

Тема: Разделение
переменных в уравнении
Лапласа в сферических
координатах. Сферические и
шаровые функции Лапласа.

- При исследовании стационарных процессов различной физической природы (колебания, теплопроводность, диффузия и др.) обычно приходят к уравнениям эллиптического типа. Наиболее распространенным уравнением этого типа является уравнение Лапласа.
 $\Delta\psi = 0.$
-
- Функция ψ называется гармонической в области T , если она непрерывна в этой области вместе со своими производными до второго порядка и удовлетворяют уравнению Лапласа.
- Пример - задача, приводящая к уравнению Лапласа - это стационарное тепловое поле.

- Если тепловое поле нестационарно, то задачу о температуре такого поля мы уже

$$\rho c \frac{1}{a^2} \frac{d\psi}{dt} = \Delta\psi, \quad \left(a^2 = \frac{k}{c_p \rho} \right)$$

- Если процесс стационарный, то распределение температуры не меняется с течением времени, и, следовательно, $\Delta\psi = 0$. (1) Δ – оператор Лапласа. Лапласа.

- Если $\Delta\psi = -f$, где $f = \frac{F}{k}$; F – плотность тепловых источников; a, k – коэффициенты теплопроводности.

где F – плотность тепловых источников;
 a, k – коэффициенты теплопроводности.

- Неоднородное уравнение Лапласа (2) часто называют уравнением Пуассона.

- Уравнение Лапласа - уравнение эллиптического типа; Оно может быть одно 1-, 2- и трехмерным.
- Функция $\psi(x, y, z)$, удовлетворяющая уравнению Лапласа, называется гармонической $\psi(x, y, z)$
- Пусть функция определена в области V , границей которой является замкнутая поверхность S .
- Для трехмерного уравнения Лапласа составятся следующие краевые задачи.
- Задача 1 (задача Дирихле): найти функцию $\psi(x, y, z)$ удовлетворяющую внутри области V уравнению Лапласа (1) и на границе S области V условию $\psi(x, y, z)|_S = f(x, y, z)$, где $f(x, y, z)$ - это известная функция определенная на поверхности S .

- 2. задача Неймана: найти функцию, удовлетворяющую внутри области в уравнению Лапласа (1) и на границе S области V краевому условию

$$\frac{d\psi(x, y, z)}{dn} \Big|_S = f(x, y, z), \quad \text{где } \frac{d\psi(x, y, z)}{dn}$$

- нормальная производная функции $\psi(x, y, z)$, то есть производная, взятая по направлению внешней нормали к поверхности S. В текущей точке $M(x, y, z)$; $f(x, y, z)$ - известна функция, определенная на поверхности S.

- 3. Задача 3. Найти функцию, удовлетворяющую внутри области V уравнению Лапласа (1) и на границе S область
- $$h\psi(x, y, z) + k \frac{d\psi(x, y, z)}{dn} \Big|_S = f(x, y, z),$$

- где h и k - некоторые постоянные; f -

- Так как во всех трёх задачах требуется, чтобы искомая функция удовлетворяла уравнению Лапласа внутри области V , то каждая из них называется внутренней краевой задачей.
 - Также можно сформулировать и внешние краевые задачи для трехмерного 2- и 1-мерного уравнений Лапласа.
 - Рассмотрим ряд специальных функций, применяемых при решении сформулированных задач.
 - Решим уравнение Лапласа (1) в сферических координатах для краевой задачи Дирихле.
 - Общее выражение для уравнения Лапласа
- $$(1) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{d\psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \equiv 0$$

- Решение ищем в виде метода Фурье (разделения переменных) в сферических координатах для краевой

$$(2) \psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \cdot 2r \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1 \cdot \cos \theta}{r^2 \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1 \cdot \sin \theta}{r^2 \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = 0 \text{ или}$$

$$(1') \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cot \theta}{r^2} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = 0$$

- Подставляя (2) в получим следующее

$$R''Y + \frac{2}{r}R'Y + \frac{\cot \theta}{r^2}RY' + \frac{1}{r^2}RY'' + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta}RY''' \equiv 0$$

- Тогда для $R(r)$ и получаем соответствующие уравнения:

$$x^2 + y^2 + z^2 = R^2 \text{ (шар)}$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + 2r \frac{dR}{dr} - \lambda R = 0 \text{ (2) - Уравнение Эйлера}$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y \equiv 0,$$

- где λ - параметр разделения.
- Тогда $\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi)$ (3) - сферические функции.

- Если теперь ограниченные решения (3) находить в классе $Y(\theta, \varphi) = \Psi(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$, то для функций Ψ и Φ , получим соответственно:

$$\begin{cases} \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\mu}{\sin^2 \theta} \right) \Psi \equiv 0 & (4) \\ \Phi''(\varphi) + \mu \Phi(\varphi) = 0 & (5), \text{ где } \mu - \text{ параметр разделения} \end{cases}$$

- Уравнения (2), (4) и (5) соответствуют уравнению Лапласа (1), а уравнения (4) и (5) соответствуют также уравнению (3).
- Каждое из них является однородным линейным обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка, причём коэффициенты уравнений (2) и (3) являются переменными.

- Уравнение (5), поскольку $\Phi(\varphi)$ - периодическая функция, является гармонической, поэтому $\mu = n^2$ (имеет решения при целом $n \in \mathbb{Z}$).

- При этих μ линейно независимыми решениями уравнения $y = \Psi(x)$ являются функции $x = \cos \theta, \mu = n^2$.

- Если в уравнении (6) $(1-x^2) \frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + \left(\lambda - \frac{n^2}{(1-x^2)} \right) y = 0$, то получим уравнение

- Уравнение (6) называется обобщенным уравнением Лежандра $(7) (1-x^2) \frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + \lambda y \equiv 0$ переписывается в виде

- (7) - уравнение Лежандра

- 2. Так как нас интересует только угловая часть $\bar{Y}(\bar{\theta}, \bar{\phi})$ решения уравнения Лапласа, то запишем его в декартовой системе координат так:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} = 0$$

- Перейдем к комплексным переменным

$$\begin{cases} \eta = x + iy \\ \xi = x - iy \\ z = z \end{cases}$$

- В частности $Y(\theta, \varphi)$ удовлетворяет условиям

$$Y(\theta, \varphi + 2\pi) = Y(\theta, \varphi)$$

$$|Y(0, \varphi)| < \infty, \quad |Y(\pi, \varphi)| < \infty \quad (5')$$

- Ограниченные решения уравнения $\bar{Y}(\bar{\theta}, \bar{\phi})$, обладающие непрерывными до второго порядка производными, называются сферическими функциями.

- В сферических координатах: $x = r \begin{cases} x = r \cdot \cos\varphi \cdot \sin\theta \\ y = r \cdot \sin\varphi \cdot \sin\theta \\ z = r \cdot \cos\theta \end{cases}$
- Тогда

$$\eta = x - iy = r \cdot \cos\varphi \cdot \sin\theta + ir \cdot \sin\varphi \cdot \sin\theta$$

$$= r \cdot \sin\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi) = r \cdot \sin\theta \cdot e^{-i\varphi} \quad (8)$$

$$f = x - iy = r \cdot \sin\theta \cdot e^{-i\varphi}$$

$$Z = r\cos\theta$$

- В новых переменных $\eta = x + iy$, $\xi = x - iy$

$$\eta + \xi = 2x \Rightarrow x = \frac{\eta + \xi}{2}$$

$$\eta - \xi = x + iy - x + iy = 2iy \Rightarrow y = \frac{\eta - \xi}{2i}$$

- Тогда уравнение Лаплас $\Delta\psi = 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} = 0$

- приводится к следующему каноническому виду

$$4 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta \partial \xi} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = 0 \quad (9)$$

- Рассмотрим теперь частные решения уравнения (9) в виде однородных полиномов от независимых переменных η, ξ, z , то есть в виде полинома $\psi_l(\eta, \xi, z) = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} a_{\alpha\beta\gamma} \eta^\alpha \xi^\beta z^\gamma$, $\alpha + \beta + \gamma = l$
- Тогда общее выражение для полинома с учётом того, что r, θ, φ — сферические координаты, запишется в виде:

$$\begin{aligned} \psi_l(\eta, \xi, z) &= \sum_{\alpha, \beta, \gamma} a_{\alpha\beta\gamma} r^\alpha (\sin \theta)^\alpha e^{i\alpha\varphi} r^\beta (\sin \theta)^\beta e^{-i\beta\varphi} r^\gamma (\cos \theta)^\gamma \\ &= \sum_{\alpha, \beta, \gamma} a_{\alpha\beta\gamma} (\sin \theta)^{\alpha+\beta} (\cos \theta)^\gamma e^{i(\alpha-\beta)\varphi} = r^l \Upsilon(\theta, \varphi) \quad (10) \end{aligned}$$

- Здесь мы обозначили условную часть полинома $\Upsilon(\theta, \varphi)$ через $\Upsilon(\theta, \varphi)$.

- Подставим полином (10) в уравнении Лапласа в сферических координатах (1):

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} (r^l Y(\theta, \varphi)) = l Y(\theta, \varphi) r^{l-1}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_l}{\partial r} \right) &= \frac{\partial}{\partial r} (r^2 l r^{l-1} Y(\theta, \varphi)) = \frac{\partial}{\partial r} (l r^{l+1} Y(\theta, \varphi)) \\ &= l(l+1) Y(\theta, \varphi) r^l. \end{aligned}$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{d\psi_l}{dr} \right) = \frac{1}{r^2} l(l+1) Y(\theta, \varphi) r^l = l(l+1) r^{l-2} Y(\theta, \varphi) \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{d\psi_l}{dr} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \psi_l &= 0 - \text{(уравнение Лапласа } \Delta_{\theta, \varphi} \psi_l \\ &= r^l \Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

$$l(l+1) r^{l-2} Y(\theta, \varphi) + \frac{1}{r^2} r^l \Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = 0 \text{ или}$$

$$l(l+1) r^{l-2} Y(\theta, \varphi) + r^{l-2} \Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = 0 \Rightarrow$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = - \frac{l(l+1) Y(\theta, \varphi) r^{l-2}}{r^{l-2}} \text{ или}$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y(\theta, \varphi) \quad (11)$$

- 3. Сравним уравнения (11) и (3). $\Delta_{\theta, \varphi} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi)$ (3)
- Они совпадают, если $-\lambda = -l(l+1)$ и $\lambda = l(l+1)$ (12), то есть нужные нам функции $Y(\theta, \varphi)$ представляют собой угловую часть однородных полиномов, являющихся решениями уравнения Лапласа. (Частный случай эти $l = 0, 1, 2, 3$ полиномов для найдены выше).
- Чтобы получить угловые части, достаточно перейти к сферическим координатам и положить $r = 1$ или разделить (3) r^l .
- Частные решения однородного дифференциального уравнения определены с точностью до произвольного постоянного множителя, т.к. если есть решение его, то и \cdot тоже решение. Выбор этого множителя называется нормировкой функции.
- В квантовой механике условия нормировки определяется физическим смыслом функции, а именно: решение уравнения Шрёдингера (волновая функция) обязательно должна удовлетворять $\int_V |\psi|^2 dV = 1$, где $|\psi|^2 = \psi^* \psi$,
- ψ^* комплексно-сопряженная функция; если интегрирование производится по всей области изменения независимых переменных.

- Тогда для нашей задачи, решен $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$ и кроме того $dV = r^2 \cdot \sin \theta d\theta d\varphi$ (в сферических координатах), условия записывается в виде

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1.$$

- Отсюда получаем, что $\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$ и

- $\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1$ (13),

- т.к. значения интегралов по различным независимым переменным никак между собой не связаны. Такая нормировка сферических функций общепринята.

Непрерывные в област $0 \leq \theta \leq \pi$ $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ решение уравнения (11) или $Y(\theta, \varphi + 2\pi) = Y(\theta, \varphi)$ называются сферическими функциями.

- 4. Выпишем теперь в явном виде найденные выше сферические функции. Как видно из формулы (1) $Y(\theta, \varphi)$ зависит от азимутального угла φ только как множитель $e^{im\varphi}$, где $m = \alpha - \beta$ — целое число, так как по определению l и m — целые числа. Значения $l = 0; m = 0, Y_{00} = C$ называются в виде Y_{lm} индексов

Пусть

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = C^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \text{ получаем}$$

$$-C^2 \cos \theta \cdot 2\pi \Big|_0^\pi = 1 \Rightarrow -C^2 (\cos \pi - \cos 0^\circ) \cdot 2\pi = 1.$$

$$-C^2(-2) \cdot 2\pi = 1, \quad C^2 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\boxed{Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}}$$

- Следовательно

- б) Пусть $l = 0; m = 1$. Тогда $\psi_1(r, \theta, \varphi) = r^l \cdot Y(\theta, \varphi) \Rightarrow$

$$\psi_1(r, \theta, \varphi) = r^1 \cdot Y_{11}(\theta, \varphi) \Rightarrow Y_{11} = \frac{\psi_1(r, \theta, \varphi)}{r} = \frac{a_1 \eta}{r}$$

- (Т.К. $\psi_1 = \frac{a_{11} \eta}{r} = C_{11} \frac{\eta}{r} = C_{11} \frac{r \sin \theta \cdot e^{i\varphi}}{r} = C_{11} \sin \theta \cdot e^{i\varphi}$,

- Т.К. $\eta = r \sin \theta \cdot e^{i\varphi}$)

- Из условия нормировки $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \Rightarrow$

$$C_{11}^2 \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \cdot \sin \theta \cdot \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} d\varphi$$

- Т.К. $\int \sin^2 \theta \cdot \sin \theta d\theta = \int -(1 - \cos^2 \theta) d(\cos \theta) = \int (\cos^2 \theta d(\cos \theta)$

$$- \int d(\cos \theta) = \left(\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) \Big|_0^\pi = -\frac{4}{3}$$

$$\Rightarrow C_{11}^2 \frac{4}{3} 2\pi = 1 \Rightarrow C_{11}^2 = \frac{3}{8\pi} \Rightarrow C_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} . \quad \text{Тогда } Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{i\varphi}$$

- Аналогично получается все остальные функции, которые запишем в виде таблицы

	0	1	2	3
0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \cos\theta;$ a, z	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1);$ $\eta\xi - 2z^2$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} \cdot (5 \cos^2 \theta$ $- 3) \cos\theta;$ $z^3 - \frac{3}{2}$ $\eta\xi z$
± 1	-	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin\theta \cdot e^{\pm i\varphi}$ $a_1\eta; a_2\xi$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cdot \sin\theta \cdot \cos\theta$ $\cdot e^{\pm i\varphi}$ $\eta z, \xi z$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \cdot (5 \cos^2 \theta$ $- 1) \sin\theta$ $\cdot e^{\pm i\varphi}$ $\eta^2 z - 4z^2 \eta$ $\xi^2 \eta - 4z^2 \xi$
± 2	-	-	$\sqrt{\frac{25}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{\pm i2\varphi}$ $\eta^2 \xi^2$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cos\theta$ $\cdot e^{\pm i2\varphi}$ $\eta^2 z, \xi^2 z$
± 3	-	-		$\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \cdot \sin^3 \theta \cdot e^{\pm 3i\varphi}$ $\eta^3 \xi^3$

- Из выше приведённых рассуждений следует, что уравнение (3) для функции $Y(\theta, \varphi)$ имеет решение $\lambda = l(l + 1)$ и $l = 0, 1, 2, \dots$,
- причём для каждого значения l имеет $(2l + 1)$ линейно независимых решений, соответствующих различным $m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm l$ значениям l .
- В квантовой механике l называется орбитальным квантовым числом, так как через него выражается момент импульса частицы (например, в атоме). l и m
- Конечно, сферические функции применяются и в других разделах физики; тогда l и m - просто параметры, которые принимают целые значения.

- 4. Приведем без вывода общую формулу, с помощью которой можно получить сферическую функцию $Y_{l,m}$

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_{l,m}(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi} \quad (14)$$

$$P_{l,m}(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x)^{\frac{m}{2}} \cdot \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} \cdot (x^2-1)^l; \quad x = \cos\theta$$

- Где
- Отметим, что из условия нормировки нормировочные положительные множители определяются с точностью до знака (например $C_{11}^2 = \frac{3}{8\pi}$ и т.д.). Мы выбрали их так чтобы

$$P_{l,|m|} = P_{l,-|m|}$$

- Иногда в квантовой механике принимают следующие определения

- $P_{l,-|m|} = (-1)^{|m|} \cdot P_{l,|m|}$ и $Y_{l,m} = \delta_m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \cdot P_{l,m}$
- И $\delta_m = (-1)^m$ при $m \geq 0$, $\delta_m = 1$ при $m < 0$.

- 6. При $\lambda = l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$, частными решениями уравнения $(2r^2 \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + 2r \frac{dR}{dr} - \lambda R = 0$ являются функции

- $R_1(r) = r^l$; $R_2(r) = \frac{1}{r^{l+1}}$.

$$r^l \cdot Y_l(\theta, \varphi), \frac{1}{r^{l+1}} Y_l(\theta, \varphi)$$

- Функции $\frac{1}{r^{l+1}} Y_l(\theta, \varphi)$ называют шаровыми функциями Лапласа l -го порядка. Они являются частными решениями уравнения Лапласа.

- Внутренние шаровые функции Лапласа являются однородными гармоническими многочленами l -ой степени по переменным $x, y,$