Något om klotytefunktioner (spherical harmonics) och Hamiltonoperatorn

Definition:
På sidan 346 definieras Y_l^m, så när som på en normeringskonstant, som

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}, \qquad l = 0,1,.., \qquad m = -l\dots l$$

Ortogonalitet:
Om $m_1 \neq m_2$ så blir

$$(Y_{l_1}^{m_1}|Y_{l_2}^{m_2}) = \int_0^\pi P_{l_1}^{m_1}(\cos\theta)P_{l_2}^{m_2}(\cos\theta)\sin\theta\,d\theta \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{i(m_1-m_2)\varphi}\,d\varphi}_{=0} = 0$$

Om $m_1 = m_2$ men $l_1 \neq l_2$ så blir istället den första integralen noll eftersom $P_{l_1}^m$ och $P_{l_2}^m$ är egenfunktioner till samma symmetriska operator men med olika egenvärden. Se sidan 342.

Fullständighet:
Varje L_2funktion $f(\theta,\varphi)$ kan uppfattas som en L_2-funktion på enhetsklotet som är oberoende av r. Den kan då utvecklas i den ortogonala basen på sidan 346, $\varphi_{klm} = j_l(\sqrt{\lambda_{lk}}r)Y_l^m(\theta,\phi)$. Det innebär att för varje $\epsilon > 0$ finns en linjärkombination av φ_{klm} så att

$$\int |f(\theta,\varphi) - \sum c_{klm} j_l(\sqrt{\lambda_{lk}}r)Y_l^m(\theta,\phi)|^2 r^2 \sin\theta\,drd\theta d\varphi < \epsilon$$

Då är även för något r

$$\int |f(\theta,\varphi) - \sum c_{klm} j_l(\sqrt{\lambda_{lk}}r)Y_l^m(\theta,\phi)|^2 \sin\theta\,d\theta d\varphi < 3\epsilon$$

ty annars skulle

$$\int |f(\theta,\varphi) - \sum c_{klm} j_l(\sqrt{\lambda_{lk}}r)Y_l^m(\theta,\phi)|^2 r^2 \sin\theta\,drd\theta d\varphi \geq 3\epsilon \int_0^1 r^2\,dr = \epsilon$$

Alltså är linjärkombinationerna av Y_l^m täta i $L_2(S)$ där S betecknar sfären.

Hamiltonoperatorn:
I kvantmekaniken vill man hitta lösningar till den tidsoberoende Schrödingerekvationen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u + (V(r) - E)u = 0$$

Detta är detsamma som att hitta egenfunktioner u och egenvärden E till Hamiltonoperatorn

$$\mathcal{H}u = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u + V(r)u$$

Potentialen V antas här bero endast på r. Vi använder variabelseparation precis som på sidan 344 i läroboken och sätter $u = R(r)F(\theta,\varphi)$. Detta leder till

$$\frac{(r^2R')'}{R} - \frac{r^2V(r)2m}{\hbar^2} + \frac{Er^2 2m}{\hbar^2} = -\frac{\Lambda F}{F} = c$$

R-delen får olika lösningar beroende på $V(r)$ men vinkeldelen blir alltid densamma som i läroboken, $c = l(l+1)$, $F = Y_l^m$. Eftersom det inte är frågan om en Sturm-Liouville-operator kan vi få både positiva och negativa egenvärden E och de uppför sig inte som vi är vana vid.

Homogena polynom:

Ett polynom kallas homogent av grad l om det är en summa av monom av grad l. Exempelvis är $p(x,y,z) = x^2y - xyz$ ett homogent polynom av grad 3. Det finns även harmoniska ($\Delta p = 0$) homogena polynom, tex $p(x,y,z) = x^2 + y^2 - 2z^2$. Varje homogent polynom av grad l kan framställas som

$$p_l = h_l + (x^2 + y^2 + z^2)h_{l-2} + (x^2 + y^2 + z^2)^2 h_{l-4} + \cdots$$

där h_k betecknar ett harmoniskt homogent polynom av grad k. Speciellt ser vi att på sfären $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ är alla polynom linjärkombinationer av harmoniska homogena polynom.

Samband mellan Y_l^m och polynom i sfäriska koordinater:

För ett harmoniskt homogent polynom av grad l gäller att $h(r,\theta,\varphi) = r^l h(1,\theta,\varphi)$ och

$$0 = \Delta h = \frac{1}{r^2}(r^2(r^l)')'h(1,\theta,\varphi) + \frac{1}{r^2}r^l \Lambda h(1,\theta,\varphi) = l(l+1)r^{l-2}h(1,\theta,\varphi) + r^{l-2}\Lambda h(1,\theta,\varphi)$$

Alltså är $-\Lambda h(1,\theta,\varphi) = l(l+1)h(1,\theta,\varphi)$ vilket betyder att $h(1,\theta,\varphi)$ är en egenfunktion till $-\Lambda$ med egenvärdet $l(l+1)$. Då måste $h(1,\theta,\varphi)$ vara en linjärkombination av Y_l^m för $m = -l \ldots l$.

Slutsatser:

Varje L_2-funktion på sfären kan uppfattas som en L_2-funktion på enhetsklotet och kan därför approximeras godtyckligt bra med polynom enligt Weierstrass approximationssats. Men på sfären är ju alla polynom linjärkombinationer av Y_l^m. Alltså är linjärkombinationerna av Y_l^m täta i $L_2(S)$.

En annan sak som följer av det ovan sagda är att Y_l^m själv är ett harmoniskt homogent polynom i x, y, z av grad l. Nedan följer en lista över de lägsta gradtalen.

Y_0^0	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
Y_1^{-1}	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}(x - iy)$
Y_1^0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}z$
Y_1^1	$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{3}{4\pi}}(x + iy)$
Y_2^{-2}	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{-2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x + iy)^2$
Y_2^{-1}	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(x - iy)z$
Y_2^0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2z^2 - x^2 - y^2)$
Y_2^1	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(x + iy)z$
Y_2^2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x + iy)^2$