

Kapitola 10

Souřadnicová, hybnostní a sférická reprezentace

Souřadnicová reprezentace

Pod pojmem souřadnicová (resp. x) reprezentace se myslí vyjádření stavů a pozorovatelných v bázi zobecněných vlastních vektorů operátoru polohy $|\vec{x}\rangle$. Ty splňují vztahy

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} | \hat{X}_j | \phi \rangle &= x_j \langle \vec{x} | \phi \rangle \quad \left(\text{resp.} \quad \hat{X}_j | \vec{x} \rangle = x_j | \vec{x} \rangle \right), \\ \langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle &= \delta(\vec{x}' - \vec{x}), \\ \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | &= \hat{I},\end{aligned}\tag{10.1}$$

které jsou analogiemi rovnice na vlastní vektory, relací ortogonalit a relací úplnosti pro pozorovatelné s čistě bodovým spektrem. S použitím (10.1) stav $|\psi\rangle$ do x reprezentace rozepíšeme způsobem

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \underbrace{\langle \vec{x} | \psi \rangle}_{\psi(\vec{x})} | \vec{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \psi(\vec{x}) | \vec{x} \rangle,$$

tj. identifikujeme vlnovou funkci $\psi(\vec{x})$ s "Fourierovým koeficientem" $\langle \vec{x} | \psi \rangle$. To je v souladu s Bornovou interpretací vlnové funkce, protože $\langle \vec{x} | \psi \rangle$ má význam amplitudy pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu $|\psi\rangle$ v bodě $\vec{x}$.

Pozorovatelné (případně i jiné operátory) rozepíšeme v x reprezentaci analogickým postupem

$$\hat{A} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \, \langle \vec{x}' | \underbrace{\hat{A} | \vec{x} \rangle}_{A(\vec{x}', \vec{x})} | \vec{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \, A(\vec{x}', \vec{x}) | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x} |.\tag{10.2}$$

Výhodou x reprezentace je, že pozorovatelné běžně používané v nerelativistické kvantové mechanice jsou lokální. Takové operátory jsou v x reprezentaci diagonální, tj. jejich maticové elementy jsou úměrné $\delta(\vec{x}' - \vec{x})$. Pro operátor polohy zjevně platí

$$\langle \vec{x}' | \hat{X}_j | \vec{x} \rangle = x_j \delta(\vec{x}' - \vec{x}).$$

Podobný výsledek dostaneme i pro každou funkci polohy, tj. i pro (lokální) potenciál $\hat{V} = V(\vec{X})$

$$\langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{x} \rangle = V(\vec{x}) \delta(\vec{x}' - \vec{x}).$$

Díky δ -funkci pro brakety $\hat{V}$ platí

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{V} | \phi \rangle &= \langle \psi | \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' |\vec{x}' \rangle \langle \vec{x}'| \right) \hat{V} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x |\vec{x} \rangle \langle \vec{x}| \right) | \phi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \langle \psi | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \bar{\psi}(\vec{x}) V(\vec{x}) \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \phi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \bar{\psi}(\vec{x}) V(\vec{x}) \phi(\vec{x}). \end{aligned}$$

U operátoru hybnosti víme, jak působí na vlnové funkce

$$\hat{P}_j \psi(\vec{x}) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}.$$

To odpovídá maticovým elementům

$$\langle \vec{x}' | \hat{P}_j | \vec{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 y \delta(\vec{x}' - \vec{y}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \delta(\vec{y} - \vec{x}) = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right).$$

Složky operátoru hybnosti jsou v x reprezentaci diagonální, a stejně to platí i pro kinetickou energii

$$\langle \vec{x}' | \frac{\hat{P}^2}{2M} | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \right).$$

Hamiltonián $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(\vec{X})$ je také diagonální

$$\langle \vec{x}' | \hat{H} | \vec{x} \rangle = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\vec{x}) \right).$$

Rovnice na vlastní čísla hamiltoniánu

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle,$$

přejde v x reprezentaci na parciální diferenciální rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}).$$

Hybnostní reprezentace

V hybnostní (resp. p , nebo impulsová) reprezentaci pracujeme v bázi zobecněných vlastních vektorů hybnosti $|\vec{p}\rangle$, opět normovaných k δ -funkci, tj, kety splňují

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{P}_j | \phi \rangle &= p_j \langle \vec{p}' | \phi \rangle \quad \left(\text{resp.} \quad \hat{P}_j | \vec{p} \rangle = p_j | \vec{p} \rangle \right), \\ \langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle &= \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \\ \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \, |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| &= \hat{I}.\end{aligned}\tag{10.3}$$

Vlnové funkce zobecněných vlastních vektorů hybnosti v x reprezentaci jsou rovinné vlny

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.\tag{10.4}$$

Stav $|\psi\rangle$ rozepíšeme pomocí (10.3) ve tvaru

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \, \underbrace{\langle \vec{p} | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(\vec{p})} |\vec{p}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \, \tilde{\psi}(\vec{p}) |\vec{p}\rangle,$$

kde $\tilde{\psi}(\vec{p})$ je vlnová funkce v p reprezentaci. Má význam amplitudy pravděpodobnosti naměření hybnosti rovné $\vec{p}$. Přejít mezi vlnovou funkcí v x a p reprezentaci je dán Fourierovu transformací

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \, \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) \equiv (\mathcal{F}\psi)(\vec{p}).$$

V opačném směru se jedná o inverzní Fourierovu transformaci

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \, \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}) \equiv (\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi})(\vec{x}).$$

Operátory můžeme v p reprezentaci rozepsat podobným způsobem jako (10.2)

$$\hat{A} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \, \langle \vec{p}' | \underbrace{\langle \vec{p}' | \hat{A} | \vec{p} \rangle}_{\tilde{A}(\vec{p}', \vec{p})} |\vec{p}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \, \tilde{A}(\vec{p}', \vec{p}) |\vec{p}'\rangle \langle \vec{p}|.$$

Vztah mezi maticovými elementy operátoru v x a p reprezentaci je

$$\begin{aligned}\tilde{A}(\vec{p}', \vec{p}) &= \langle \vec{p}' | \hat{A} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \, |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| \right) \hat{A} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \, |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \right) | \vec{p} \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \, \langle \vec{p}' | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \hat{A} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'} \hat{A}(\vec{x}', \vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.\end{aligned}$$

Operátor hybnosti má v p reprezentaci jednoduchý tvar, protože jeho maticové elementy jsou diagonální

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{P}_j | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \\ &= p_j \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p}' - \vec{p})} = p_j \delta(\vec{p}' - \vec{p}),\end{aligned}$$

což můžeme zapsat alternativně působením na vlnovou funkci v p reprezentaci

$$\hat{P}_j \tilde{\psi}(\vec{p}) = p_j \tilde{\psi}(\vec{p}).$$

Toho jsme využili např. při řešení Schrödingerovy rovnice pro volnou částici, která v p reprezentaci přejde v obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu

$$\hat{H} \tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{p^2}{2M} \tilde{\psi}(\vec{p}) = i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t}.$$

Z operátoru polohy se v p reprezentaci stane derivace podle složek $\vec{p}$, protože pro maticové elementy nalezneme

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{X}_j | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) x_j e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x x_j e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p}' - \vec{p})} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p}' - \vec{p})} \right) \\ &= \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \right).\end{aligned}$$

Působení na vlnovou funkci v p reprezentaci je potom

$$\hat{X}_j \tilde{\psi}(\vec{p}) = i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial p_j}.$$

Operátor potenciální energie v p reprezentaci diagonální obecně není, jeho maticové elementy jsou

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}' | \hat{V} | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}'} \delta(\vec{x}' - \vec{x}) V(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p}' - \vec{p})} V(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \tilde{V}(\vec{p}' - \vec{p}).\end{aligned}$$

Sférická souřadnicová reprezentace

Často je výhodné pracovat ve sférických souřadnicích místo v kartézských (zejména když řešíme bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro částici ve sféricky symetrickém potenciálu). Vyjádříme polohový vektor ve sférických souřadnicích

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \theta \cos \varphi, \\x_2 &= r \sin \theta \sin \varphi, \\x_3 &= r \cos \theta,\end{aligned}$$

a přeznačíme zobecněné vlastní vektory polohy $|\vec{x}\rangle = |r\theta\varphi\rangle$ (r, θ a φ budou vždy značit sférické souřadnice vektoru $\vec{x}$). Pro tyto kety pak platí relace

$$\begin{aligned}\langle r'\theta'\varphi' | r\theta\varphi \rangle &= \frac{1}{r^2} \delta(r' - r) \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi), \\ \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |r, \theta, \varphi\rangle \langle r, \theta, \varphi| &= \hat{I}.\end{aligned}$$

Rozkladem stavu $|\psi\rangle$ do $|r\theta\varphi\rangle$ je vlnová funkce ve sférických souřadnicích

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \langle r\theta\varphi | \psi \rangle.$$

Hilbertův prostor $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ lze rozložit na tenzorový součin

$$\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_\Omega,$$

kde $\mathcal{H}_r$ je prostor kvadraticky integrabilních funkcí na polopřímce

$$\mathcal{H}_r = L^2(\langle 0, \infty \rangle, r^2 dr),$$

a $\mathcal{H}_\Omega$ je prostor kvadraticky integrabilních funkcí na jednotkové kouli

$$\mathcal{H}_\Omega = L^2(\langle 0, \pi \rangle \times \langle 0, 2\pi \rangle, \sin \theta d\theta d\varphi).$$

V prostoru $\mathcal{H}_\Omega$ známe ortonormální bázi tvořenou společnými vlastními vektory $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |lm\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle, \\ \hat{L}_3 |lm\rangle &= m\hbar |lm\rangle,\end{aligned}$$

kterým ve sférických souřadnicích odpovídají kulové funkce

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta\varphi | lm \rangle.$$

Z rozkladu jednotky v $\mathcal{H}_\Omega$

$$\sum_{l,m} |lm\rangle \langle lm| = \hat{I}_\Omega,$$

plyne identita

$$\sum_{l,m} \bar{Y}_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi).$$

Rozšířením o $|r\rangle$ dostaneme bázi $\mathcal{H}$ tvořenou zobecněnými společnými vlastními vektory $\hat{r}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$, pro které platí

$$\langle r'l'm' | rlm \rangle = \frac{1}{r^2} \delta(r' - r) \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (10.5)$$

$$\int_0^\infty r^2 dr \sum_{l,m} |rlm\rangle \langle rlm| = \hat{I}. \quad (10.6)$$

Pro skalární součin ketů $|rlm\rangle$ a $|\vec{x}'\rangle$ dostaneme

$$\langle \vec{x}' | rlm \rangle = \langle r'\theta'\varphi' | rlm \rangle = \frac{1}{r^2} \delta(r' - r) Y_{lm}(\theta', \varphi').$$

Odtud plynou převodní vztahy mezi $|\vec{x}\rangle = |r\theta\varphi\rangle$ a $|rlm\rangle$

$$\begin{aligned} |rlm\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \langle \vec{x}' | rlm \rangle |\vec{x}'\rangle = \int_0^\infty r'^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \langle r'\theta'\varphi' | rlm \rangle |r'\theta'\varphi'\rangle \\ &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' Y_{lm}(\theta', \varphi') |r\theta'\varphi'\rangle. \end{aligned}$$

Inverzní vztah má díky (10.6) tvar

$$|\vec{x}\rangle = \int_0^\infty r'^2 dr' \sum_{l,m} \langle r'lm | r\theta\varphi \rangle |r'lm\rangle = \sum_{l,m} \bar{Y}_{lm}(\theta, \varphi) |rlm\rangle.$$

Uvažujme nyní bezčasovou Schrödingerovu rovnici se sféricky symetrickým potenciálem $V(r)$. Hamiltonián je tedy skalár, má společné vlastní vektory s $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$. Označme je jako kety $|Elm\rangle$, ve sférických souřadnicích jim odpovídají funkce

$$R_{El}(r) Y_{lm}(\theta\varphi) = \langle r\theta\varphi | Elm \rangle.$$

Rovnici na vlastní čísla vynásobíme zleva $\langle r'l'm' |$

$$\langle r'l'm' | \hat{H} | Elm \rangle = E \langle r'l'm' | Elm \rangle = E R_{El}(r') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (10.7)$$

a levou stranu upravíme s použitím (10.6) do tvaru

$$\begin{aligned}
\langle r'l'm'|\hat{H}|Elm\rangle &= \langle r'l'm'|\hat{H}\left(\int_0^\infty r^2 dr \sum_{L,M} |rLM\rangle\langle rLM|\right)|Elm\rangle \\
&= \int_0^\infty r^2 dr \sum_{L,M} \underbrace{\langle r'l'm'|\hat{H}|rLM\rangle}_{H_{l'l'}(r',r)\delta_{l'l'}\delta_{m'm}} \underbrace{\langle rLM|Elm\rangle}_{R_{El}(r)\delta_{Ll}\delta_{Mm}} \\
&= \int_0^\infty r^2 dr H_l(r',r)R_{El}(r)\delta_{ll'}\delta_{mm'}.
\end{aligned}$$

Dosazením do rovnice (10.7) dostaneme

$$\int_0^\infty r^2 dr H_l(r',r)R_{El}(r) = ER_{El}(r'). \quad (10.8)$$

Určíme maticové elementy hamiltoniánu, který má ve sférických souřadnicích tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{P}^2 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2Mr^2}\hat{L}^2 + V(r).$$

S použitím (10.5) nalezneme

$$\langle r'lm|\hat{H}|rlm\rangle = H_l(r',r) = \frac{1}{r^2}\delta(r'-r)\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right].$$

Dosazením do (10.8) pak dostaneme diferenciální rovnici pro radiální funkci $R_{El}(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r)\right]R_{El}(r) = ER_{El}(r), \quad (10.9)$$

kterou jsme minulý semestr řešili např. pro izotropní oscilátor nebo částici v coulombickém poli. Připomeňme, že radiální funkce $R_{El}(r)$ musí být omezená (pro vázané i rozptylové stavy). V okolí nuly se musí chovat jako

$$R_{El}(r) \sim r^l, \quad r \ll 1.$$

Asymptotické chování pro $r \rightarrow \infty$ závisí na tvaru potenciálu.

Podívejme se na bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro volnou částici. Víme, že spektrum hamiltoniánu je čistě spojité a odpovídá intervalu $\langle 0, \infty \rangle$. V kartézských souřadnicích se za zobecněné vlastní funkce hamiltoniánu volí společné vlastní funkce s hybností, tj. rovinné vlny (10.4), pro které platí

$$\hat{P}_j\psi_{\vec{p}} = p_j\psi_{\vec{p}}, \quad \hat{H}\psi_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2M}\psi_{\vec{p}}.$$

Můžeme ale také hledat společné zobecněné vlastní funkce s momentem hybnosti. K tomu využijeme rovnici pro radiální funkci (10.9). Zavedeme vlnový vektor $\vec{k} = \frac{1}{\hbar}\vec{p}$ a přeznačíme $R_{El(r)}$ na $R_{kl}(r)$, pak z (10.9) dostaneme

$$\left[\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{kl}(r) = 0.$$

Rovnici vydělíme k^2 a uděláme substituci $kr = z$, $R_{kl}(r) \equiv \mathcal{R}_l(z)$, výsledná rovnice bude mít tvar (čárka značí derivaci podle z)

$$\mathcal{R}_l''(z) + \frac{2}{z}\mathcal{R}_l'(z) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \mathcal{R}_l(z) = 0. \quad (10.10)$$

Toto je tzv. sférická Besselova rovnice. Její obecné řešení má tvar lineární kombinace sférické Besselovy funkce $j_l(z)$ a sférické Neumannovy funkce $n_l(z)$

$$\mathcal{R}_l(z) = a_l j_l(z) + b_l n_l(z),$$

které jsou definovány vztahy

$$\begin{aligned} j_l(z) &= (-z)^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}, \\ n_l(z) &= -(-z)^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}. \end{aligned}$$

Rozvojem $\frac{\sin z}{z}$ a $\frac{\cos z}{z}$ do mocninné řady lze ukázat chování funkcí v okolí nuly

$$j_l(z) \sim \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(z) \sim -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}}, \quad z \ll 1.$$

Pro velká z pak platí asymptotické chování

$$j_l(z) \sim \frac{1}{z} \sin \left(z - \frac{l\pi}{2} \right), \quad n_l(z) \sim -\frac{1}{z} \cos \left(z - \frac{l\pi}{2} \right), \quad z \gg 1.$$

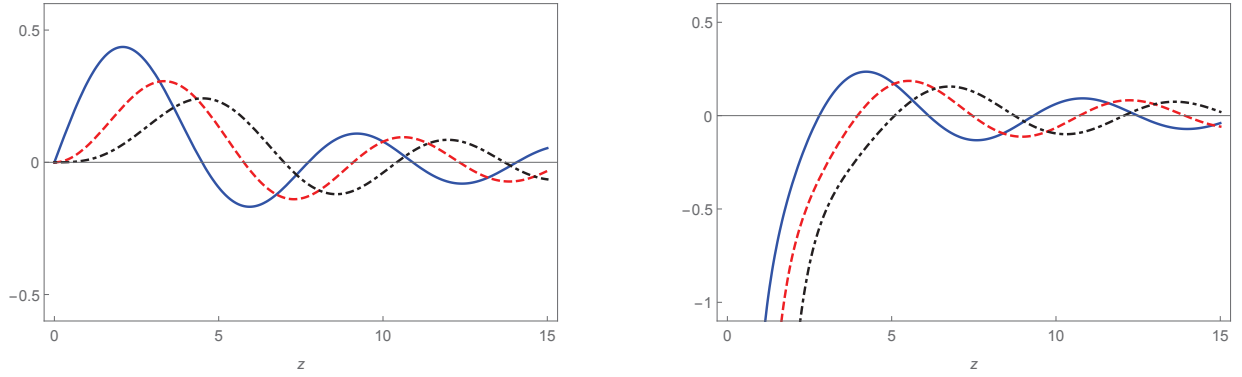
Pro ilustraci jsou na obrázku 10.1 zobrazeny sférické Besselovy funkce (vlevo) a sférické Neumannovy funkce (vpravo) pro $l = 1, 2, 3$.

Sférické Neumannovy funkce divergují v nule. Protože radiální funkce $R_{kl}(r)$ je omezená, musí být úměrná sférické Besselově funkci $j_l(kr)$. Pro sférické Besselovy funkce platí relace ortogonalita

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k').$$

Zobecněné vlastní stavy hamiltoniánu volné částice, které mají současně ostré hodnoty momentu hybnosti, a jsou normalizované k δ -funkci, pak mají tvar

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$



Obrázek 10.1: sférické Besselovy funkce (vlevo) a sférické Neumannovy funkce (vpravo) pro $l = 1$ (plná modrá čára), $l = 2$ (čárkovaná červená čára) a $l = 3$ (čerchovaná černá čára).

Platí pro ně vztahy

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{klm} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2M}\psi_{klm}, \\ \hat{L}^2\psi_{klm} &= \hbar^2\psi_{klm}, \quad \hat{L}_3\psi_{klm} = m\hbar\psi_{klm}, \\ (\psi_{k'l'm'}, \psi_{klm}) &= \delta(k' - k)\delta_{l'l}\delta_{mm'}.\end{aligned}$$

Pro zobecněné vlastní funkce ψ_{klm} lze navíc ukázat, že tvoří bázi Hilbertova prostoru. Můžeme do této báze rozložit i rovinnou vlnu (10.4). Lze ukázat, že platí vztah

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{x}}{kr}\right), \quad (10.11)$$

kde $P_l(t) \equiv P_l^0(t)$ jsou Legendreovy polynomy. Ze vztahu pro přidružené Legendreovy polynomy pro $m = 0$ nalezneme

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dt^l} (t^2 - 1)^l.$$

Legendreův polynom lze rozložit do kulových funkcí

$$P_l(\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \bar{Y}_{lm}(\vec{n}_1) Y_{lm}(\vec{n}_2), \quad (10.12)$$

kde $\vec{n}_i$ jsou jednotkové vektory s prostorovými úhly θ_i, φ_i a $Y_{lm}(\vec{n}_i) \equiv Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i)$. Vzorec (10.11) pak můžeme přepsat do tvaru

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) \bar{Y}_{lm}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right) Y_{lm}(\vec{x}/r) \\ &= \frac{1}{\hbar^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{i^l}{k} \bar{Y}_{lm}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right) \psi_{klm}(r, \theta, \varphi),\end{aligned} \quad (10.13)$$

kterému se říká rozklad do parciálních vln. Ten využijeme v teorii rozptylu. Ve speciálním případě, kdy $\vec{k} = (0, 0, k)$ a tedy $\vec{k} \cdot \vec{x} = kr \cos \theta$, platí

$$Y_{lm}(\vec{k}/k) = Y_{lm}(0, 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}.$$

Rozklad rovinné vlny pak má tvar

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) = \frac{1}{\pi\sqrt{2\hbar^3}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{2l+1} j_l(kr) Y_{l0}(\theta, \varphi).$$