Polinomi di Legendre /2

Timoniere

Lo scopo dello scritto è di dare una una prova plausibile del teorema biassiale,

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\Omega')Y_{lm}(\Omega) \; .$$

che si rivela utile nei calcoli che riguardano l'atomo a due elettroni. Dimostrando anche questo risultato, possiamo calcolare le correzioni al livello fondamentale dell'atomo a due elettroni senza paura di incontrare altri mostri nel percorso.
Prima sono riportati alcuni risultati che vengono usati nella "prova plausibile" del teorema. In queste pagine ho scritto gli appunti di un pomeriggio di studio sul libro "Mathematical Methods of Physics" di Mathews e Walker. La maggior parte del lavoro non è pertanto originale. I calcoli invece potrebbero essere sbagliati.

Funzione Beta di Eulero

Sia $\Gamma(z)$ la funzione Gamma di Eulero:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1}e^{-x}dx \; .$$

e sia $\beta(r,s)$ la funzione Beta di Eulero:

$$\beta(r,s) = \int_0^1 x^{r-1}(1-x)^{s-1}dx \; .$$

Tramite il cambio di variabile $x = \cos^2\theta$, si ha che

$$\beta(r,s) = 2\int_0^{\pi/2} \cos^{2r-2}\theta \sin^{2s-2}\theta \, \cos\theta\sin\theta d\theta \, = 2\int_0^{\pi/2} \cos^{2r-1}\theta\sin^{2s-1}\theta d\theta \; .$$

Tornando alla funzione Gamma, è noto che

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1}e^{-x}dx = -e^{-x}x^{z-1}\Big|_0^\infty + \int_0^\infty (z-1)x^{z-2}e^{-x}dx = (z-1)\Gamma(z-1)$$

e visto che $\Gamma(1) = 1$, si ha

$$\Gamma(n) = (n-1)!$$

Consideriamo adesso il prodotto

$$\Gamma(r)\Gamma(s) = \int_0^\infty x^{r-1} e^{-x} dx \int_0^\infty y^{s-1} e^{-y} dy \, .$$

Se cambiamo variabili, introducendo $x = u^2$ ed $y = v^2$, si ottiene

$$\Gamma(r)\Gamma(s) = 4 \int_0^\infty u^{2r-2} e^{-u^2} u du \int_0^\infty y^{2s-2} e^{-v^2} v dv = \int_{-\infty}^\infty |u|^{2r-1} e^{-u^2} du \int_{-\infty}^\infty |y|^{2s-1} e^{-v^2} dv \, ,$$

da cui, passando a coordinati polari, e ponendo $r^2 = u^2 + v^2$, si ottiene

$$\Gamma(r)\Gamma(s) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-r^2} |r \cos\theta|^{2r-1} |r \sin\theta|^{2s-1} r \, dr \, d\theta \, ,$$

dunque

$$\Gamma(r)\Gamma(s) = 4 \int_0^\infty dr \, r^{2r+2s-1} e^{-r^2} \int_0^{\pi/2} d\theta \, \cos^{2r-1}\theta \sin^{2s-1}\theta \, .$$

Il primo integrale si può riscrivere come

$$\int_0^\infty dr \, r^{2r+2s-1} e^{-r^2} = \frac{1}{2} \int_0^\infty d(r^2) \, r^{2r+2s-2} e^{-r^2} = \frac{1}{2} \Gamma(r+s)$$

e quindi abbiamo trovato

$$\beta(r, s) = \frac{\Gamma(r)\Gamma(s)}{\Gamma(r+s)} \, .$$

Se r ed s sono numeri naturali, allora

$$\beta(r, s) = \frac{(r-1)!(s-1)!}{(r+s-1)!} \, .$$

Ortogonalità dei polinomi di Legendre

Si è già visto che, in $(-1, 1)$, è possibile sviluppare funzioni "ragionevoli" $f(w)$ nella base dei polinomi di Legendre[1]. Ora si vuole verificare con un calcolo esplicito che essi sono ortogonali e si vuole calcolare anche il fattore di normalizzazione necessario da adottare se si volesse normalizzare la base di questi polinomi. Allora calcoliamo

$$(P_l(w), P_m(w)) = \frac{1}{2^l l!} \frac{1}{2^m m!} \int_{-1}^1 dw \frac{d^l}{dw^l} (w^2-1)^l \frac{d^m}{dw^m} (w^2-1)^m \, . \tag{1}$$

Un integrale per parti fa si che si possa scrivere

$$(P_l(w), P_m(w)) = \frac{1}{2^l l!} \frac{1}{2^m m!} \left\{ \frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}} (w^2-1)^l \Big|_{-1}^{1} \frac{d^m}{dw^m} (w^2-1)^m - \int_{-1}^1 dw \frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}} (w^2-1)^l \frac{d^{m+1}}{dw^{m+1}} (w^2-1)^m \right\} .$$

[1] Vedi lo scritto "Polinomi di Legendre".

Per verificare che il primo pezzo sia zero, provo ad usare l'induzione. Si verifica banalmente che

$$\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^l|_{w=\pm 1} = 0 \qquad \text{per} \quad l=1$$

Inoltre vale

$$\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^l = \frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}\{(w^2-1)(w^2-1)^{l-1}\} = \sum_{k=0}^{l-1}\binom{l-1}{k}\frac{d^k}{dw^k}(w^2-1)\frac{d^{l-1-k}}{dw^{l-1-k}}(w^2-1)^{l-1} \, .$$

Esplicitando i termini si ha

$$\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^l = (w^2-1)\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^{l-1} + (l-1)2w\frac{d^{l-2}}{dw^{l-2}}(w^2-1)^{l-1} + \binom{l-1}{2}2\frac{d^{l-3}}{dw^{l-3}}(w^2-1)^{l-1} \, .$$

Ora assumiamo che la proposizione

$$\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^l|_{w=\pm 1} = 0$$

sia vera per $l-1$. Si ha che

$$\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^l|_{w=\pm 1} = (w^2-1)\frac{d^{l-1}}{dw^{l-1}}(w^2-1)^{l-1}|_{w=\pm 1}$$

$$+(l-1)2w\frac{d^{l-2}}{dw^{l-2}}(w^2-1)^{l-1}|_{w=\pm 1} + \binom{l-1}{2}2\frac{d}{dw}\frac{d^{l-2}}{dw^{l-2}}(w^2-1)^{l-1}|_{w=\pm 1} \, .$$

Il primo termine si annulla perchè lo calcoliamo in $w = \pm 1$, mentre il secondo ed il terzo termine scompaiono per il passo induttivo. Dunque abbiamo trovato che la proposizione è vera pure per l.

Appurata questa proprietà importante, di integrazioni per parti ne facciamo non una sola, ma l, ed otteniamo:

$$(P_l(w), P_m(w)) = \frac{1}{2^l l!}\frac{(-1)^l}{2^m m!}\int_{-1}^{1} dw (w^2-1)^l \frac{d^{m+l}}{dw^{m+l}}(w^2-1)^m \, .$$

Visto che

$$\frac{d^m}{dw^m}(w^2-1)^m = c_1 w^m + c_2 w^{m-1} + ...$$

se $l > m$, la funzione integranda è banalmente nulla. Visto che ovviamente il prodotto scalare (1) è simmetrico, abbiamo trovato

$$(P_l(w), P_m(w)) = 0 \qquad \text{se} \quad l \neq m \, .$$

Questo era stato giustificato precedentemente osservando che i polinomi di Legendre sono autofunzioni di un operatore hermitiano che, quindi, ammette autofunzioni ortogonali che formano una base completa. Sul "quindi" valgono le stesse cose già dette...

Se invece $l = m$, si ha

$$(P_l(w), P_l(w)) = \frac{1}{2^{2l}}\frac{(-1)^l}{(l!)^2}\int_{-1}^{1} dw (w^2-1)^l \frac{d^{2l}}{dw^{2l}}(w^2-1)^l \, .$$

Si osservi che

$$(w^2-1)^l = w^{2l} - l w^{2l-1} + ...$$

e quindi che
$$(P_l(w), P_l(w)) = \frac{1}{2^{2l}} \frac{(2l)!}{(l!)^2} \int_{-1}^{1} dw (1-w^2)^l \; .$$
Se ora cambiamo variabile ponendo $w = 2u - 1$, otteniamo
$$I_{ll} = (P_l(w), P_l(w)) = \frac{1}{2^{2l}} \frac{(2l)!}{(l!)^2} \int_{0}^{1} 2du (4u - 4u^2)^l$$
ovvero
$$I_{ll} = 2\frac{1}{2^{2l}} \frac{(2l)!}{(l!)^2} \int_{0}^{1} du \; 2^{2l} u^l (1-u)^l = 2\frac{(2l)!}{(l!)^2} \beta(l+1, l+1) \; .$$
Facendo uso della relazione che lega la funzione Gamma alla funzione Beta, ricavata nella prima sezione, possiamo scrivere
$$I_{ll} = 2\frac{(2l)!}{(l!)^2} \frac{(l!)^2}{(2l+1)!} = \frac{2}{2l+1} \; ,$$
e dunque si è trovato che
$$I_{ml} = \frac{2}{2l+1} \delta_{lm}$$
Per funzioni "ragionevoli" $f(x)$ che si possano espandere in $(-1, 1)$ nella base dei polinomi di Legendre, invece di normalizzare la base, continuiamo a scrivere, lo sviluppo
$$f(w) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(w) \; .$$
Moltiplicando ambi i menbri per $P_m(w)$ ed integrando su $(-1, 1)$, si ottiene
$$\int_{-1}^{1} dw \; P_m(w) f(w) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \int_{-1}^{1} dw \; P_m(w) P_l(w) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \frac{2}{2l+1} \delta_{lm}$$
cioè
$$c_m = \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^{1} dw \; P_m(w) f(w) \; .$$

Teorema Biassiale

Sia $|\psi>$ un ket di stato di un particolare sistema fisico. Ora potrò di sicuro scrivere
$$|\psi> = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} |lm>< lm|\psi>$$
e quindi
$$\psi(\Omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} B_{lm} < \Omega|lm> = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} B_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \; .$$

Abbiamo usato $|\Omega>$, autoket dell'operatore di direzione. Si ha

$$B_{lm} = \int d\Omega Y^*_{lm}(\theta, \varphi)\psi(\Omega)$$

e si ottiene, quindi, la relazione

$$\psi(\Omega) = \int d\Omega' \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\Omega')Y_{lm}(\Omega)\psi(\Omega')$$

che implica

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\Omega')Y_{lm}(\Omega) = \delta(\Omega' - \Omega) \, .$$

La differenza $\Omega' - \Omega$ dipende da un solo parametro, l'angolo tra le due direzione inviduate da

$$|\Omega >= \left\{ \begin{array}{l} x = \sin\theta\cos\varphi \\ y = \sin\theta\sin\varphi \\ z = \cos\theta \end{array} \right. \qquad |\Omega' >= \left\{ \begin{array}{l} x = \sin\theta'\cos\varphi' \\ y = \sin\theta'\sin\varphi' \\ z = \cos\theta' \end{array} \right. \, .$$

Si ha

$$< \Omega|\Omega' >= \cos\gamma = \sin\theta\cos\varphi\sin\theta'\cos\varphi' + \sin\theta\sin\varphi\sin\theta'\sin\varphi' + \cos\theta\cos\theta' \, ,$$

quindi

$$\cos\gamma = \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi - \varphi') + \cos\theta\cos\theta' \, .$$

Anche se la delta è tutto fuorchè una funzione ragionevole, tentiamo uno sviluppo della delta in $(-1, 1)$ con i polinomi di Legendre:

$$\delta(\Omega' - \Omega) = \delta(\cos\gamma) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos\gamma)$$

dove

$$c_l = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{1} d(\cos\gamma)\, P_l(\cos\gamma)\delta(\Omega' - \Omega) = \frac{2l+1}{4\pi} \int_{-1}^{1} d\Omega\, P_l(\cos\gamma)\delta(\Omega' - \Omega) \, .$$

Per $\Omega = \Omega'$, si ha $\gamma = 0$ e troviamo, allora, che

$$c_l = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(1) = \frac{2l+1}{4\pi}$$

data la normalizzazione dei polinomi di Legendre $P_l(1) = 1$.

Possiamo a questo punto scrivere

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\Omega')Y_{lm}(\Omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\gamma)$$

da cui otteniamo il risultato cercato:

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\Omega')Y_{lm}(\Omega) \, .$$

Per far vedere che si possono eguagliare i termini per ogni valore di l, basta far vedere che $P_l(\cos\gamma)$ si può scrivere come combinazione lineare di armoniche sferiche aventi tutte lo stesso l.

Sappiamo che se

$$|\Omega' >= R|\Omega >= \sum_{lm} R|lm >< lm|\Omega > \, ,$$

allora si ha

$$Y^*_{l'm'}(\Omega') = \sum_{lm} < l'm'|R|lm > Y^*_{lm}(\Omega) = \sum_{lm} D^l_{mm'} \delta_{ll'} Y^*_{lm}(\Omega)$$

e quindi

$$Y_{lm'}(\Omega') = \sum_m D^l_{mm'} Y_{lm}(\Omega) \, .$$

Ora dalla definizione di $Y_{lm}(\Omega)$ si ricava la relazione:

$$Y_{l0}(\Omega) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

e quindi

$$P_l(\cos\gamma) = \sum_m C^l_{m0} Y_{lm}(\Omega)$$

da cui vediamo appunto che in $P_l(\cos\gamma)$ sono presenti armoniche sferiche solo di ordine l.