (όπως εύκολα μπορούμε να διαπιστώσουμε γεωμετρικά αλλά και αναλυτικά από τις
$\hat{x}=\cos\varphi\sin\theta\to\cos(\pi+\varphi)\sin(\pi-\theta)=-\hat{x}$, $\hat{y}=\sin\varphi\sin\theta\to\sin(\pi+\varphi)\sin(\pi-\theta)=-\hat{y}$,
$\hat{z}=\cos\theta\to\cos(\pi-\theta)=-\hat{z}$)
θα δούμε ότι

$$\Upsilon_{l,m}(\pi-\theta,\pi+\varphi)\underset{(35)}{=}(-1)^m(-1)^{l-m}\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi)=(-1)^l\Upsilon_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3.38}$$

Η τελευταία σχέση σας δείχνει την **ομοτιμία**, την απόκριση, δηλαδή, των σφαιρικών αρμονικών στην αλλαγή $\vec{r}\to-\vec{r}$.