

Polinômios de Legendre. Harmônicos Esféricos

METAS

Apresentar definição e propriedades dos polinômios de Legendre, das funções associadas de Legendre e dos harmônicos esféricos. Estudar a aplicação destas funções especiais em problemas físicos.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá ser capaz de: reconhecer as equações diferenciais de Legendre, associada de Legendre, e da equação diferencial parcial para os harmônicos esféricos; aplicar as funções de Legendre e os harmônicos esféricos na solução de problemas de contorno de física.

PRÉ-REQUISITOS

Equações diferenciais parciais, espaços vetoriais e métricos, teoria de Sturm-Liouville.

INTRODUÇÃO

Quando efetuamos a separação de variáveis em equações como a de Laplace ou Helmholtz, em coordenadas esféricas, somos levados a equações diferenciais cujas soluções estão relacionadas aos polinômios de Legendre.

Problemas físicos com determinadas simetrias, como por exemplo aqueles envolvendo potenciais centrais, têm como solução angular os harmônicos esféricos, que incluem as funções associadas de Legendre.

Em física quântica, a hipótese de existência de um potencial central é essencial para que se possa resolver os problemas de muitos corpos, seja ao nível de átomos ou mesmo dos núcleos, de modo que os harmônicos esféricos são intensamente empregados nesses ramos (física atômica e nuclear).

5.1 Polinômios de Legendre

Em nossa penúltima aula, separamos as variáveis da equação diferencial parcial de Laplace em coordenadas esféricas. Encontramos, para a variável θ , a equação diferencial associada de Legendre. Se fizermos $m = 0$ naquela equação, chegaremos à equação de Legendre,

$$(1 - x^2) \ddot{y} - 2x \dot{y} + \lambda(\lambda + 1) y = 0.$$

Lembre-se que a variável independente x está restrita ao intervalo $[-1, +1]$ do eixo real, já que x foi obtido por mudança de variável, $x = \cos \theta$.

A equação diferencial pode ser resolvida por Frobenius,

$$y(x) = \sum_0^{\infty} a_i x^{k+i},$$

e substituindo esta expansão na equação de Legendre, obtemos as equações indiciais:

$$a_0 k(k - 1) = 0$$

e

$$a_1 k(k + 1) = 0.$$

Segue que $k = 0$, $a_0 \neq 0$, $a_1 \neq 0$, ou então que $k = 1$, $a_0 \neq 0$, $a_1 = 0$.

Pode-se achar também a relação de recorrência,

$$a_{i+2} = \frac{(k+i)(k+i-1) - \lambda(\lambda+1)}{(k+i+1)(k+i+2)} a_i.$$

Nos pontos $x = \pm 1$ há divergência da série (calcule o limite da razão a_{i+2}/a_i quando i tende ao infinito, e lembre-se dos critérios de convergência das séries infinitas para conferir esta afirmação).

E note que esses pontos $x = \pm 1$ correspondem a $\theta = 0, \pi$, valores de θ que são importantes quando analisamos um problema de física (correspondem à posição angular costumeira do semi-eixo z positivo e do semi-eixo negativo, respectivamente).

Uma solução para evitar tal divergência é "truncar" a série infinita para $y(x)$, o que é conseguido anulando-se o numerador da relação de recorrência para algum índice i . Isto só é possível se tivermos

$$\lambda = \ell = \text{inteiro}$$

já que i e k são inteiros.

Escolhemos:

$$\lambda = \ell = 0, 1, 2, \dots$$

e para cada um desses valores de ℓ teremos um polinômio, de grau ℓ .

Com uma escolha adequada de a_0 , escreve-se a solução da equação diferencial de Legendre como:

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell} \sum_{n=0}^{\ell} \frac{(-1)^{n+l} (n+l)!}{n! \left(\frac{\ell+n}{2}\right)! \left(\frac{\ell-n}{2}\right)!} x^n$$

para $\ell = 0, 1, 2, \dots$

Esses polinômios também podem ser calculados pela fórmula de Rodrigues (esta fórmula é derivada após certa quantidade de álgebra, da expressão anterior, em série para P_ℓ),

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} [(x^2 - 1)^\ell].$$

Os primeiros polinômios de Legendre são:

$$\begin{aligned} P_0 &= 1; \\ P_1 &= x; \\ P_2 &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}; \\ P_3 &= \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x; \\ P_4 &= \frac{35}{8}x^4 - \frac{30}{8}x^2 + \frac{3}{8}; \dots \end{aligned}$$

Pode-se ver desses exemplos que a paridade dos polinômios de Legendre é bem definida:

$$P_\ell(-x) = (-1)^\ell P_\ell(x).$$

Apresentamos agora a relação de ortogonalidade e normalização para os polinômios de Legendre. Ela pode ser mostrada a partir da fórmula de Rodrigues (não faremos esse cálculo aqui). Esta relação é da mais alta importância, em função das aplicações:

$$\int_{-1}^{+1} P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{n,m}$$

onde $\delta_{n,m}$ é o delta de Kronecker, definido por:

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 1, & \text{se } n = m, \\ 0, & \text{se } n \neq m. \end{cases}$$

Se você observar a forma da equação diferencial de Legendre,

$$(1-x^2)\ddot{y} - 2x\dot{y} + \ell(\ell+1)y = 0.$$

verá que $b(x) = -2x$ é a derivada de $a(x) = (1-x^2)$, ou seja, ela é do tipo Sturm-Liouville, portanto não é de surpreender que os polinômios de Legendre sejam dois a dois ortogonais.

Além disso, o conjunto das soluções $\{P_\ell(x)\}_{\ell=0,1,2,\dots}$ da equação diferencial de Legendre é completo. Tais soluções P_ℓ são autofunções de um operador tipo Sturm-Liouville, portanto autoadjunto:

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right] P_\ell(x) = -\ell(\ell+1) P_\ell(x),$$

e assim, formam uma base para o espaço das funções integráveis em $[-1, +1]$. Esta propriedade é bastante importante, e em consequência dela, qualquer função $f(x)$ integrável em $[-1, +1]$ pode ser escrita como uma expansão em termos dos polinômios de Legendre:

$$f(x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell P_\ell(x),$$

onde os coeficientes a_ℓ da expansão podem ser calculados multiplicando-se os dois lados da equação acima por um $P_n(x)$, e integrando entre -1 e $+1$,

$$\int_{-1}^{+1} P_n(x) f(x) dx = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell \int_{-1}^{+1} P_n(x) P_\ell(x) dx$$

mas essa última integral pode ser obtida a partir da relação de ortogonalidade,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} P_n(x) f(x) dx &= \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} \frac{2}{2n+1} \delta_{n,\ell} \\ &= \frac{2}{2n+1} a_n. \end{aligned}$$

Tiramos o valor de a_n dessa expressão:

$$a_n = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_n(x) f(x) dx.$$

Existe uma função $g(x, t)$, chamada função geratriz dos polinômios de Legendre,

$$g(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}$$

que possui uma propriedade interessante: quando expandida em série de potências de t , os coeficientes dessa expansão vem a ser exatamente os polinômios de Legendre,

$$g(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n \quad (|t| < 1)$$

tal expansão sendo convergente apenas se $|t|$ for menor que 1.

Para valores de t maiores que 1, pode-se construir outra expansão semelhante,

$$g(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) \frac{1}{t^{n+1}} \quad (|t| > 1).$$

A interpretação física de $g(x, t)$ é a seguinte. Considere uma carga elétrica $+q$ colocada sobre o semi-eixo positivo de z , a uma distância a da origem (veja a figura 5.1). O potencial eletrostático num ponto $P = (x, y, z)$ distante r da origem e r_1 da carga, devido apenas àquela carga é dado por

$$V(x, y, z) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1}$$

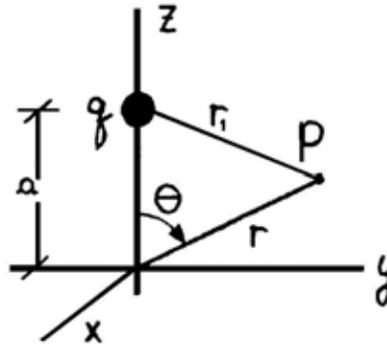


Figura 5.1: Carga elétrica colocada a uma distância a da origem.

ou, em termos das coordenadas polares r, θ ,

$$\begin{aligned} V(r, \theta) &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2ar \cos \theta + a^2}} \\ &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0 a} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\left(\frac{r}{a}\right) \cos \theta + \left(\frac{r}{a}\right)^2}}. \end{aligned}$$

Pondo $t = r/a$ nessa expressão, vemos que a menos de uma constante multiplicativa, o potencial eletrostático tem a mesma expressão da função geratriz dos polinômios de Legendre (a fração um sobre a raiz quadrada daquela forma quadrática em t).

Se r for menor que a , usamos a expansão em termos de polinômios de Legendre para $t = \frac{r}{a} < 1$,

$$V(r, \theta) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{r}{a}\right)^n \quad (r < a),$$

e para r maior que a , com $t = \frac{r}{a} > 1$, a expansão fica:

$$V(r, \theta) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \left(\frac{a}{r}\right)^{n+1} \quad (r > a).$$

A vantagem em usar tal expansão em termos de polinômios de Legendre é que cada termo poderá ser interpretado como um multipolo elétrico, podendo-se calcular separadamente as contribuições do monopolo, dipolo, quadrupolo, etc.

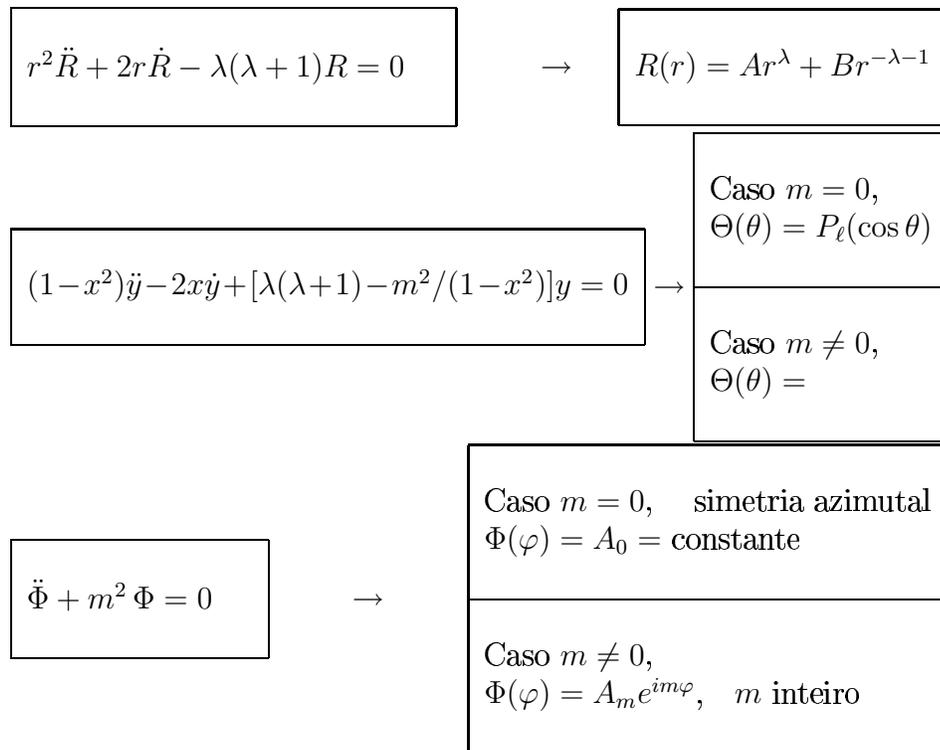
Exemplo Calcule o potencial eletrostático no interior de uma esfera de raio R , onde não existem cargas, quando o potencial da superfície esférica vale:

$$V(R, \theta, \phi) = f(\theta) = \text{função conhecida.}$$

Antes de mais nada, vamos sumarizar alguns resultados obtidos numa aula anterior, sobre separação de variáveis da equação de Laplace em coordenadas esféricas. A equação de Laplace vale na região em que não há cargas elétricas,

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 0$$

e a separação de variáveis em coordenadas polares esféricas quebra tal EDP em três EDO's,



Na solução radial, a parte $r^{-\ell-1}$ não nos serve, por ser divergente na origem $r = 0$, que corresponde ao centro da esfera. Portanto,

$$R(r) = Ar^\ell.$$

Como este problema possui simetria azimutal (o potencial na superfície esférica não depende da variável φ), adotamos $m = 0$, e com isso,

$$\Phi(\varphi) = 1.$$

Como $m = 0$, a equação associada de Legendre transforma-se na equação de Legendre, e a solução na variável θ , ou em $x = \cos \theta$ é:

$$\Theta(\theta) = P_\ell(\cos \theta) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

A solução mais geral possível combinando essas três soluções é

$$V(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

ou seja,

$$V(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell r^\ell P_\ell(\cos \theta).$$

Utilizaremos em seguida a condição de contorno (o potencial na superfície foi dado),

$$V(R, \theta) = f(\theta)$$

e assim,

$$V(R, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_\ell R^\ell P_\ell(\cos \theta) = f(\theta) = g(x)$$

onde g seria a mesma função f , modificada pela troca de θ a $x = \cos \theta$.

Os coeficientes A_ℓ podem ser encontrados multiplicando-se a última equação por um $P_n(x)$, integrando em relação a x , e usando a relação de ortonormalidade dos polinômios de Legendre, como fizemos na página 73. Obtém-se:

$$A_\ell = \frac{1}{R^\ell} \int_{-1}^{+1} \frac{2\ell + 1}{2} P_\ell(x) g(x) dx$$

para $\ell = 0, 1, 2, \dots$

Encontramos, finalmente, para $r < R$,

$$V(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell + 1}{2} \left(\frac{r}{R}\right)^\ell \left[\int_{-1}^{+1} P_\ell(x) g(x) dx \right] P_\ell(\cos \theta).$$

5.2 Funções Associadas de Legendre

As funções associadas de Legendre aparecem como soluções da equação associada de Legendre,

$$(1 - x^2) \ddot{y} - 2x \dot{y} + \left[\ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] y = 0$$

onde $-1 \leq x \leq +1$ (pois $x = \cos \theta$).

Se u for solução da equação de Legendre,

$$(1 - x^2) \ddot{u} - 2x \dot{u} + \ell(\ell + 1) u = 0$$

então

$$v = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m u}{dx^m}$$

será solução da equação associada de Legendre, como se pode verificar por substituição.

As funções associadas podem, portanto, ser escritas para $m > 0$ como

$$\begin{aligned} P_{\ell,m}(x) &= (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{\ell}(x) \\ &= \frac{(1 - x^2)^{m/2}}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^{\ell} \end{aligned}$$

tendo sido utilizada a fórmula de Rodrigues na última passagem. É bom observar que alguns autores preferem denotar as funções associadas com um índice inferior, e um superior:

$$P_{\ell}^m(x),$$

o que significa o mesmo que nossos $P_{\ell,m}(x)$. Às vezes denotaremos essas funções sem a vírgula, $P_{\ell m}(x)$.

Pode-se definir as funções associadas também para o segundo índice negativo,

$$P_{\ell,-m}(x) = \frac{(1 - x^2)^{-m/2}}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell-m}}{dx^{\ell-m}} (x^2 - 1)^{\ell}$$

Vê-se destas últimas duas expressões que

$$P_{\ell,m}(x) = P_{\ell,-m}(x) = 0$$

sempre que tivermos $|m| > \ell$, de forma que vamos nos restringir a

$$-\ell \leq m \leq +\ell.$$

A relação entre $P_{\ell m}$ e $P_{\ell, -m}$ é:

$$P_{\ell, -m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_{\ell, m}(x)$$

o que indica que essas soluções são l.d. e não l.i..

A paridade das funções associadas de Legendre também é bem definida:

$$P_{\ell, m}(-x) = (-1)^{\ell+m} P_{\ell, m}(x).$$

E, é claro, as funções associadas de Legendre são idênticas aos polinômios de Legendre quando $m = 0$ (porque nesse caso a equação associada se reduz à equação de Legendre),

$$P_{\ell, 0}(x) = P_{\ell}(x)$$

para todo $x \in [-1, +1]$ e todo ℓ inteiro.

Uma expressão de muita utilidade é a relação de ortogonalidade e normalização,

$$\int_{-1}^{+1} P_{\ell, m}(x) P_{\ell', m}(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} \delta_{\ell, \ell'}$$

e note que os valores do índice m são iguais nas duas funções associadas. Há uma outra relação de ortonormalidade,

$$\int_{-1}^{+1} P_{\ell m}(x) P_{\ell k}(x) \frac{1}{1 - x^2} dx = \frac{(\ell + m)!}{m(\ell - m)!} \delta_{m, k}.$$

O conjunto $\{P_{\ell, m}(x)\}$, para $\ell > 0$ e $|m| \leq \ell$ é completo, e em termos desse conjunto, toda função integrável em $[-1, +1]$ pode ser expandida:

$$f(x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} a_{\ell m} P_{\ell m}(x) dx,$$

onde

$$a_{\ell m} = \frac{2\ell + 1}{2} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \int_{-1}^{+1} f(x) P_{\ell m}(x) dx.$$

Vamos exibir algumas funções associadas de Legendre, as de índices mais baixos. Você encontra mais dessas funções nos livros citados na bibliografia, e em tabelas matemáticas.

$$P_{0,0}(x) = P_0(x) = 1;$$

$$P_{1,-1}(x) = -\frac{1}{2}\sqrt{1-x^2} = -\frac{1}{2}\text{sen } \theta;$$

$$P_{1,0}(x) = P_1(x) = x = \cos \theta;$$

$$P_{1,+1}(x) = \sqrt{1-x^2} = \text{sen } \theta;$$

$$P_{2,-2}(x) = \frac{3}{24}(1-x^2) = \frac{1}{8}\text{sen}^2 \theta;$$

$$P_{2,-1}(x) = -\frac{1}{2}x\sqrt{1-x^2} = -\frac{1}{2}\text{sen } \theta \cos \theta;$$

$$P_{2,0}(x) = P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2}\cos^2 \theta - \frac{1}{2};$$

$$P_{2,+1}(x) = 3x\sqrt{1-x^2} = 3 \cos \theta \text{sen } \theta;$$

$$P_{2,+2}(x) = 3(1-x^2) = 3\text{sen}^2 \theta.$$

Vê-se daí que as funções associadas de Legendre $P_{\ell,m}$ não são polinômios em x (apesar disso, alguns autores usam o termo "polinômios associados de Legendre").

Outra propriedade dessas funções associadas é seu valor nulo nos pontos $x = \pm 1$ (ou seja, para θ zero ou π), se $m \neq 0$,

$$P_{\ell,m}(\pm 1) = 0.$$

A função geratriz das funções associadas de Legendre é:

$$\begin{aligned} g_m(x, t) &= \frac{(2m)!(1-x^2)^{m/2}}{2^m m! (1-2xt+t^2)^{m+1/2}} \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} P_{i+m,m}(x) t^i. \end{aligned}$$

Tal função geratriz permite provar a validade de relações de recorrência, como:

$$(2\ell + 1)x P_{\ell,m} = (\ell + m) P_{\ell-1,m} + (\ell - m + 1) P_{\ell+1,m};$$

$$P_{\ell,m+1} - \frac{2mx}{\sqrt{1-x^2}} P_{\ell,m} + [\ell(\ell+1) - m(m+1)] P_{\ell,m-1} = 0;$$

$$2\sqrt{1-x^2} \frac{d}{dx} P_{\ell,m} = P_{\ell,m+1} - (\ell+m)(\ell-m+1) P_{\ell,m-1}$$

que são úteis em procedimentos numéricos usando as funções associadas.

Antes de encerrar esta seção, gostaria de alertá-lo sobre um detalhe que normalmente passa despercebido. Como você sabe, uma equação diferencial linear de segunda ordem possui duas soluções l.i., logo há uma segunda solução que não discutimos. Costuma-se denotar a segunda solução da equação diferencial associada de Legendre por $Q_{\ell,m}(x)$. Como elas são irregulares para $x = \pm 1$ (e esses pontos são importantes nas aplicações físicas!), elas não serão usadas neste nosso curso.

5.3 Harmônicos Esféricos

Quando efetuamos a separação de variáveis da equação de Laplace, na terceira aula, em coordenadas esféricas, usamos:

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Encontramos soluções na forma $P_{\ell,m}(x)$ para Θ , e $e^{im\varphi}$ para Φ , de modo que

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = A_{\ell,m} P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

As constantes $A_{\ell,m}$ são escolhidas com base em uma relação de ortonormalidade, que já discutiremos. Introduzindo tais constantes convenientes,

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Estas funções são os chamados harmônicos esféricos. Em inglês, escreve-se *spherical harmonics*; o substantivo "harmônicos" aqui se refere às funções harmônicas, seno e cosseno, que são suaves, contínuas, existindo suas derivadas de todas as ordens. Se preferir, são funções "harmoniosas". Já o adjetivo "esféricos" lembra que eles sempre aparecem, como parte da solução, em problemas com simetria esférica,

como o de potenciais centrais, do qual o potencial gravitacional é um exemplo importante.

Alguns autores não incluem, na definição dos harmônicos esféricos, o fator $(-1)^m$, que é chamado de fator de fase de Condon-Shortley, mas em cálculos quânticos de física atômica e nuclear o uso de tal fator é bastante conveniente.

Adotada a constante $A_{\ell,m}$ adequada, os harmônicos esféricos satisfazem uma relação de ortonormalidade bem simples,

$$\int_{(4\pi)} d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'}$$

onde $d\Omega$ é o elemento infinitesimal de ângulo sólido,

$$\int_{(4\pi)} d\Omega (...) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (...)$$

O conjunto dos $Y_{\ell m}$ é completo, de modo que se pode expandir qualquer função arbitrária dos ângulos θ, φ em termos dessa base:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell, m} a_{\ell, m} Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

Essa expansão é conhecida como série de Laplace.

Consegue-se achar os coeficientes dessa expansão multiplicando-se por um $Y_{L, M}$, integrando-se em todo o ângulo sólido (4π) , e buscando o auxílio da relação de ortonormalidade dos $Y_{\ell m}$. Encontra-se:

$$a_{\ell, m} = \int_{(4\pi)} d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi).$$

Listamos em seguida alguns harmônicos esféricos, os de índices mais baixos.

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}}; \\ Y_{1,-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}; & Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \\ Y_{1,+1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{+i\varphi}; & Y_{2,-2} &= \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}; \\ Y_{2,-1} &= \sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}; & Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(3 \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right); \end{aligned}$$

$$Y_{2,+1} = -\sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin \theta \cos \theta e^{+i\varphi}; \quad Y_{2,+2} = \sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2 \theta e^{+2i\varphi}.$$

Enunciaremos no que segue o teorema da adição para os harmônicos esféricos. Sejam dados dois pontos de uma mesma superfície esférica,

$$P = (\theta, \varphi), \quad Q = (\alpha, \beta).$$

Há uma relação trigonométrica relacionando o ângulo γ , que é formado entre os vetores posição de P e Q , com os ângulos $\alpha, \beta, \theta, \varphi$ (veja a figura 5.2),

$$\cos \gamma = \cos \alpha \cos \theta + \sin \alpha \sin \theta \cos(\varphi - \beta)$$

e a partir dessa expressão prova-se o teorema da adição para os harmônicos esféricos:

$$P_\ell(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}^*(\alpha, \beta) Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

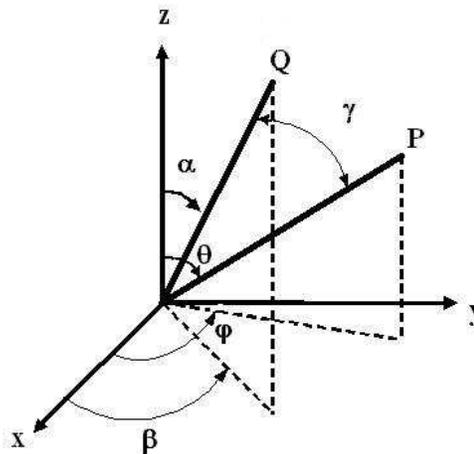


Figura 5.2: Dois pontos P e Q no espaço; os vetores posição desses pontos definem um ângulo γ .

Esse resultado, que não provaremos aqui, é útil particularmente para se descrever o potencial no ponto $P = (r, \theta, \varphi)$ do espaço produzido por uma carga elétrica pontual colocada em $Q = (a, \alpha, \beta)$,

$$V(r, \theta, \varphi) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{a}{r}\right)^\ell \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}^*(\alpha, \beta) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

para $r > a$.

Com o que vimos nesta seção, já temos condições de preencher o espaço em branco na tabela da página 76. Tratávamos lá de compilar as soluções da equação de Laplace, e no caso da variável θ , faltou o resultado da função $\Theta(\theta)$, que é dado pela solução da equação associada de Legendre,

$$\Theta(\theta) = P_{\ell,m}(\cos \theta),$$

para $-\ell \leq m \leq +\ell$. A aplicação em que trabalharemos agora é uma extensão daquele exemplo discutido na página 76.

Exemplo Calcule o potencial eletrostático no interior de uma esfera de raio R , onde não existem cargas, quando o potencial da superfície esférica vale:

$$V(R, \theta, \phi) = f(\theta, \varphi) = \text{função conhecida.}$$

Para $r < R$, o potencial eletrostático será uma superposição de objetos do tipo:

$$r^\ell P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

ou seja, em geral para pontos interiores à casca esférica de raio R ,

$$V(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} C_{\ell,m} \left(\frac{r}{R}\right)^\ell Y_{\ell,m}(\theta, \varphi).$$

Observe as alterações em relação ao Exemplo da página 76: a função $\Phi(\varphi)$ agora vale $e^{im\varphi}$, e a função $\Theta(\theta) = P_{\ell,m}(\cos \theta)$, assim o produto destas duas foi substituído pelos harmônicos esféricos $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$.

As constantes $C_{\ell,m}$ podem ser calculadas com base na condição de contorno na casca esférica, $V(R, \theta, \phi) = f(\theta, \varphi)$, resultando em:

$$C_{\ell,m} = \int_{(4\pi)} Y_{\ell,m}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) d\Omega.$$

Exemplo Ache o potencial eletrostático no interior de uma distribuição de cargas:

$$\rho(\mathbf{r}) = \begin{cases} Ar e^{-\alpha r} \sin^2 \theta \cos 2\varphi, & 0 \leq r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

onde A e α são constantes conhecidas.

Sabemos que

$$V(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|};$$

por outro lado,

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \gamma}} = \frac{1}{r_{>}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^{\ell} P_{\ell}(\cos \gamma)$$

onde $r_{>} = \max(r, r')$ ($r_{>}$ é o maior dentre r e r'), $r_{<} = \min(r, r')$ (o menor dentre os valores de r e r').

Mas, pelo teorema da adição,

$$P_{\ell}(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}^*(\theta', \varphi') Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

Assim,

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{4\pi}{r_{>}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell + 1} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}}\right)^{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}^*(\theta', \varphi') Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

Há dois casos a considerar. Como queremos calcular o potencial no interior da distribuição de cargas, digamos, num ponto à uma distância r do centro, então $r < R$. Mas o raio r divide a distribuição de cargas em duas partes, uma interior, onde $r' < r$ (r' denota um ponto qualquer onde há cargas), e outra exterior ao ponto r , sendo $r' > r$ neste caso.

(i) Para $r' < r$:

$$V_{interior} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{1}{r^{\ell+1}} \frac{4\pi}{2\ell + 1} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \times \\ \times \int d\Omega' Y_{\ell m}^*(\theta', \varphi') [\sin^2 \theta' \cos 2\varphi'] \int_0^r r'^2 dr' A r' e^{-\alpha r'} r'^{\ell}$$

mas o que aparece dentro dos colchetes pode ser escrito como uma combinação linear de harmônicos esféricos:

$$\sin^2 \theta' \cos 2\varphi' = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} [Y_{2,2}(\theta', \varphi') + Y_{2,-2}(\theta', \varphi')],$$

com o que calcula-se a integral no ângulo sólido $d\Omega' = \sin \theta' d\theta' d\varphi'$, usando a relação de ortonormalidade dos harmônicos esféricos,

$$\begin{aligned} \int d\Omega' Y_{\ell m}^*(\theta', \varphi') \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (Y_{2,2}(\theta', \varphi') + Y_{2,-2}(\theta', \varphi')) &= \\ &= \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (\delta_{\ell,2} \delta_{m,+2} + \delta_{\ell,2} \delta_{m,-2}). \end{aligned}$$

Lembre-se que esses deltas de Kronecker só não são nulos quando $\ell = 2$ e $m = \pm 2$, essa restrição vai eliminar todos os outros termos das somas em ℓ e m . Portanto, a contribuição ao potencial devido à parte interior ao raio r da distribuição fica:

$$V_{interior} = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} \frac{A}{5\epsilon_0} (\text{Parte radial}_{<}) [Y_{2,2}(\theta, \varphi) + Y_{2,-2}(\theta, \varphi)]$$

onde não chegamos a calcular a integral radial (chamamos seu resultado de "Parte radial" simplesmente).

(ii) Para $r' > r$:

$$\begin{aligned} V_{exterior} &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} r^\ell \frac{4\pi}{2\ell+1} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \times \\ &\times \int d\Omega' Y_{\ell m}^*(\theta', \varphi') [\sin^2 \theta' \cos 2\varphi'] \int_r^R r'^2 dr' A r' e^{-\alpha r'} \frac{1}{(r')^{\ell+1}} \end{aligned}$$

e efetuando o mesmo tipo de cálculo do caso (i), chega-se a

$$V_{exterior} = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} \frac{A}{5\epsilon_0} (\text{Parte radial}_{>}) [Y_{2,2}(\theta, \varphi) + Y_{2,-2}(\theta, \varphi)].$$

Neste caso a integral radial pode ser efetuada sem dificuldade, e a dependência radial completa é:

$$(\text{Parte radial}_{>}) = \frac{r^2}{\alpha} [e^{-\alpha r} - e^{-\alpha R}].$$

Finalmente, o potencial numa posição $r < R$ é dado pela soma das duas contribuições,

$$V = V_{interior} + V_{exterior}.$$



ATIVIDADES

1. Usando a fórmula de Rodrigues, calcule $P_n(x)$.

2. Calcule

(i)

$$I_1 = \int_{-1}^{+1} P_2(x) dx$$

(ii)

$$I_2 = \int_{-1}^{+1} P_3(x) P_2(x) dx$$

3. Expanda $f(x) = x^3$ em polinômios de Legendre.

4. Escreva $x^4 - 2x^2$ como uma combinação linear de polinômios de Legendre.

5. Mostre (i) como e (ii) por quê uma função $f(x)$ pode ser expandida na forma de uma combinação linear (normalmente, uma série infinita) de polinômios de Legendre. (iii) Ache os coeficientes da expansão.

6. Expanda:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}}$$

em série de potências de t , para $t < 1$, utilizando a expansão de Taylor em torno de $t = 0$, para mostrar (pelo menos para os três primeiros termos) que os coeficientes da expansão correspondem exatamente aos polinômios de Legendre.

7. Prove as relações de recorrência abaixo. Elas encontram utilidade, com frequência, na construção de rotinas computacionais envolvendo os polinômios de Legendre. Sugestão: utilize, como ponto de partida, a função geratriz dos polinômios. Aqui, $n \geq 1$.

(i)

$$(1 - x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) = n P_{n-1}(x) - nx P_n(x).$$

(ii)

$$n P_n(x) = x \frac{d}{dx} P_n(x) - \frac{d}{dx} P_{n-1}(x)$$

(iii)

$$(n + 1) P_{n+1}(x) = (2n + 1)x P_n(x) - n P_{n-1}(x)$$

8. Mostre que a solução do problema do potencial eletrostático no exterior de uma esfera de raio R , onde não existem cargas, quando o potencial da superfície esférica vale $f(\theta)$, é dada por:

$$V(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell + 1}{2} \left(\frac{R}{r}\right)^{\ell+1} \left[\int_{-1}^{+1} P_{\ell}(x) g(x) dx \right] P_{\ell}(\cos \theta)$$

($r > R$).

9. Calcule o potencial elétrico produzido por um dipolo elétrico, como mostrado na figura 5.3.

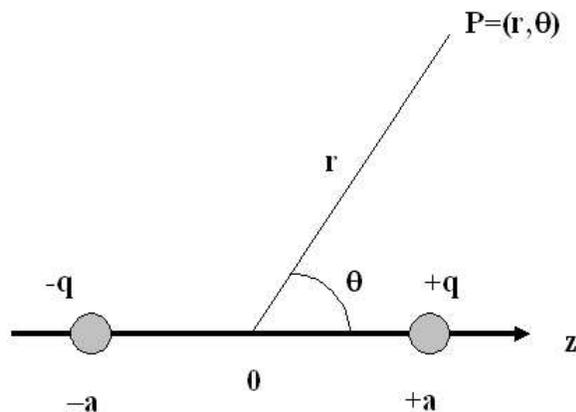


Figura 5.3: Um dipolo elétrico colocado sobre o eixo z .

10. Calcule o potencial elétrico produzido por dois dipolos elétricos superpostos, dando origem a um quadrupolo elétrico (ver figura 5.4).

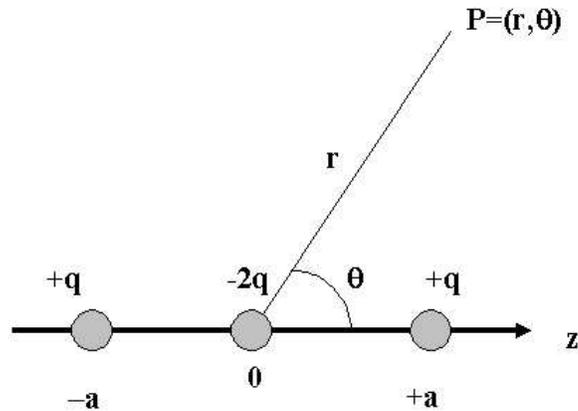


Figura 5.4: Dois dipolos elétricos superpostos, colocados no eixo z .

11. Calcule:

(i)

$$I_1 = \int_{-1}^{+1} P_{\ell m}(x) dx$$

(ii)

$$I_2 = \int_{-1}^{+1} P_{3,-3}(x) P_{4,-3}(x) dx$$

(iii)

$$I_3 = \int_{-1}^{+1} P_{3,2}(x) P_{4,2}(x) dx$$

12. Que operador linear possui os $P_{\ell m}(x)$ como autofunções? Quais os autovalores associados aos $P_{\ell m}$? Escreva o produto escalar do espaço de Hilbert sobre o qual o referido operador atua.

13. Calcule as seguintes integrais:

(i)

$$I_1 = \int_{(4\pi)} Y_{3,3}(\theta, \varphi) Y_{5,2}(\theta, \varphi) d\Omega$$

(ii)

$$I_2 = \int_{(4\pi)} Y_{3,-1}(\theta, \varphi) Y_{3,1}(\theta, \varphi) d\Omega$$

(iii)

$$I_3 = \int_{(4\pi)} |Y_{25,8}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

14. Mostre que a paridade dos harmônicos esféricos $Y_{\ell,m}$ é $(-1)^\ell$, isto é, é par se ℓ for par, e ímpar se ℓ for ímpar.

15. Prove que $Y_{\ell,m}(0, \varphi) = \sqrt{(2\ell + 1)/4\pi} \delta_{m,0}$.

16. Mostre que os operadores L_+ e L_- ,

$$L_{\pm} = L_x \pm i L_y = \pm e^{\pm i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

aplicados sobre os $Y_{\ell,m}$ aumentam ou diminuem m de uma unidade:

$$L_+ Y_{\ell,m} = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} Y_{\ell,m+1}$$

$$L_- Y_{\ell,m} = \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} Y_{\ell,m-1}.$$

17. Mostre:

$$Y_{\ell,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)]^*.$$

18. Considere a expressão para o potencial no ponto $P = (r, \theta, \varphi)$ do espaço produzido por uma carga elétrica pontual colocada no ponto $Q = (a, \alpha, \beta)$ (veja logo após o teorema da adição para os $Y_{\ell,m}$). Construa uma expressão semelhante para o caso $r < a$.

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

No problema 2, use a relação de ortogonalidade dos polinômios de Legendre. Lembre-se que $P_1(x) = x$.

No problema 3, faça $x^3 = AP_3 + BP_1$ e determine A e B (por quê não colocamos P_0 ou P_2 nessa expansão, ou termos de maior ℓ ?...).

O problema 4 é semelhante ao 3.

Quanto ao problema 5, ele está resolvido no texto! Você consegue achar onde? (quanto ao por quê, lembre-se que o operador envolvido na equação de Legendre é do tipo Sturm-Liouville, portanto as autofunções formam um conjunto completo).

Problema 6: recorde como obter a série de Taylor (Métodos de Física Teórica I, aula 07).

Para obter as relações de recorrência do problema 7, você pode derivar de um lado e do outro, a relação da função geratriz dos polinômios de Legendre. Isto pode ser feito em relação a x (uma equação) ou em relação a t (dá outra equação). Talvez o que se quer provar num dos itens seja uma combinação linear dessas duas equações que se obtém derivando em relação a x e a t !

O problema 8 é bem similar ao resolvido no texto, apenas use agora a expansão em multipolos para $t = \frac{r}{R} > 1$.

No problema 9 você usará o que foi desenvolvido no texto para o potencial de uma carga, primeiro para a carga $+q$, cujo ângulo com o eixo z é θ , e depois para a carga $-q$, o ângulo nesse caso é $\pi - \theta$. Os termos com $n = 0$ nas duas expansões se anulam, mas com $n = 1$ se somam, resultando:

$$V = \frac{2aq \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

(que é o potencial de um dipolo elétrico).

Problema 10, semelhante, agora fazendo o mesmo que no problema 9, mas para três cargas. Note que o potencial produzido pela carga na origem não precisa ser expandido, e vale $\frac{-2q}{4\pi\epsilon_0 r}$. Quando somar esse potencial com as expansões para as cargas $+q$ (ângulo θ) e $+q$ (ângulo $\pi - \theta$), a contribuição de monopolo ($n = 0$) é nula, a de dipolo ($n = 1$) é nula, e a de quadrupolo dá $\frac{-2a^2 q}{4\pi\epsilon_0 r^3}$.

Problema 11: use a ortogonalidade das funções associadas de Legendre. Lembre-se que $P_{0,0} = 1$.

Problema 12, volte ao texto para localizar a equação diferencial associada de Legendre, e sua relação de ortogonalidade (produto escalar).

Problema 13: use a ortogonalidade dos harmônicos esféricos.

Problema 14, obtenha a paridade separadamente para os $P_{\ell,m}$ e para $e^{im\varphi}$, e multiplique. Note que quando analisamos a paridade de uma função de x , fazemos $f(-x) = \dots$. Aqui, como trabalhamos com ângulos, devemos partir de $Y(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ e tentar relacionar isso com $Y(\theta, \varphi)$.

Problema 15: use o valor de $P_{\ell,m}(\pm 1)$ de uma expressão que consta no texto.

Problema 16. A dica aqui é ver qual a ação do operador $\partial/\partial\varphi$ atuando sobre $e^{im\varphi}$ (esta é a dependência em φ dos $Y_{\ell,m}$). O mesmo para o $\partial/\partial\theta$, que atuará sobre os $P_{\ell,m}$.

Problema 17: use a definição dos $Y_{\ell,-m}$ e tente relacionar isso com o $Y_{\ell,m}$.

Problema 18: a dica é similar à do problema 8.

CONCLUSÃO

Vimos nesta aula que as equações diferenciais de Legendre e associada de Legendre aparecem do tratamento de equações diferenciais parciais da física, como aquelas envolvendo o operador Laplaciano. Suas soluções, portanto, são muito usadas. Chama a atenção o uso dos harmônicos esféricos, que sempre fornecem a solução angular para problemas com simetria esférica.

RESUMO

Nesta aula você tomou contato com os polinômios de Legendre, as funções associadas de Legendre e os harmônicos esféricos, e aprendeu como aplicá-los em problemas de contorno.

PRÓXIMA AULA

Na próxima aula estudaremos as funções de Bessel, que encontram aplicação em problemas de contorno da física teórica.

REFERÊNCIAS

- AR KEN, George; WEBER Hans. Física Matemática. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- BUTKOV, Eugene. Física Matemática. Rio de Janeiro: Guanabara 2, 1978.
- BRAGA, Armen. Notas de Física Matemática. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2006.

