Sferni harmonici i njihova primjena u fizici

Topalović, Mateo

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU
ODJEL ZA FIZIKU

MATEO TOPALOVIĆ

SFERNI HARMONICI I NJIHOVA PRIMJENA U FIZICI

Završni rad

Osijek, 2017.

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU

ODJEL ZA FIZIKU

MATEO TOPALOVIĆ

SFERNI HARMONICI I NJIHOVA PRIMJENA U FIZICI

Završni rad

Predložen Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku

radi stjecanja zvanja prvostupnika fizike

Osijek, 2017.

″Ovaj završni rad je izrađen u Osijeku pod vodstvom doc.dr.sc. Zvonka Glumca u sklopu Sveučilišnog preddiplomskog studija fizike na Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku.″

Sadržaj

Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku Završni rad

Odjel za fiziku

SFERNI HARMONICI I NJIHOVA PRIMJENA U FIZICI

Mateo Topalović

Sažetak

Uvod u sferne harmonike započinjemo Laplaceovom diferencijalnom jednadžbom u sfernim koordinatama. Sferne harmonike predstavljamo kao rješenje kutnog dijela Laplaceove jednadžbe. Nakon upoznavanja sa svojstvima sfernih harmonika iskoristit ćemo Laplaceov razvoj kako bi pronašli električni potencijal na površini sfere s danim rubnim uvjetom. U daljnjem izlaganju upoznat ćemo se s operatorom kutne količine gibanja i pomoću njega definirati Clebsch-Gordanove koeficijente te sfernim tenzorima pomoću kojih ćemo definirati Wignerove matrice, ali i neke druge bitne identitete koji koriste sferne harmonike. Na kraju rada ćemo ukratko reći nešto o vektorskim sfernim harmonicima.

(27 stranica, 3 tablice, 5 slika, 16 literaturnih navoda)

Rad je pohranjen u knjižnici Odjela za fiziku

Ključne riječi: Clebsch-Gordanovi koeficijenti/ električni potencijal/ Laplaceova jednadžba/ operator kutne količine gibanja/ sferni harmonici/ vektorski sferni harmonici/ Wignerove matrice

Mentor: doc.dr.sc. Zvonko Glumac

Ocjenjivači:

Rad prihvaćen:

University Josip Juraj Strossmayer Osijek Bachelor of Physics Thesis

Department of Physics

SFERNI HARMONICI I NJIHOVA PRIMJENA U FIZICI

Mateo Topalović

Abstract

We begin our thesis with Laplace`s equation in a spherical coordinate system. Spherical harmonics are represented as a solution to the angular part of Laplace`s equation. After familiarising ourselves with the properties of spherical harmonics, we will use Laplace expansion to find electric potential on the surface of a sphere with a given boundary condition. Furthermore, we are going to use angular momentum operator to define Clebsch-Gordan coefficients. In addition, we would familiarise ourselves with the concept of spherical tensors, and using them we would define Wigner matrices and some other important spherical harmonics identities. Finally, we would mention vector spherical harmonics and some of their properties.

(27 pages, 3 tables, 5 figures, 16 references)

Thesis deposited in Department of Physics library

Keywords: angular momentum operator/ Clebsch-Gordan coefficients/ electric potential/ Laplace`s equation/ spherical harmonics/ vector spherical harmonics/ Wigner matrices

Supervisor: doc.dr.sc. Zvonko Glumac

Reviewers:

Thesis accepted:

1. Uvod

Sferni harmonici $Y_l^m(\theta,\phi)$ predstavljaju skup ortonormiranih rješenja kutnog dijela Laplaceove diferencijalne jednadžbe u sfernim koordinatama. Imaju široku primjenu u fizici. Rješenje je električnog potencijala u elektrostatici dano Laplaceovim razvojem koji koristi svojstvo potpunosti sfernih harmonika. Sferni harmonici predstavljaju svojstvene funkcije operatora orbitalne kutne količine gibanja u kvantnoj mehanici. Od velikog su značaja adicijski teorem za sferne harmonike i integrali umnoška tri sferna harmonika jer opisuju razne efekte u elektrodinamici i kvantnoj mehanici.

2. Teorijski dio

2.1 Laplaceova diferencijalna jednadžba u sfernim koordinatama

Pogledajmo Laplaceovu diferencijalnu jednadžbu

$$\nabla^2\psi = 0 \tag{1}$$

gdje je ∇^2 Laplaceov diferencijalni operator. Jednadžbu ćemo riješiti u sfernom koordinatnom sustavu metodom separacije varijabli. Pretpostavljamo rješenje jednadžbe

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi). \tag{2}$$

Laplaceov diferencijalni operator u sfernom koordinatnom sustavu ima oblik

$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{3}$$

Koristeći (2) i (3) u (1) dobijemo

$$\frac{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]+\frac{R(r)\Phi(\phi)}{r^2\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]+\frac{R(r)\Theta(\theta)}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}=0. \tag{4}$$

Trivijalno rješenje diferencijalne jednadžbe (1) je $\psi(r,\theta,\phi)=0.$ Međutim, takvo rješenje nije fizikalno zanimljivo. Zbog toga ćemo pretpostaviti da niti jedna komponenta rješenja nije nulfunkcija. Sada smijemo pomnožiti jednadžbu (4) s izrazom $\frac{r^2 \sin^2\theta}{R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)}$. Nakon množenja jednadžba poprima oblik

$$\frac{\sin^2\theta}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]+\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]=-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}. \tag{5}$$

Lijeva strana jednadžbe (5) ovisi o r i θ, a desna o ϕ. Zbog toga obje strane moraju biti jednake konstanti koju ćemo označiti s m^2. Jednadžba za azimutalni kut ϕ glasi

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+m^2\Phi(\phi)=0. \tag{6}$$

Radijalno–zenitna jednadžba glasi

$$\frac{\sin^2\theta}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]+\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]=m^2\ /\cdot\frac{1}{\sin^2\theta}$$

$$\frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]-\frac{m^2}{\sin^2\theta}=-\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right].$$

Lijeva strana dobivene jednadžbe ovisi samo o kutu θ, a desna o r. Obje strane moraju biti jednake konstanti koju ćemo označiti s $-l(l+1)$. Time jednadžba za zenitni kut θ postaje

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta)=0 \tag{7}$$

2.1.1 Jednadžba za azimutalni kut

Jednadžba (6) ima rješenje oblika

$$\Phi_m(\phi)=Ae^{im\phi}+Be^{-im\phi},$$

gdje su A i B integracijske konstante, a i imaginarna jedinica. Vidimo da je rješenje jednadžbe svaka linearna kombinacija funkcija $e^{\pm im\phi}$. Zbog toga ćemo, bez smanjenja općenitosti, za rješenje uzeti

$$\Phi_m(\phi)=Ae^{im\phi}, \tag{8}$$

pri čemu m može biti i pozitivan i negativan broj.

Želimo da skup rješenja (8) čini ortonormiran skup na intervalu $[0,2\pi]$. Odredimo prvo konstantu normiranja A. Uvjet je normiranja proizvoljne funkcije $f(x)$ dan sljedećim uvjetom

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) f(x) dx = 1, \tag{9}$$

gdje je $f^*(x)$ kompleksno konjugirana funkcija funkcije $f(x)$. Primijenimo uvjet (9) na skup rješenja (8)

$$\int_0^{2\pi} A^* e^{-im\phi} A e^{im\phi} d\phi = 1$$

$$|A|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

$$A = \pm \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\alpha},$$

pri čemu je α proizvoljna realna konstanta. Bez smanjenja općenitosti, za konstantu normiranja ćemo uzeti

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Dobili smo normiran skup rješenja jednadžbe (6)

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \tag{10}$$

Pokažimo sada da (10) čini ortogonalan skup rješenja na intervalu $[0,2\pi]$. Prije samog dokaza ortogonalnosti, potrebno je pronaći uvjete koje mora zadovoljavati m. Naime, skup rješenja (10) ima period 2π. Iskoristimo li taj uvjet dobijemo

$$\Phi_m(\phi) = \Phi_m(\phi + 2\pi)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im(\phi+2\pi)} \quad / \cdot \sqrt{2\pi} e^{-im\phi}$$

$$1 = e^{im2\pi},$$

iz čega zaključujemo da m mora biti cijeli broj. Sada iskoristimo tu činjenicu i dokažimo ortogonalnost skupa rješenja (10):

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_1}{}^*(\phi)\ \Phi_{m_2}(\phi)\,d\phi = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m_2-m_1)\phi}\,d\phi. \tag{11}$$

Za $m_1 = m_2$, (11) je normiranje funkcije $\Phi_{m_1}(\phi)$. Međutim, ako je $m_1 \neq m_2$

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \left\{\cos\left[(m_2-m_1)\phi\right] + i\sin\left[(m_2-m_1)\phi\right]\right\} d\phi,$$

pri čemu smo koristili vezu između eksponencijalne funkcije i trigonometrijskih funkcija. Rješenje dobivenog integrala je 0. Pokazali smo da (10) čini ortonormiran skup rješenja. Uvjet je ortonormiranosti

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_1}{}^*(\phi)\ \Phi_{m_2}(\phi)\,d\phi = \delta_{m_1,m_2}, \tag{12}$$

gdje je

$$\delta_{m_1,m_2} = \begin{cases} 1 & m_1 = m_2 \\ 0 & m_1 \neq m_2 \end{cases}$$

Kronecker delta funkcija.

2.1.2 Jednadžba za zenitni kut

Jednadžba (7) je diferencijalna jednadžba pridruženih Legendreovih polinoma. Napisat ćemo ju u sljedećem obliku

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\frac{dP_l^m(\cos\theta)}{d\theta}\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]P_l^m(\cos\theta) = 0, \tag{13}$$

gdje smo funkciju $\Theta(\theta)$ napisali u obliku $P_l^m(\cos\theta)$. Rješenja zenitne jednadžbe su pridruženi Legendreovi polinomi u varijabli $\cos\theta$. Za njihovu definiciju koristimo Rodrigues'ovu formulu[1]

[1] Str. 136, jednadžba 4.27 u David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, London: Pearson Education International, 2005. (II. izdanje)

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}\left(x^2-1\right)^l. \tag{14}$$

U (14) smo koristili supstituciju $\cos\theta \to x$. Zbog toga x može poprimiti samo vrijednosti iz intervala $[-1,1]$.

U sljedećoj je tablici dano nekoliko prvih pridruženih Legendreovih polinoma.

TABLICA 2.1: Pridruženi Legendreovi polinomi, $P_l^m(x)$.

$P_0^0(x) = 1$
$P_1^0(x) = x$
$P_1^1(x) = -\left(1-x^2\right)^{\frac{1}{2}}$
$P_2^0(x) = \frac{1}{2}\left(3x^2-1\right)$
$P_2^1(x) = -3x\left(1-x^2\right)^{\frac{1}{2}}$
$P_2^2(x) = 3\left(1-x^2\right)$
$P_3^0(x) = \frac{1}{2}x\left(5x^2-3\right)$
$P_3^1(x) = \frac{3}{2}\left(1-5x^2\right)\left(1-x^2\right)^{\frac{1}{2}}$

Pridruženi Legendreovi polinomi čine ortogonalan skup funkcija. Svojstvo je ortogonalnosti[2] dano sljedećim izrazom

$$\int_{-1}^{+1} P_p^m(x) P_q^m(x)\,dx = \frac{2}{2l+1}\frac{(p+m)!}{(p-m)!}\delta_{\mathrm{p,q}}. \tag{15}$$

Koristeći (15), rješenje jednadžbe (13) možemo pomnožiti odgovarajućom konstantom kako bi dobili ortonormiran skup rješenja koji ovisi o zenitnom kutu θ. Rješenje ćemo zapisati u sljedećem obliku

[2] Str. 747, jednadžba 15.104 u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

$$\Theta_l^m(\theta)=\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta). \tag{16}$$

Legendreovi su pridruženi polinomi poopćenje Legendreovih polinoma definiranih Rodrigues'ovom formulom[3]

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l. \tag{17}$$

Koeficijent l predstavlja stupanj Legendreovog polinoma. Zaključujemo da l može poprimiti vrijednosti iz intervala $[0,+\infty)$. Rješavanjem jednadžbe za azimutalni kut ϕ dokazali smo da koeficijent m mora biti cijeli broj. Iz (14) zaključujemo

$$\begin{aligned} l+|m| &\geq 0 \\ |m| &\leq -l. \end{aligned}$$

Znamo da l ne može biti negativan broj. Koristeći tu činjenicu u dobivenom izrazu imamo

$$-|m|\geq l. \tag{18}$$

Dobivenu nejednadžbu ćemo riješiti promatrajući dva slučaja.

a) $m<0$:

$$m\leq l. \tag{19}$$

b) $m\geq 0$:

$$m\geq -l. \tag{20}$$

Iz (19) i (20) zaključujemo da m poprima vrijednosti iz intervala $[-l,l]$.

[3] Str. 136, jednadžba 4.28 u David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, London: Pearson Education International, 2005. (II. izdanje)

2.1.3 Rješenje radijalnog dijela

Separacijom smo varijabli u radijalno-zenitnoj jednadžbi za zenitni kut dobili jednadžbu (7). Koristeći istu argumentaciju kao pri rješavanju zenitne jednadžbe dobijemo

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right]=l(l+1). \tag{21}$$

Rješenje jednadžbe je[4]

$$R(r)=Ar^l+\frac{B}{r^{l+1}}, \tag{22}$$

pri čemu su A i B konstante koje određujemo iz rubnih uvjeta. Sada smo u potpunosti riješili Laplaceovu jednadžbu u sfernom koordinatnom sustavu. Iako radijalni dio nije bio nužan za uvođenje sfernih harmonika, bit će nam potreban prilikom određivanja električnog potencijala u području sferne simetrije.

2.2 Sferni harmonici

Nakon pronađenih rješenja za kutni dio Laplaceove jednadžbe u sfernim koordinama možemo definirati sferne harmonike. (10) i (16) predstavljaju dva skupa ortonormiranih funkcija: $\Phi_m(\phi)$ koje su ortonormirane u odnosu na kut ϕ i $\Theta_l^m(\cos\theta)$ koje su ortonormirane u odnosu na kut θ. Sferni harmonici se definiraju kao umnožak ova dva skupa funkcija i stoga imamo

$$Y_l^m(\theta,\phi)=\varepsilon\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta). \tag{23}$$

Parametar ε se naziva Condon–Shortleyeva faza. Ona nije nužna u samoj definiciji sfernih harmonika, međutim pojednostavljuje mnogobrojne račune u spektroskopiji i korištenje operatora kutne količine gibanja u kvantnoj mehanici. Condon–Shortleyeva se faza definira na sljedeći način[5]

---

[4] Str. 142, jednadžba 3.59 u David J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics,* London: Pearson Education International, 2013. (IV. izdanje)

[5] Str. 139 u David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics,* London: Pearson Education International, 2005. (II. izdanje)

$$\varepsilon = \begin{cases} 1, & m \leq 0 \\ (-1)^m, & m > 0. \end{cases}$$

Sferni harmonici prema svojoj definiciji čine ortonormiran skup funkcija u odnosu na varijable θ i ϕ. Na površini kugle svojstvo ortonormiranosti sfernih harmonika glasi

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \left[Y_{m_1}^{l_1}(\theta,\phi)\right]^* Y_{m_2}^{l_2}(\theta,\phi) = \delta_{l_1,l_2}\delta_{m_1,m_2}. \tag{24}$$

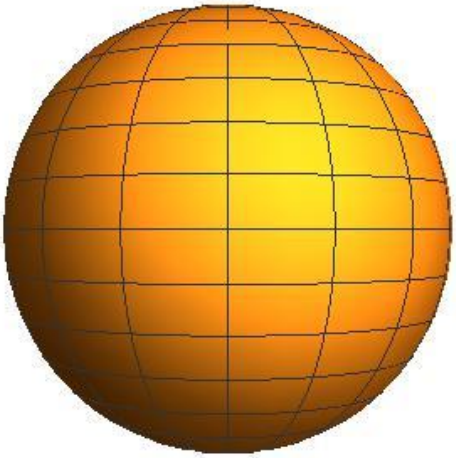
Zbog svojstva ortonormiranosti na površini kugle, često se umjesto sfernih harmonika koristi naziv kugline funkcije. U sljedećoj tablici dano je nekoliko prvih sfernih harmonika.

TABLICA 2.2: Sferni harmonici, $Y_l^m(\theta,\phi)$.

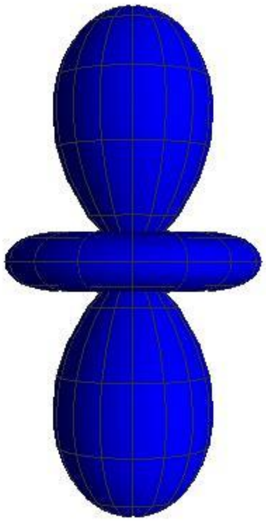
$Y_0^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
$Y_1^1(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}$
$Y_2^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right)$
$Y_2^{-1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\phi}$
$Y_3^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\left(5\cos^3\theta - 3\cos\theta\right)$
$Y_3^1(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta\left(5\cos^2\theta - 1\right)e^{i\phi}$
$Y_4^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{9}{256\pi}}\left(35\cos^4\theta - 30\cos^2\theta + 3\right)$

Sljedeće slike prikazuju nekoliko prvih najjednostavnijih sfernih harmonika.

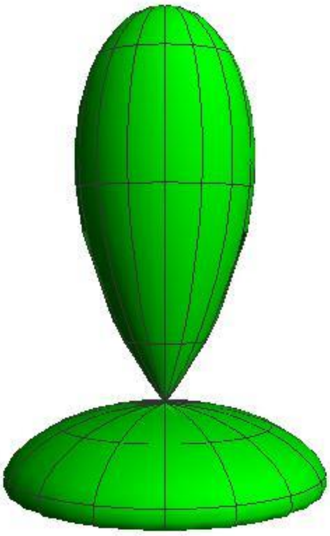
Slika 1: $Y_0^0(\theta,\phi)$.



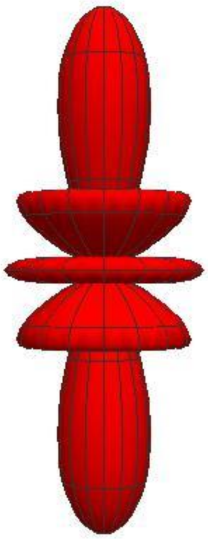
Slika 2: $Y_2^0(\theta,\phi)$.



Slika 3: $Y_3^0(\theta,\phi)$.



Slika 4: $Y_4^0(\theta,\phi)$.



2.2.1 Laplaceov razvoj

Sferni harmonici čine potpun skup funkcija zbog Sturm–Liouvilleovog oblika Laplaceove jednadžbe. Kažemo da neki skup funkcija ψ_n čini potpun skup funkcija ako se svaka (barem po dijelovima) kontinuirana funkcija $f(x)$ može aproksimirati redom funkcija ψ_n oblika

$$f(x)=\sum_{n=0}^{+\infty}a_n\psi_n(x), \tag{25}$$

gdje su a_n koeficijenti razvoja. To znači da bilo koju kontinuranu funkciju $f(\theta,\phi)$, koja poprima vrijednosti na površini sfere, možemo razviti u red po sfernim harmonicima. Ovaj razvoj je poznat kao Laplaceov razvoj i glasi

$$f(\theta,\phi)=\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{l}c_{lm}Y_l^m(\theta,\phi), \tag{26}$$

gdje su c_{lm} koeficijenti razvoja. Pri određivanju koeficijenata razvoja koristi se svojstvo ortogonalnosti sfernih harmonika čime dobijemo

$$c_{lm}=\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^*f(\theta,\phi). \tag{27}$$

Glavna primjena Laplaceovog razvoja je određivanje općeg rješenja Laplaceove jednadžbe s rubnim uvjetima na površini sfere.

Primjer 1.

Promotrimo sferu polumjera R sa središtem u ishodištu. Unutar sfere nema električnog naboja. Neka je potencijal na površini sfere $V_0=k\cos(3\theta)$. Potrebno je pronaći potencijal unutar sfere. Pri rješavanju problema koristit ćemo opće rješenje Laplaceove jednadžbe u sfernim koordinatama[6]

$$\psi(r,\theta,\phi)=\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left(a_{lm}r^l+\frac{b_{lm}}{r^{l+1}}\right)Y_l^m(\theta,\phi), \tag{28}$$

pri čemu su a_{lm} i b_{lm} koeficijenti razvoja. Rubni uvjet koji mora zadovoljavati rješenje ovog problema glasi

$$\psi(\mathrm{R},\theta,\phi)=V_0. \tag{29}$$

Potencijal na površini sfere možemo zapisati kao

[6] Str. 759, jednadžba 15.142 u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists,* San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

$$V_0 = k\left(4\cos^3\theta - 3\cos\theta\right).$$

Dobiveni izraz ćemo razviti u red po pridruženim Legendreovim polinomima u varijabli $\cos\theta$. Jednostavnim računom se pokaže da vrijedi

$$V_0 = \frac{k}{5}\left[8P_3\left(\cos\theta\right) - 3P_1\left(\cos\theta\right)\right]. \tag{30}$$

Iz samog oblika jednadžbe (28) slijedi

$$b_{lm} = 0,$$

jer potencijal mora biti konačan u svakoj točki unutar sfere pa tako i u središtu sfere; $r = 0$. Zbog simetrije očigledno je da potencijal ne smije ovisiti o azimutalnom kutu. Zbog toga je

$$\psi\left(r,\theta\right) = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l r^l P_l\left(\cos\theta\right). \tag{31}$$

Koristeći svojstvo ortogonalnosti pridruženih Legendreovih polinoma i rubni uvjet (30), za koeficijente razvoja imamo

$$a_l = \frac{2l+1}{2R^l}\int_0^\pi V_0 P_l\left(\cos\theta\right)\sin\theta d\theta$$

$$a_l = \frac{2l+1}{2R^l}\frac{k}{5}\left[8\int_0^\pi P_3\left(\cos\theta\right)P_l\left(\cos\theta\right)\sin\theta d\theta - 3\int_0^\pi P_1\left(\cos\theta\right)P_l\left(\cos\theta\right)\sin\theta d\theta\right]$$

$$a_l = \frac{2l+1}{2R^l}\frac{k}{5}\left[8\frac{2}{2l+1}\delta_{l3} - 3\frac{2}{2l+1}\delta_{l1}\right]$$

$$a_l = \begin{cases} \dfrac{8k}{5R^3}, & l = 3 \\ \dfrac{-3k}{5R}, & l = 1 \\ 0, & \text{inače.} \end{cases}$$

Time se za potencijal unutar sfere dobije

$$\psi\left(r,\theta\right) = \frac{k}{5}\left[8\left(\frac{r}{R}\right)^3 P_3\left(\cos\theta\right) - 3\left(\frac{r}{R}\right)P_1\left(\cos\theta\right)\right]. \tag{32}$$

2.3 Operator kutne količine gibanja

Problem centralnog potencijala u kvantnoj mehanici započinje rješavanjem vremenski nezavisne Schrödingerove jednadžbe koja je za problem gibanja čestice mase m u potencijalu $V\left(\vec{r}\right)$ jednadžba svojstvenih vrijednosti oblika

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\left(\vec{r}\right)+V\left(\vec{r}\right)\psi\left(\vec{r}\right)=E\psi\left(\vec{r}\right), \tag{33}$$

gdje je $\hbar$ reducirana Planckova konstanta. Svojstvene vrijednosti Schrödingerove jednadžbe predstavljaju vrijednosti energije E koje možemo izmjeriti u eksperimentu. U kvantnoj mehanici (33) možemo zapisati i kao operatorsku jednadžbu

$$\hat{H}\psi=E\psi, \tag{34}$$

gdje je $\hat{H}$ operator Hamiltonijana, odnosno ukupne energije sustava

$$\hat{H}=\hat{E}_k+\hat{V}.$$

U klasičnoj mehanici, kinetička energija čestice mase M se može zapisati preko količine gibanja čestice kao

$$E_k=\frac{p^2}{2M}.$$

Prijeđemo li u sferni koordinatni sustav, ukupna kinetička energija se može rastaviti na translacijski i rotacijski dio. U klasičnoj mehanici, rotacijski dio kinetičke energije povezan je s kutnom količinom gibanja

$$E_{k_{rot}}=\frac{L^2}{2Mr^2}.$$

U kvantnoj mehanici, opservablama iz klasične mehanike se pridružuju odgovarajući linearni hermitski operatori. Do kraja izlaganja ćemo koristiti sustav mjernih jedinica za koji vrijedi $\hbar=1$. Operator je količine gibanja

$$\hat{p}=-i\vec{\nabla}. \tag{35}$$

Dobiveni operator promatramo u sfernom koordinatnom sustavu, pa za operator kinetičke energije imamo

$$\hat{E}_k = -\frac{1}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2Mr^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]. \tag{36}$$

Usporedimo li dobiveni izraz s klasičnom definicijom kinetičke energije u sfernom koordinatnom sustavu, operator je kvadrata kutne količine gibanja[7]

$$\hat{L}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{37}$$

Zapisano na ovaj način, očigledno je da su svojstvene vrijednosti operatora kvadrata kutne količine gibanja sferni harmonici $Y_l^m(\theta,\phi)$.

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\phi) = l(l+1)Y_l^m(\theta,\phi). \tag{38}$$

Kutno rješenje Schrödingerove jednadžbe su svojstvene funkcije operatora $\hat{L}^2$. Zbog toga operatori $\hat{H}$ i $\hat{L}^2$ moraju komutirati. Kažemo da operatori $\hat{A}$ i $\hat{B}$ komutiraju ako vrijedi

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0.$$

Komutirajući operatori imaju zajednički skup svojstvenih funkcija. Lako se pokaže da vrijedi[8]

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_j\right] = 0,\ \ j = x, y, z.$$

Zaključujemo da postoji skup zajedničkih svojstvenih funkcija operatora $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_j$. Prirodno se u teoriji za komponentu operatora kutne količine gibanja uzima njegova z komponenta, $\hat{L}_z$. Sferni harmonici $Y_l^m(\theta,\phi)$ su svojstvene funkcije operatora $\hat{L}_z$ sa svojstvenim vrijednostima m

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\phi) = mY_l^m(\theta,\phi).$$

---

[7] Str. 774, jednadžba 16.6 u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists,* San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

[8] Str. 776, jednadžba 16.11 u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists,* San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

U kvantnoj mehanici se osim orbitalne kutne količine gibanja manifestira i intrinsična kutna količina gibanja ili spin $\hat{S}$. $\hat{L}$ predstavlja operator orbitalne kutne količine gibanja. U daljnjem je izlaganju operator kutne količine gibanja

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \tag{39}$$

2.3.1 Svojstva operatora kutne količine gibanja

1. $\hat{J}$ je linearan hermitski operator s komponentama $\hat{J}_x, \hat{J}_y$ i $\hat{J}_z$ takvima da vrijedi $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}^2$ i $\left[\hat{J}^2, \hat{J}_i\right] = 0,\ \ i = x, y, z.$
2. $\hat{J}^2$ i $\hat{J}_z$ imaju zajednički skup normaliziranih svojstvenih funkcija koje su u Diracovoj notaciji[9] $|\, j, m\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \,|\, j, m\rangle &= m \,|\, j, m\rangle \\ \hat{J}^2 \,|\, j, m\rangle &= j\left(j+1\right) |\, j, m\rangle. \end{aligned} \tag{40}$$

3. Kvantni broj j može poprimiti cjelobrojne ili polucjelobrojne pozitivne vrijednosti, dok za kvantni broj m vrijedi $m \in \left[-j, j\right]$.
4. Možemo definirati operatore stvaranja i poništavanja

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\,\hat{J}_y,\ \ \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\,\hat{J}_y,$$

za koje vrijedi

$$\hat{J}_\pm \,|\, j, m\rangle = \sqrt{\left(j \mp m\right)\left(j \pm m + 1\right)}\,|\, j, m \pm 1\rangle. \tag{41}$$

Dokažimo (41). U dokazu koristimo činjenicu da $\hat{J}_\pm$ i $\hat{J}_z$ ne komutiraju, a $\hat{J}^2$ i $\hat{J}_\pm$ komutiraju. Vrijedi [10]

$$\begin{aligned} \left[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\right] &= \hat{J}_z \hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm \hat{J}_z = \pm \hat{J}_\pm, \\ \left[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm\right] &= \hat{J}^2 \hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm \hat{J}^2 = 0. \end{aligned} \tag{42}$$

---

[9] Strana 84. u Nouredine Zettili, *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, West Sussex: John Wiley & Sons, 2009. (II. izdanje)

[10] Strana 286, jednadžba 5.28 u Nouredine Zettili, *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, West Sussex: John Wiley & Sons, 2009. (II. izdanje)

Koristeći (42) pokazat ćemo da $\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)$ čine skup svojstvenih funkcija operatora $\hat{J}_z$ i $\hat{J}^2$. Promotrimo prvo $\hat{J}_z$:

$$\hat{J}_z\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)=\hat{J}_{\pm}\left(\hat{J}_z|\, j,m\rangle\right)\pm\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle.$$

Iskoristimo (40) u dobivenom izrazu

$$\hat{J}_z\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)=(m\pm1)\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right). \tag{43}$$

Zaključujemo da $\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)$ čine skup svojstvenih funkcija operatora $\hat{J}_z$ sa svojstvenim vrijednostima $m\pm1$. Promotrimo sada $\hat{J}^2$:

$$\hat{J}^2\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)=\hat{J}_{\pm}\left(\hat{J}^2|\, j,m\rangle\right).$$

Ponovno iskoristimo (40)

$$\hat{J}^2\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)=j\left(j+1\right)\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right). \tag{44}$$

Zaključujemo da $\left(\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle\right)$ čine skup svojstvenih funkcija operatora $\hat{J}^2$ sa svojstvenim vrijednostima $j\left(j+1\right)$. Iz (43) i (44) slijedi da operatori stvaranja i poništavanja mijenjaju samo kvantni broj m dok kvantni broj j ostaje nepromijenjen. Zaključujemo da vrijedi

$$\hat{J}_{\pm}|\, j,m\rangle=C^{\pm}_{j,m}|\, j,m\pm1\rangle. \tag{45}$$

Odredimo sada konstantu $C^{\pm}_{j,m}$. Promatrat ćemo $C^{+}_{j,m}$, a pomoću dobivenog rezultata ćemo lako doći do $C^{-}_{j,m}$. Imamo

$$\hat{J}_{+}|\, j,m\rangle=C^{+}_{j,m}|\, j,m+1\rangle.$$

Iskoristimo činjenicu da $|\, j,m\rangle$ čine skup ortonormiranih funkcija i da vrijedi $\hat{J}_{+}{}^{\dagger}=\hat{J}_{-}$

$$\left(\hat{J}_{+} \mid j,m\rangle\right)^{\dagger}\left(\hat{J}_{+} \mid j,m\rangle\right) = \left(C^{+}_{j,m}\right)^{\dagger}\langle j,m|C^{+}_{j,m} \mid j,m\rangle$$
$$\langle j,m|\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} \mid j,m\rangle = \left|C^{+}_{j,m}\right|^{2}. \tag{46}$$

Lako se pokaže da vrijedi[11]

$$\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} = \hat{J}^{2} - \hat{J}_{z}^{2} - \hat{J}_{z}.$$

Iskoristimo gornji izraz i (40) u (46)

$$C^{+}_{j,m} = \sqrt{\langle j,m|\hat{J}^{2} - \hat{J}_{z}^{2} - \hat{J}_{z} \mid j,m\rangle}$$
$$C^{+}_{j,m} = \sqrt{\langle j,m|\left[\,j(j+1) - m^{2} - m\right]| j,m\rangle}$$
$$C^{+}_{j,m} = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}.$$

Algebarskom manipulacijom dolazimo do

$$C^{+}_{j,m} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \tag{47}$$

Na sličan način dobijemo

$$C^{-}_{j,m} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \tag{48}$$

Sada je (45)

$$\hat{J}_{\pm} \mid j,m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m+1)} \mid j,m \pm 1\rangle. \tag{49}$$

Dokazali smo da vrijedi (41). □

2.3.2 Zbrajanje kutne količine gibanja

Neka su $\hat{j}_1$ i $\hat{j}_2$ operatori kutne količine gibanja koji djeluju na dvije različite čestice. Zbog toga međusobno komutiraju kao i njihove komponente. Promatramo li dvije čestice kao jedan sustav tada je operator kutne količine gibanja sustava $\hat{J} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$, s komponentama $\hat{J}_i = \hat{j}_{1i} + \hat{j}_{2i}, \;\; i = x, y, z.$ Vrijedi

[11] Strana 287, jednadžba 5.31 u Nouredine Zettili, *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, West Sussex: John Wiley & Sons, 2009. (II. izdanje)

$$\left[\hat{J}^2, \hat{J}_i\right] = 0,\ i = x, y, z,$$
$$\left[\hat{J}^2, \hat{j}_1\right] = \left[\hat{J}^2, \hat{j}_1\right] = 0.$$

Cilj ovog izlaganja je pronaći jednadžbe koje povezuju individualne operatore kutne količine gibanja s operatorom kutne količine gibanja sustava. Svojstvene funkcije operatora $\hat{j}_1, \hat{j}_2, \hat{J}$ su redom $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle, |J, m\rangle$. Maksimalna je svojstvena vrijednost operatora $\hat{J}_z$: $M_{\max} = j_1 + j_2$. $|J, M\rangle$ razapinje svojstvene funkcije operatora $\hat{J}_z$ zbog komutacije s operatorom $\hat{J}^2$ pa se lako vidi da je $J_{\max} = M_{\max} = j_1 + j_2$. S druge strane, minimalna vrijednost kvantnog broja J iznosi[12] $J_{\min} = |j_1 - j_2|$.

Promotrimo sada dva stanja kutne količine gibanja (j_1, m_1) i (j_2, m_2) koja ćemo zbrojiti i dobiti stanje za koje vrijedi $M = j_1 + j_2$ i $J_{\max} = j_1 + j_2$. Koristit ćemo Diracovu notaciju u kojoj će gornji član prikazivati vrijednost kvantnog broja M, odnosno m, a donji će član prikazivati vrijednost kvantnog broja J, odnosno j

$$\left|\begin{matrix} J_{\max} \\ J_{\max} \end{matrix}\right\rangle = \left|\begin{matrix} j_1 \\ j_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j_2 \\ j_2 \end{matrix}\right\rangle. \tag{50}$$

Na dobivenu jednadžbu primijenimo operatore spuštanja $\hat{J}_-$, $\hat{j}_{1_-}$ i $\hat{j}_{2_-}$

$$\hat{J}_- \left|\begin{matrix} J_{\max} \\ J_{\max} \end{matrix}\right\rangle = \left(\hat{j}_{1_-} + \hat{j}_{2_-}\right)\left(\left|\begin{matrix} j_1 \\ j_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j_2 \\ j_2 \end{matrix}\right\rangle\right)$$
$$\sqrt{2J_{\max}} \left|\begin{matrix} J_{\max} - 1 \\ J_{\max} \end{matrix}\right\rangle = \sqrt{2j_1} \left|\begin{matrix} j_1 - 1 \\ j_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j_2 \\ j_2 \end{matrix}\right\rangle + \sqrt{2j_2} \left|\begin{matrix} j_1 \\ j_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j_2 - 1 \\ j_2 \end{matrix}\right\rangle.$$

Jednostavnom algebarskom manipulacijom dolazimo do

$$\left|\begin{matrix} J_{\max} - 1 \\ J_{\max} \end{matrix}\right\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{J_{\max}}} \left|\begin{matrix} j_1 - 1 \\ j_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j_2 \\ j_2 \end{matrix}\right\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{J_{\max}}} \left|\begin{matrix} j_1 \\ j_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j_2 - 1 \\ j_2 \end{matrix}\right\rangle. \tag{51}$$

[12] Str. 787 u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

Zaključujemo da svako kvantno stanje sustava možemo prikazati kao linearnu kombinaciju (m_1, m_2) stanja. Temeljni problem smo sada sveli na pronalazak koeficijenata koji povezuju (m_1, m_2) stanje s (J, M) stanjem

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j_1, j_2, J | m_1, m_2, M) | j_1, m_1; j_2, m_2\rangle, \tag{52}$$

pri čemu je

$$| j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \equiv | j_1, m_1\rangle | j_2, m_2\rangle.$$

Koeficijente povezivanja $C(j_1, j_2, J | m_1, m_2, M)$ nazivamo Clebsch-Gordanovi koeficijenti. Oni predstavljaju sljedeći skalarni produkt vektora stanja

$$C(j_1, j_2, J | m_1, m_2, M) = \langle J, \mathrm{M} | j_1, m_1; j_2, m_2\rangle. \tag{53}$$

Svi su Clebsch-Gordanovi koeficijenti realni brojevi.

2.4 Sferni tenzori

Rotacije se koordinata mogu opisati pomoću unitarnih transformacijskih 3×3 matrica. Najčešći slučaj je rotacija oko jedne od koordinatnih osi. Neka su λ, μ i ν redom kutevi rotacije oko osi x, y i z. Matrice rotacije su tada

$$R_x(\lambda) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\lambda & -\sin\lambda \\ 0 & \sin\lambda & \cos\lambda \end{pmatrix}, R_y(\mu) = \begin{pmatrix} \cos\mu & 0 & \sin\mu \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\mu & 0 & \cos\mu \end{pmatrix}, R_z(\nu) = \begin{pmatrix} \cos\nu & -\sin\nu & 0 \\ \sin\nu & \cos\nu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dobivene matrice predstavljaju tenzore ranga 2. Zbog svoje prirode, nazivaju se sferni tenzori. Želimo pronaći sferne tenzore koji transformiraju općenitije skupove objekata, a ne samo koordinate, te imaju sferne harmonike za bazu. Neka su svojstvene funkcije operatora orbitalne kutne količine gibanja $|L, M\rangle$ takve da se mogu geometrijski prikazati pomoću sfernih harmonika. Koristimo sljedeću definiciju za sferne tenzore

$$R|L, M\rangle = \sum_{M'} D^L_{M'M}(R)|L, M'\rangle. \tag{54}$$

Ako su svojstvene funkcije operatora orbitalne kutne količine gibanja upravo sferni harmonici, (54) možemo pisati u obliku

$$Y_l^m(R\Omega)=\sum_{m'}D_{m'm}^l(R)Y_l^{m'}(\Omega). \tag{55}$$

Za svaki se l, $D_{m'm}^l(R)$ može smatrati kao element kvadratne matrice dimenzije $2l+1$ pri čemu m' predstavlja red, a m stupac matrice. $D_{m'm}^l(R)$ su unitarne matrice jer opisuju transformaciju između dva ortonormirana skupa funkcija. Često se za njih upotrebljava naziv Wignerove matrice.

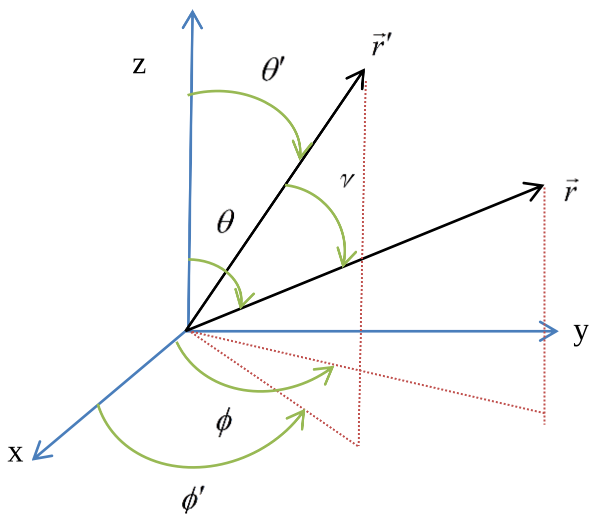
2.4.1 Adicijski teorem za sferne harmonike

Promotrimo dva radij-vektora $\vec{r}$ i $\vec{r}'$ sa sfernim koordinatama (r,θ,ϕ), odnosno (r',θ',ϕ'). Neka je γ kut između njih kao na slici 5.

Adicijski teorem povezuje Legendreov polinom $P_l(\cos\gamma)$ sa sfernim harmonicima u varijablama (θ,φ) i (θ',ϕ') na sljedeći način

$$P_l(\cos\gamma)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}\left[Y_l^m(\theta',\phi')\right]^*Y_l^m(\theta,\phi), \tag{56}$$

gdje je $\cos\gamma=\cos\theta\cos\theta'+\sin\theta\sin\theta'\cos(\phi-\phi')$.



Slika 5: Adicijski teorem za sferne harmonike.

Dokaz. Pretpostavimo da je $\vec{r}'$ fiksan u prostoru. Tada je

$$P_l(\cos\gamma) = \sum_{l'=0}^{\infty}\sum_{m=-l'}^{l'} A_{l'm}(\theta',\phi') Y_{l'}^{m}(\theta,\phi), \tag{57}$$

gdje su $A_{l'm}(\theta',\phi')$ koeficijenti razvoja. Usporedimo li jednadžbe (56) i (57) vidimo da se pojavljuju samo članovi za koje vrijedi $l' = l.$ Koristeći tu činjenicu Laplaceov razvoj funkcije $P_l(\cos\theta)$ možemo zapisati na sljedeći način

$$P_l(\cos\gamma) = \sum_{m=-l}^{l} A_m(\theta',\phi') Y_l^m(\theta,\phi). \tag{58}$$

Kako bi dobili koeficijente razvoja iskoristimo svojstvo ortogonalnosti sfernih harmonika iz čega slijedi

$$A_m(\theta',\phi') = \int \left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^* P_l(\cos\gamma)\, d\Omega. \tag{59}$$

Dobiveni integral je vrlo težak za egzaktno računanje. Zbog toga ćemo njegovom rješavanju pristupiti na sljedeći način. Zarotiramo koordinatni sustav tako da radij-vektor $\vec{r}'$ leži uzduž osi z. Na taj način γ postaje zenitni kut radij-vektora $\vec{r}$. Neka je β azimutalni kut radij-vektora $\vec{r}$ u novom koordinatnom sustavu. Kutevi θ i ϕ su funkcije kuteva γ i β pa možemo pisati sljedeći Laplaceov razvoj

$$\left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^* = \sum_{m'=-l}^{l} a_{mm'} Y_l^{m'}(\gamma,\beta). \tag{60}$$

Koeficijente razvoja $a_{mm'}$ određujemo pomoću svojstva ortogonalnosti sfernih harmonika

$$a_{mm'} = \int \left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^* \left[Y_l^{m'}(\gamma,\beta)\right]^* d\Omega_\gamma,$$

gdje je $d\Omega_\gamma$ infinitezimalni element prostornog kuta u zakrenutom koordinatnom sustavu. Bez smanjenja općenitosti pretpostavimo da vrijedi $m' = 0$. Koristimo[13]

$$Y_l^0(\gamma,\beta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\gamma),$$

[13] Str. 109, jednadžba 3.57 u John David Jackson, *Classical Electrodynamics*, Hoboken: John Wiley & Sons, 1999. (III. izdanje)

čime za koeficijent razvoja a_{m0} dobijemo

$$a_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int \left[Y_l^m(\theta,\phi) \right]^* P_l(\cos\gamma)\, d\Omega_\gamma .$$

Međutim, infinitezimalni element prostornog kuta je invarijantan prema rotaciji koordinatnog sustava, $d\Omega_\gamma = d\Omega$

$$a_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \int P_l(\cos\gamma) \left[Y_l^m(\theta,\phi) \right]^* d\Omega. \tag{61}$$

Usporedimo li (61) s (59) zaključujemo

$$a_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} A_m(\theta',\phi'). \tag{62}$$

Ako se sada vratimo u (60) i pustimo da γ teži u nulu, od sume preostane samo član s $m' = 0$

$$\lim_{\gamma\to 0} \left[Y_l^m(\theta,\phi) \right]^* = a_{m0} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}.$$

U danom limesu radij-vektori se poklapaju

$$\left[Y_l^m(\theta',\phi') \right]^* = \frac{2l+1}{4\pi} A_m.$$

Vraćanjem dobivenog izraza u (58) dobijemo

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} \left[Y_l^m(\theta',\phi') \right]^* Y_l^m(\theta,\phi),$$

čime je adicijski teorem za sferne harmonike dokazan. □

2.4.2 Laplaceov razvoj sfernih harmonika

Neka su $\vec{r}_1$ i $\vec{r}_2$ radij-vektori iz zajedničkog ishodišta te neka je χ kut između njih. Tada vrijedi razvoj[14]

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos\chi), \tag{63}$$

[14] Str. 799. u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists,* San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

pri čemu su $r_> / r_<$ većeg / manjeg iznosa od r_1 i r_2. Ako sada iskoristimo adicijski teorem, dobijemo Laplaceov razvoj sfernih harmonika

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r^l_<}{r^{l+1}_>} \sum_{m=-l}^{l} \left[Y_l^m(\Omega_1) \right]^* Y_l^m(\Omega_2). \tag{64}$$

Primjer 2: Multipolni razvoj

Neka je dan skup točkastih naboja q_i s radij-vektorima $\vec{r}_i$. Svi se nalaze unutar sfere polumjera a s ishodištem u središtu sfernog koordinatnog sustava. Želimo izračunati elektrostatski potencijal u točkama izvan sfere $(r > a)$. Koristimo Laplaceov razvoj sfernih harmonika

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_i q_i \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r^l_i}{r^{l+1}} \sum_{m=-l}^{l} \left[Y_l^m(\theta_i, \phi_i) \right]^* Y_l^m(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{l} \frac{4\pi}{2l+1} \left\{ \sum_i q_i r_i^l \left[Y_l^m(\theta_i, \phi_i) \right]^* \right\} \frac{Y_l^m(\theta, \phi)}{r^{l+1}}. \end{aligned} \tag{65}$$

Cjelokupni učinak naboja q_i se može sažeti u sljedeći izraz

$$M_l^m = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_i q_i r_i^l \left[Y_l^m(\theta_i, \phi_i) \right]^*, \tag{66}$$

pa je multipolni razvoj potencijala

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{l} M_l^m \frac{Y_l^m(\theta, \phi)}{r^{l+1}}. \tag{67}$$

M_l^m predstavljaju multipolne momente raspodjele naboja. Jednadžba (65) je zadovoljena pri diskretnoj raspodjeli naboja. Poopćenje na kontinuiranu raspodjelu naboja glasi

$$M_l^m = \frac{4\pi}{2l+1} \iiint \rho(\vec{r}\,')(r')^{l+2} \left[Y_l^m(\theta', \phi') \right]^* \sin\theta' dr' d\theta' d\phi', \tag{68}$$

pri čemu je $\rho(\vec{r}\,')$ volumna gustoća naboja. U sljedećoj je tablici dano nekoliko prvih multipolnih momenata u pravokutnom koordinatnom sustavu.

TABLICA 2.3: Multipolni momenti raspodjele, M_l^m.

$M_0^0 = \sqrt{4\pi}$
$M_1^1 = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(x+iy\right)$
$M_1^0 = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}z$
$M_1^{-1} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(x-iy\right)$
$M_2^0 = \sqrt{\frac{4\pi}{5}}\left(\frac{2z^2-x^2-y^2}{2}\right)$

2.4.3 Integrali umnoška tri sferna harmonika

Integrali umnoška tri sferna harmonika se koriste u računanju elemenata matrice operatora koji ovise o sfernim kutevima te se mogu prikazati pomoću sfernih harmonika. Promatramo tri operatora s jednakim argumentima. Kako bi došli do traženog identiteta potrebno je pronaći Wignerove matrice $D^l_{m'm}$. Prvo ćemo izračunati $D^l_{m0}\left(R\right)$ koristeći adicijski teorem za sferne harmonike

$$P_l\left(\cos\zeta\right) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_m\left[Y_l^m\left(\theta_1,\phi_1\right)\right]^* Y_l^m\left(\theta_2,\phi_2\right),$$

gdje je ζ kut između smjerova $\left(\theta_1,\phi_1\right)$ i $\left(\theta_2,\phi_2\right)$. Kao što smo pokazali ranije prilikom izvođenja adicijskog teorema

$$P_l\left(\cos\zeta\right) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_l^0\left(\zeta,0\right),$$

iz čega slijedi

$$Y_l^0\left(\zeta,0\right) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\sum_m Y_l^m\left(\theta_1,\phi_1\right)\left[Y_l^m\left(\theta_2,\phi_2\right)\right]^*. \tag{69}$$

Zapišemo $\left(55\right)$ u obliku

$$Y_l^0\left(R\Omega_2\right)=\sum_m D_{m0}^l\left(R\right)Y_l^m\left(\Omega_2\right). \tag{70}$$

Neka je R operator kojim se smjer Ω_1 zarotira u $\Omega.$ Tada je $R\Omega_2=\left(\zeta,0\right).$ Za azimutalni kut možemo uzeti vrijednost nula jer $Y_l^0\left(R\Omega_2\right)$ ne ovisi o njemu. Usporedbom jednadžbi $\left(69\right)$ i $\left(70\right)$

$$D_{m0}^l\left(R\right)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\left[Y_l^m\left(\Omega_1\right)\right]^*. \tag{71}$$

Iskoristimo inverz jednadžbe $\left(53\right)$

$$Y_{l_1}^0\left(\Omega_1\right)Y_{l_2}^0\left(\Omega_2\right)=\sum_L C\left(l_1,l_2,L\middle|0,0,0\right)\left|L,0\right\rangle, \tag{72}$$

pri čemu su $m_1=m_2=0,$ a $\left|J,M\right\rangle$ stanje je $\left|L,0\right\rangle.$ Primijenimo R na $\left(72\right)$ koristeći $\left(54\right)$ i $\left(55\right)$

$$\sum_{m_1m_2} D_{m_10}^{l_1}\left(R\right)D_{m_20}^{l_2}\left(R\right)Y_{l_1}^{m_1}\left(\Omega_1\right)Y_{l_2}^{m_2}\left(\Omega_2\right)=\sum_{L,\sigma} C\left(l_1,l_2,L\middle|0,0,0\right)D_{\sigma0}^L\left(R\right)\left|L,\sigma\right\rangle. \tag{73}$$

Kako bi se prebacili iz stanja $\left|L,\sigma\right\rangle$ u m_1,m_2 bazu iskoristimo $\left(52\right)$

$$\begin{aligned}\sum_{m_1m_2} D_{m_10}^{l_1}\left(R\right)D_{m_20}^{l_2}\left(R\right)Y_{l_1}^{m_1}\left(\Omega_1\right)Y_{l_2}^{m_2}\left(\Omega_2\right)&=\sum_{L,\sigma} C\left(l_1,l_2,L\middle|0,0,0\right)D_{\sigma0}^L\left(R\right)\\ \times\sum_{m_1m_2} C\left(l_1,l_2,L\middle|m_1,m_2,\sigma\right)Y_{l_1}^{m_1}\left(\Omega_1\right)Y_{l_2}^{m_2}\left(\Omega_2\right).\end{aligned} \tag{74}$$

Dobiveni skup jednadžbi mora biti zadovoljen za sve vrijednosti Ω_1 i $\Omega_2.$ To će biti zadovoljeno jedino ako su obje strane jednadžbi jednake za svaki skup vrijednosti m_1 i m_2. Time dolazimo do jednostavnijeg skupa jednadžbi,

$$D_{m_10}^{l_1}\left(R\right)D_{m_20}^{l_2}\left(R\right)=\sum_{L,\sigma} C\left(l_1,l_2,L\middle|0,0,0\right)C\left(l_1,l_2,L\middle|m_1,m_2,\sigma\right)D_{\sigma0}^L\left(R\right), \tag{75}$$

pri čemu je svaka jednadžba zadovoljena za sve vrijednosti slobodnih indeksa. Iskoristimo li $\left(71\right)$ u $\left(75\right)$.

$$\frac{4\pi}{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}\left[Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)\right]^*\left[Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)\right]^* =$$

$$\sum_{L,\sigma} C(l_1,l_2,L|0,0,0)\,C(l_1,l_2,L|m_1,m_2,\sigma)\sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}}\left[Y_L^{\sigma}(\Omega)\right]^*.$$

Pošto su jedino sferni harmonici u prethodnoj jednadžbi kompleksne veličine, kompleksnim konjugiranjem cijele jednadžbe rješavamo se kompleksno konjugiranih veličina. Iz oblika jednadžbe se lako zaključuje da je jedina dopuštena vrijednost slobodnog indeksa $\sigma = m_1 + m_2$. Jednostavnim algebarskim računom dolazimo do

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega)Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) = \sum_{L}\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}}C(l_1,l_2,L|0,0,0)\,C(l_1,l_2,L|m_1,m_2,m_1+m_2)\,Y_L^{m_1+m_2}(\Omega). \quad (76)$$

Pomnožimo obje strane jednadžbe (76) s $\left[Y_{l_3}^{m_3}(\Omega)\right]^*$ i prointegriramo po prostornom kutu

$$\begin{aligned}\left\langle Y_{l_3}^{m_3}\middle|Y_{l_1}^{m_1}\middle|Y_{l_2}^{m_2}\right\rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\left[Y_{l_3}^{m_3}(\theta,\phi)\right]^* Y_{l_1}^{m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\phi) \\ &= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)}}C(l_1,l_2,l_3|0,0,0)\,C(l_1,l_2,l_3|m_1,m_2,m_3).\end{aligned} \quad (77)$$

Time smo dobili integral umnoška tri sferna harmonika. Integral će imati vrijednost različitu od nule samo ako su sljedeća tri svojstva zadovoljena[15]:

- $|l_1 - l_2| \le l_3 \le l_1 + l_2$,
- $m_3 = m_1 + m_2$,
- $l_1 + l_2 + l_3$ je paran broj.

2.5 Vektorski sferni harmonici

Promotrimo vektore u 3-dimenzionalnom prostoru oblika $\vec{u} = u_x\vec{e}_x + u_y\vec{e}_y + u_z\vec{e}_z.$ Komponente vektora su kompleksni brojevi. Pretpostavimo da su svi vektori $\vec{u}$ jedinične duljine. Tada oni postaju sferni tenzori ranga 1. Uvedimo operatore $\hat{K}_i,\ i = 1,2,3,$ pomoću sljedećih matrica

---

[15] Str. 806. u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists,* San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

$$K_1=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\quad K_2=\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\-i&0&0\end{pmatrix},\quad K_3=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}. \tag{78}$$

Lako se pokaže da operatori zadovoljavaju komutacijska svojstva operatora kutne količine gibanja. Dijagonalizacijom matrice operatora $\hat{K}_3$ dobijemo njegove svojstvene vektore

$$\vec{e}_1=\begin{pmatrix}-\sqrt{2}\\-\frac{i}{\sqrt{2}}\\0\end{pmatrix},\quad \vec{e}_0=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\quad \vec{e}_{-1}=\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\-\frac{i}{\sqrt{2}}\\0\end{pmatrix}, \tag{79}$$

kojima odgovaraju svojstvene vrijednosti $1,0,-1$. Vektorski sferni harmonici se definiraju kao veličine koje dobijemo zbrajanjem sfernih harmonika i vektora $\vec{e}_m$ kako bi dobili stanje određenog kvantnog broja J. U literaturi se vektorski sferni harmonici označavaju s tri indeksa: J,L i M. Koristeći (52) imamo

$$Y_{JLM}(\theta,\phi)=\sum_{mm'}C\left(L,1,J\,|mm'M\right)Y_L^m(\theta,\phi)\vec{e}_{m'}, \tag{80}$$

pri čemu su $\vec{e}_{m'}$ svojstvene funkcije (79). Clebsch-Gordanovi koeficijenti opisuju unitarnu transformaciju zbog čega vrijedi

$$\int \vec{Y}_{JLM}(\theta,\phi)\vec{Y}_{J'L'M'}(\theta,\phi)\,d\Omega=\delta_{JJ'}\delta_{LL'}\delta_{MM'}. \tag{81}$$

Nadalje

$$Y_L^m(\theta,\phi)\vec{e}_{m'}=\sum_{JM}C\left(L,1,J\,|mm'M\right)\vec{Y}_{JLM}. \tag{82}$$

Temeljni je identitet u teoriji vektorskih sfernih harmonika

$$\vec{e}_r Y_L^M(\theta,\phi)=-\left[\frac{L+1}{2L+1}\right]^{\frac{1}{2}}\vec{Y}_{L,L+1,M}+\left[\frac{L}{2L+1}\right]^{\frac{1}{2}}\vec{Y}_{L,L-1,M}. \tag{83}$$

Temeljni identiteti povezani s vektorskom analizom vektorskih sfernih harmonika su[16]:

[16] Str. 812 u George B. Arfken, Hans J. Weber & Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, San Diego: Academic Press, 2012. (VII. izdanje)

- $\vec{\nabla}\cdot\left[f(r)\vec{Y}_{L,L+1,M}(\theta,\phi)\right]=-\left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df(r)}{dr}+\frac{L+2}{r}f(r)\right]Y_L^M(\theta,\phi),$
- $\vec{\nabla}\cdot\left[f(r)\vec{Y}_{L,L-1,M}(\theta,\phi)\right]=\left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df(r)}{dr}-\frac{L-1}{r}f(r)\right]Y_L^M(\theta,\phi),$
- $\vec{\nabla}\cdot\left[f(r)\vec{Y}_{L,L,M}(\theta,\phi)\right]=0,$
- $\vec{\nabla}\times\left[f(r)\vec{Y}_{L,L+1,M}(\theta,\phi)\right]=i\left(\frac{L}{2L+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df(r)}{dr}+\frac{L+2}{r}f(r)\right]\vec{Y}_{L,L,M}(\theta,\phi),$
- $\vec{\nabla}\times\left[f(r)\vec{Y}_{L,L,M}(\theta,\phi)\right]=i\left(\frac{L}{2L+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df(r)}{dr}-\frac{L}{r}f(r)\right]\vec{Y}_{L,L+1,M}(\theta,\phi)+$
  $i\left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df(r)}{dr}+\frac{L+1}{r}f(r)\right]\vec{Y}_{L,L-1,M}(\theta,\phi),$
- $\vec{\nabla}\times\left[f(r)\vec{Y}_{L,L-1,M}(\theta,\phi)\right]=i\left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{df(r)}{dr}-\frac{L-1}{r}f(r)\right]\vec{Y}_{L,L,M}(\theta,\phi).$

Gornje relacije igraju važnu ulogu u parcijalnom valnom razvoju klasične i kvantne elektrodinamike. Kao što smo vidjeli, vektorski sferni harmonici se dobiju zbrajanjem L vrijednosti operatora orbitalne kutne količine gibanja i jedne vrijednosti operatora spina. Napomenimo da zbrajanjem L vrijednosti operatora orbitalne kutne količine gibanja s dvije vrijednosti operatora spina dobijemo tenzorske sferne harmonike koji su od temeljnog značenja u teoriji gravitacijskog zračenja.

3. Literatura

1. Arfken, G.B., Weber, H.J., Harris, F.E., *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide,* San Diego: Academic Press, 2012., VII. izdanje
2. Glumac, Z., *Matematičke metode fizike: kratak uvod,* book-website.com, 2007.
3. Griffiths, D.J., *Introduction to Electrodynamics*, London: Pearson Education International, 2013., IV. izdanje
4. Griffiths, D.J., *Introduction to Quantum Mechanics*, London: Pearson Education International, 2005., II. izdanje
5. Jackson, J.D., *Classical Electrodynamics,* Hoboken: John Wiley & Sons, 1999., III. izdanje
6. Young, P., *Helmholtz's and Laplace's Equations in Spherical Polar Coordinates: Spherical Harmonics and Spherical Bessel Functions,* 2009., URL: http://physics.ucsc.edu/~peter/116C/helm_sp.pdf
7. Zettili, N., *Quantum Mechanics: Concepts and Applications,* West Sussex: John Wiley & Sons, 2009., II. izdanje

4. Životopis

Mateo Topalović rođen je 23.04.1995. u Našicama, RH. Pohađao je Srednju školu Isidora Kršnjavoga u Našicama. Srednju školu je završio 2014. godine kada upisuje preddiplomski studij fizike na Odjelu za fiziku, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, gdje trenutno studira.