V. SEPARAZIONE DELLE VARIABILI

1. Trasformazioni Ortogonali. Sia $u = (u_1, u_2, u_3)$ una trasformazione delle variabili in $\mathbb{R}^3$, dove $x = (x_1, x_2, x_3)$ sono le coordinate cartesiane, $u_j = u_j(x_1, x_2, x_3)$ $(j = 1, 2, 3)$ sono funzioni di classe C^2 e la matrice Jacobiana è invertibile (per x in un aperto di $\mathbb{R}^3$). La trasformazione si dice *ortogonale* se le righe della matrice Jacobiana

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial u_1} & \frac{\partial x_2}{\partial u_1} & \frac{\partial x_3}{\partial u_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial u_2} & \frac{\partial x_2}{\partial u_2} & \frac{\partial x_3}{\partial u_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial u_3} & \frac{\partial x_2}{\partial u_3} & \frac{\partial x_3}{\partial u_3} \end{bmatrix}$$

sono ortogonali. In altre parole, la trasformazione si dice ortogonale se

$$\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial x_j}{\partial u_k} \frac{\partial x_j}{\partial u_l} = 0, \qquad k \neq l.$$

Siccome J^{-1} è la matrice Jacobiana della trasformazione inversa, risulta la sua ortogonalità. Ponendo

$$h_k = \left(\sum_{j=1}^{3} \left(\frac{\partial x_j}{\partial u_k} \right)^2 \right)^{1/2}, \qquad k = 1, 2, 3,$$

si vede facilmente che la matrice $\operatorname{diag}(1/h_1, 1/h_2, 1/h_3)\, J$ è ortogonale (cioè, $U^{-1} = U^T$ e quindi $\det U \in \{-1, +1\}$). Dunque

$$|\det J| = h_1 h_2 h_3.$$

Esempio: **Coordinate Cilindriche**: $x = r\cos\theta$, $y = r\operatorname{sen}\theta$, $z = z$. dove $r \geq 0$, $0 \leq \theta < 2\pi$, $z \in \mathbb{R}$. Allora $h_r = 1$, $h_\theta = r$, $h_z = 1$.
Esempio: **Coordinate Sferiche**: $x = r\operatorname{sen}\varphi\cos\theta$, $y = r\operatorname{sen}\varphi\operatorname{sen}\theta$, $z = r\cos\varphi$, dove $r \geq 0$, $\varphi \in [0, \pi]$, $\theta \in [0, 2\pi)$. Allora $h_r = 1$, $h_\varphi = r$, $h_\theta = r\operatorname{sen}\varphi$.

L'operatore di Laplace

$$\Delta = \nabla^2 = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$$

si rappresenta nella seguente forma:

$$\Delta\psi = \frac{1}{h_1h_2h_3}\left[\frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{h_2h_3}{h_1}\frac{\partial\psi}{\partial u_1}\right)+\frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{h_3h_1}{h_2}\frac{\partial\psi}{\partial u_2}\right)+\frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{h_1h_2}{h_3}\frac{\partial\psi}{\partial u_3}\right)\right].$$

In coordinate cilindriche

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\psi r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}.$$

In coordinate sferiche

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\psi r}+\frac{1}{r^2\mathrm{sen}^2\varphi}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\mathrm{sen}\,\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\mathrm{sen}\,\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right).$$

Introducendo la nuova variabile $\xi = \cos\varphi \in [-1,1]$ (tale che $d\xi = -\mathrm{sen}\,\varphi\,d\varphi$, $1-\xi^2 = \mathrm{sen}^2\varphi$) otteniamo

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\psi r}+\frac{1}{r^2(1-\xi^2)}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\xi}\left((1-\xi^2)\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right).$$

Sostituendo una funzione $\psi = \psi(r,\theta)$ che non dipende da z nell'espressione per $\Delta\psi$ in coordinate cilindriche, si trova la formula per l'operatore di Laplace in coordinate polari:

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\psi r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}.$$

2. Separazione in Coordinate Polari. Consideriamo l'equazione di Helmholtz

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0$$

in due variabili (x,y) per $k \geq 0$ nel dominio

$$D = \left\{(x,y) : 0 \leq \sqrt{x^2+y^2} \leq L\right\},$$

dove $L \in (0,+\infty)$. Ponendo

$$\psi(r,\theta) = R(r)\Theta(\theta),$$

dove $R(r)$ e $\Theta(\theta)$ sono funzioni di classe C^2 in $r \in (0,L)$ e $\theta \in \mathbb{R}$ con $\Theta(\theta+2\pi) = \Theta(\theta)$, si trova

$$0 = \frac{\Delta\psi}{\psi}+k^2 = \frac{1}{R(r)}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}\right]+\frac{1}{r^2\Theta(\theta)}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}+k^2,$$

oppure

$$\frac{r^2}{R(r)}\left[\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}\right]+k^2r^2+\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = 0.$$

L'espressione precedente è la somma costante di una funzione di r (che non dipende da θ) e una funzione di θ (che non dipende da r). Dunque i due termini devono essere costanti.

Proposizione 1 *Sia $\Theta(\theta)$ una funzione di classe C^2, non banale, tale che*

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = -C, \qquad \Theta(\theta+2\pi) \equiv \Theta(\theta).$$

Allora $C = m^2$ per qualche $m = 0, 1, 2, \cdots$ e

$$\Theta(\theta) = \begin{cases} \textit{costante}, & m = 0 \\ \textit{cost}_1 \cos m\theta + \textit{cost}_2 \,\textit{sen}\, m\theta, & m = 1, 2, 3, \cdots . \end{cases}$$

Dimostrazione. Per $C < 0$ si ha la soluzione generale

$$\Theta(\theta) = c_1 \cosh(\theta\sqrt{-C}) + c_2 \mathrm{senh}\,(\theta\sqrt{-C}).$$

Sostituendo $\Theta(\theta+2\pi) \equiv \Theta(\theta)$ e le formule d'addizione

$$\begin{cases} \cosh(\alpha+\beta) = \cosh\alpha\,\cosh\beta + \mathrm{senh}\,\alpha\,\mathrm{senh}\,\beta \\ \mathrm{senh}\,(\alpha+\beta) = \mathrm{senh}\,\alpha\,\cosh\beta + \cosh\alpha\,\mathrm{senh}\,\beta, \end{cases}$$

risulta

$$\begin{aligned} & c_1 \cosh(\theta\sqrt{-C}) + c_2 \mathrm{senh}\,(\theta\sqrt{-C}) \\ = & \left[c_1 \cosh(2\pi\sqrt{-C}) + c_2 \mathrm{senh}\,(2\pi\sqrt{-C})\right] \cosh(\theta\sqrt{-C}) \\ + & \left[c_1 \sinh(2\pi\sqrt{-C}) + c_2 \cosh(2\pi\sqrt{-C})\right] \mathrm{senh}\,(\theta\sqrt{-C}), \end{aligned}$$

dove $\theta \in (0, 2\pi)$ è arbitrario. Quindi

$$\begin{bmatrix} 1-\cosh(2\pi\sqrt{-C}) & -\mathrm{senh}\,(2\pi\sqrt{-C}) \\ -\mathrm{senh}\,(2\pi\sqrt{-C}) & 1-\cosh(2\pi\sqrt{-C}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

implicando $c_1 = c_2 = 0$, poichè il determinante del sistema $2(1-\cosh(2\pi\sqrt{-C}))$ < 0. D'altra parte, per $C > 0$ troviamo la soluzione generale

$$\Theta(\theta) = c_1 \cos(\theta\sqrt{-C}) + c_2 \mathrm{sen}\,(\theta\sqrt{-C}).$$

Nella stessa maniera risulta il sistema

$$\begin{bmatrix} 1-\cos(2\pi\sqrt{C}) & -\mathrm{sen}\,(2\pi\sqrt{C}) \\ \mathrm{sen}\,(2\pi\sqrt{C}) & 1-\cos(2\pi\sqrt{C}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

con determinante $2(1-\cos(2\pi\sqrt{C}))$. Il determinante si annulla se e solo se $C = m^2$ per $m \in \mathbf{N}$. In tal caso tutti gli elementi della matrice si annullano e quindi le costanti c_1 e c_2 sono arbitrarie. Infine, per $C = 0$ troviamo la soluzione generale $\Theta(\theta) = c_1 + c_2\theta$. In tal caso $\Theta(\theta+2\pi) \equiv \Theta(\theta)$ implica $c_2 = 0$. □

Sostituendo $\dfrac{1}{\Theta(\theta)}\dfrac{d^2\Theta}{d\theta^2} = -m^2$ per $m = 0, 1, 2, \cdots$, otteniamo

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} + \left[k^2 - \frac{m^2}{r^2}\right] R(r) = 0$$

con le condizioni al contorno $R(0^+)$ finito e $R(L) = 0$. Se invece della condizione di Dirichlet $\psi|_{\partial D} \equiv 0$ si considera la condizione di Neumann $\frac{\partial\psi}{\partial n}|_{\partial D} \equiv 0$, risultano le condizioni al contorno $R(0^+)$ finito e $R'(L) = 0$.

Per $k = 0$ si trova l'equazione di Eulero $r^2R''(r) + rR'(r) - m^2R(r) = 0$ con soluzione generale

$$R(r) = \begin{cases} c_1 + c_2 \log r, & m = 0 \\ c_1 r^m + c_2 r^{-m}, & m = 1, 2, 3, \cdots . \end{cases}$$

La condizione che $R(0^+)$ sia finito, implica $c_2 = 0$. In tal caso $R(L) \neq 0$ per ogni $L > 0$, eccetto nel caso banale $c_1 = c_2 = 0$. Quindi per $k = 0$ non ci sono soluzioni non banali. Purtroppo, se studiamo l'equazione di Helmholtz con la condizione di Neumann, risulta la soluzione non banale costante se $m = 0$; per $m = 1, 2, 3, \cdots$ non ci sono soluzioni non banali.

Per $k > 0$ si ponga $\rho = kr$. In tal caso risulta l'equazione di Bessel

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{m^2}{\rho^2}\right) R(\rho) = 0.$$

Quest'equazione ha una singola soluzione linearmente indipendente limitata se $\rho \to 0^+$. Con un'opportuna normalizzazione questa soluzione si chiama $J_m(\rho)$, la cosiddetta funzione di Bessel di ordine m. Infatti $J_m(\rho)$ ha le seguenti proprietà: (i) $J_0(0) = 1$, $J_1(0) = J_2(0) = \cdots = 0$, (ii) $J_m(\rho) \to 0$ se $\rho \to +\infty$, e (iii) $J_m(\rho)$ ha un numero infinito di zeri positivi: $0 < \nu_{m1} < \nu_{m2} < \cdots$.[1] Ciò implica che $R(L) = 0$ se e solo se $kL = \nu_{mn}$ per qualche $n \in \mathbf{N}$. In altre parole, si trovano le autofrequenze $k_{mn} = \nu_{mn}/L$ $(m, n \in \mathbf{N})$.

Infine otteniamo la soluzione generale

$$\psi(r, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{0n} J_0\left(\nu_{0n}\frac{r}{L}\right) + \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} \left[a_{mn}\cos m\theta + b_{mn}\mathrm{sen}\, m\theta\right] J_m\left(\nu_{mn}\frac{r}{L}\right).$$

Se consideriamo la condizione di Neumann al posto di quella di Dirichlet, arriviamo alla soluzione generale

$$\begin{aligned}\psi(r, \theta) = a_{00} &+ \sum_{n=1}^{\infty} a_{0n} J_0\left(\nu_{0n}\frac{r}{L}\right) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} \left[a_{mn}\cos m\theta + b_{mn}\mathrm{sen}\, m\theta\right] J_m\left(\nu_{mn}\frac{r}{L}\right),\end{aligned}$$

[1] Perchè gli zeri sono semplici?

dove $0 < \nu_{m1} < \nu_{m2} < \cdots$ sono gli zeri della derivata prima $J'_m(\rho)$ della funzione di Bessel di ordine m. La spiegazione per il termine costante a_{00} nello sviluppo per $\psi(r,\theta)$ è il fatto che la funzione costante soddisfa l'equazione di Helmholtz con la condizione di Neumann per $k = 0$.

3. Separazione in Coordinate Sferiche. Consideriamo l'equazione di Schrödinger

$$\Delta\psi + k^2\psi = V(\sqrt{x^2+y^2+z^2})\psi$$

nelle variabili (x, y, z) per $k > 0$, dove il potenziale V dipende soltanto dalla variabile $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$). È compreso il caso dell'equazione di Helmholtz ($V \equiv 0$). Ponendo

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)S(\theta, \varphi),$$

dove $R(r)$ e $S(\theta, \varphi)$ sono funzioni di classe C^2 in $r \in (0, +\infty)$ e $(\theta, \varphi) \in \mathbb{R}\times(0, \pi)$, si trova facilmente

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\Delta\psi}{\psi} + k^2 - V &= \frac{1}{R(r)}\left[\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right] \\ &+ \frac{1}{r^2S(\theta,\varphi)}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}^2\varphi}\frac{\partial^2 S}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\operatorname{sen}\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial S}{\partial\varphi}\right)\right] + k^2 - V(r). \end{aligned}$$

Quindi

$$\frac{1}{\operatorname{sen}^2\varphi}\frac{\partial^2 S}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\operatorname{sen}\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial S}{\partial\varphi}\right) = -CS(\theta,\varphi)$$

e

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{C}{r^2}\right)R(r) = V(r)R(r),$$

dove C è una costante.

L'equazione differenziale per $S(\theta, \varphi)$ ha soltanto una soluzione non banale per certi valori della costante C. Per tali valori di C le funzioni $S(\theta, \varphi)$ sono multipli delle cosiddette funzioni sferiche.

Consideriamo ora l'equazione per $S(\theta, \varphi)$. Ponendo

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

si trova

$$\frac{1}{\operatorname{sen}^2\varphi}\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{1}{\operatorname{sen}\varphi}\frac{d}{d\varphi}\left(\operatorname{sen}\varphi\frac{d\Phi}{d\varphi}\right) + C = 0.$$

Come di solito,

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = -m^2,$$

dove $m = 0, 1, 2, \cdots$. Utilizzando la trasformazione $X(\xi) = \Phi(\arccos\xi)$, $\xi = \cos\varphi$ arriviamo all'equazione differenziale

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{dX}{d\xi}\right) + \left(C - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)X(\xi) = 0.$$

Quest'equazione si chiama l'equazione per le funzioni associate di Legendre. Le sue soluzioni non banali limitate se $\xi \to \pm 1$ esistono soltanto per $C = l(l+1)$ dove $l = m, m+1, m+2, \cdots$. Nel caso particolare $m = 0$ si ottiene l'equazione di Legendre

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{dX}{d\xi}\right) + l(l+1)X(\xi) = 0,$$

dove $l = 0, 1, 2, \cdots$.

Ritorniamo all'equazione per $R(r)$ con $C = l(l+1)$:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + k^2R(r) = \left(V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r),$$

dove $m = -l, -l+1, \cdots, l-2, l-1, l$.

Nella meccanica quantistica il dominio dell'equazione originale è $\mathbb{R}^3$. Per descrivere gli stati limite di una particella che si muove in un campo di potenziale $V(r)$, si richiede che $\psi \in L_2(\mathbb{R}^3)$. Siccome $dxdydz = r^2 \text{sen}\,\varphi\, drd\theta d\varphi = -r^2\, drd\theta d\xi$ e lo sviluppo come funzione di θ è una serie di Fourier, risulta una condizione del tipo $r\psi(r) \in L_2(0, +\infty)$ per ψ che dipende soltanto da r. Inoltre, l'andamento asintoto $J_m(\rho) \sim \text{cost}_m\, \rho^m$ con costante $\text{cost}_m \neq 0$ implica la condizione al contorno $R(0^+)$ finito per $l = 0$ e $R(0^+) = 0$ per $l = 1, 2, \cdots$. Lasciamo perdere i dettagli.

Nel caso dell'equazione di Helmholtz $[V(r) \equiv 0]$ nel dominio $D = \{(x, y, z) : 0 \leq \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \leq L\}$ richiediamo che $R(0^+)$ sia finito e che $R(L) = 0$ [condizione di Dirichlet] oppure $R'(L) = 0$ [condizione di Neumann].