Polinômios de Legendre

Utilização de Polinômios Legendre e Associados de Legendre:

- Determinação das funções de onda dos elétrons nas órbitas de um átomo;

- Determinação das funções potenciais na geometria esfericamente simétrica, etc. (Veja livros textos de Mecânica Quântica e Eletrodinâmica);

- Em física de reatores nucleares, polinômios de Legendre tem uma importância extraordinária para as soluções de equações de transporte de nêutrons e definição das funções de espalhamento adequadas de nêutrons. (*) (**)

(*) P.F. Zweifel, **Reactor Physics,** McGraw-Hill Inc., New York (1973)

(**) Fikret Anli , Süleyman_Gungor, *Some useful properties of Legendre polynomials and its applications to neutron transport equation in slab geometry*, Appl. Math. Modelling, **31** (4) 2007, p. 727–733.

Recordando…

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0;$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\phi(\varphi).$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 sen\theta}\left[sen\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sen\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

Equação de Bessel Esférica

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

$k^2 > 0.$

$$\boxed{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(Q - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0}$$

Equação Associada de Legendre

$$\boxed{\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2}$$

$$Q = l(l+1).$$

l inteiro e positivo

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \qquad \textbf{(1)}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(Q - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0 \qquad \textbf{(2)}$$

- A solução de (1) é:

  $\boldsymbol{\Phi}(\varphi) = A\cos m\varphi + B\,sen\,m\varphi$

  - com m inteiro (solução periódica)

- Para (2) fazemos uma mudança de variável:

  $x = \cos\theta$

A equação diferencial resultante, para $Q = n^2$, é:

Equação de Legendre Associada

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \left(n^2 - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0$$

Para m = 0.

Equação de Legendre

$$(1-x^2)\frac{d^2P}{dx^2} - 2x\frac{dP}{dx} + n^2P = 0$$

Procurando solução do tipo:

$$P(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\, x^{j+\alpha}$$

Relação de Recorrência

$$a_{j+2} = \frac{j(j+1)-n^2}{(j+1)(j+2)} a_j$$

Para $\alpha = 0$, a_1 e a_2 não nulos

Convergência (teste da razão)

$$\frac{a_{j+2}}{a_j} = \frac{j(j+1)-n^2}{(j+1)(j+2)}x^2$$

- A equação de Legendre tem soluções limitadas no intervalo $-1 \le x \le +1$ $(-1 \le \cos\theta \le +1)$, se e somente se
  - $n^2 = l(l+1)$

  Sendo que l pode assumir somente valores inteiros e positivos, $l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$

- Desta forma, a equação de Legendre admite soluções na forma de séries de potências, ou seja, na forma polinomial.

Chega-se assim ao Polinômios de Legendre:

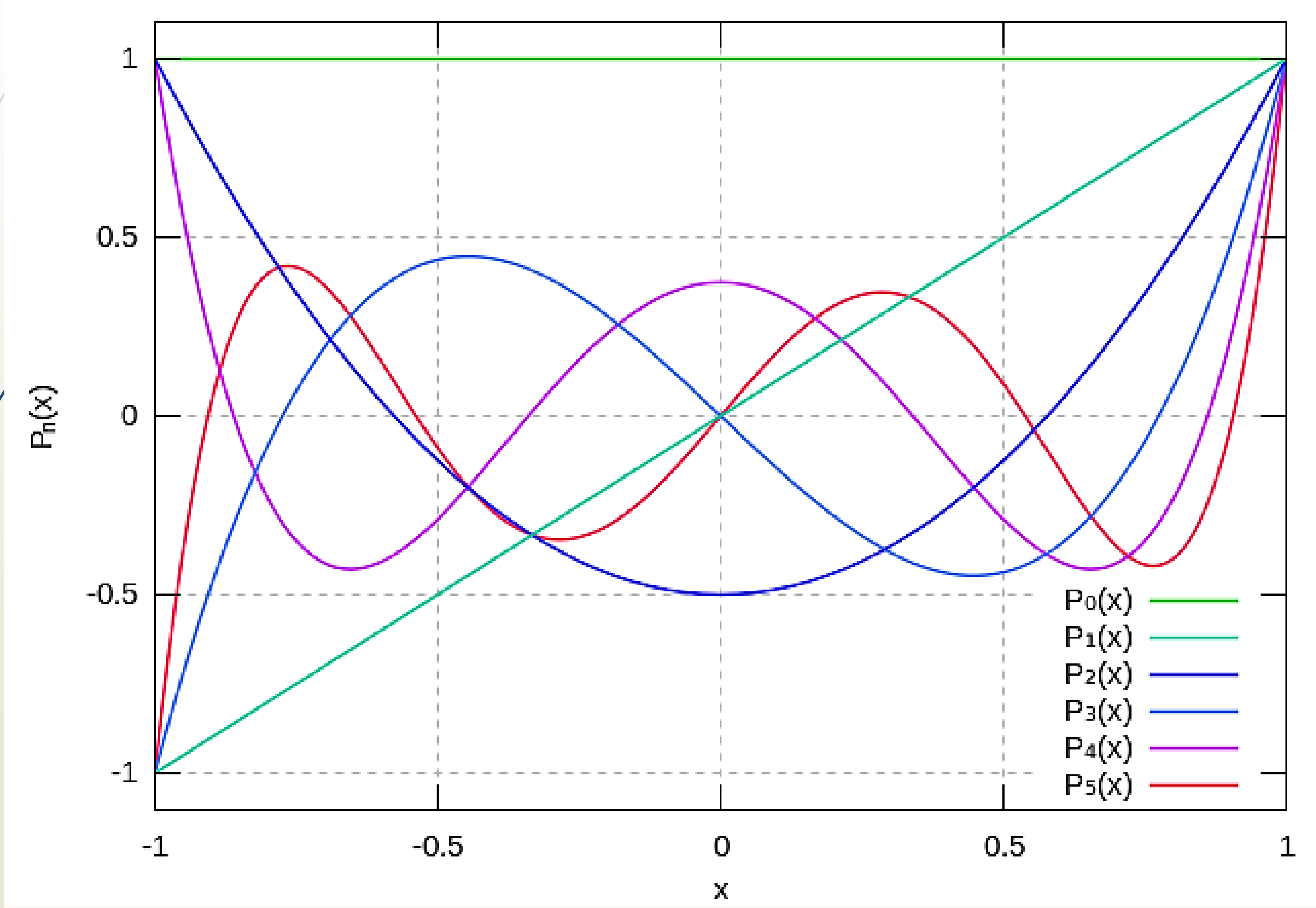
$$P_l(x) = \frac{1}{2^l} \sum_{m=0}^{\left[\frac{l}{2}\right]} \frac{(-1)^m (2l-2m)!}{m!\,(l-m)!\,(l-2m)!} x^{l-2m}$$

Onde: *[l/2] =l/2* **para n par e** *[l/2] =(l-1)/2*

$$\begin{aligned}
P_0(x) &= 1 \\
P_1(x) &= x \\
P_2(x) &= \tfrac{1}{2}(3x^2-1) \\
P_3(x) &= \tfrac{1}{2}(5x^3-3x) \\
P_4(x) &= \tfrac{1}{8}(35x^4-30x^2+3) \\
P_5(x) &= \tfrac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x) \\
P_6(x) &= \tfrac{1}{16}(231x^6-315x^4+105x^2-5).
\end{aligned}$$

Onde $x = \cos\theta$

$$P_0(x) = 1$$
$$P_1(x) = x$$
$$P_2(x) = \tfrac{1}{2}(3x^2 - 1)$$
$$P_3(x) = \tfrac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$
$$P_4(x) = \tfrac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$
$$P_5(x) = \tfrac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$



Função geratriz – G(x,t)

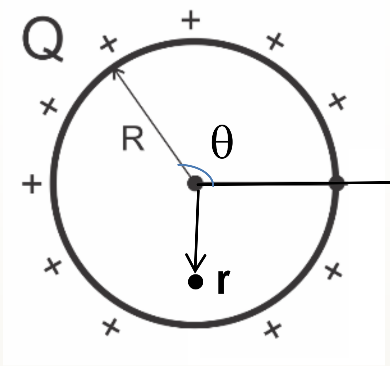
A função geratriz G(x,t) é tal ao expandir essa função em série de potências para | t | < 1, os polinômios de Legendre são os coeficientes da expansão.

$$G(x,t) = (1 - 2xt + t^2)^{-1/2}$$

$$G(x,t) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l$$

Em eletrostática e gravitação, vemos potenciais escalares do formato:

$$V = \frac{K}{d}$$



$$h = \frac{r}{R} \qquad x = \cos\theta$$

$$d = |\vec{R} - \vec{r}| = \sqrt{R^2 - 2Rr\cos\theta + r^2} = R\sqrt{1 - 2\tfrac{r}{R}\cos\theta + (\tfrac{r}{R})^2}$$

$$(1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum^{\infty} P_l(x) t^l$$

$$V = \frac{K}{R}\left(1 - 2hx + h^2\right)^{-1/2} = \frac{K}{R}\sum_{l=1}^{\infty} h^l P_l(x)$$

t* = *h

$$h = \frac{r}{R}$$

$$\boxed{V = K\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r^l P_l(\cos\theta)}{R^{l+1}}}$$

Relações de Recorrência obtidas a partir de G(x,t)

As fórmulas de recorrência podem ser obtidas pela derivação da função geratriz em relação a x e t.

$$lP_{l-1}(x) - (2l+1)xP_l(x) + (l+1)P_{l+1}(x) = 0$$

$$xP_l'(x) - P_{l-1}'(x) = lP_l(x)$$

$$P_l(x) - 2xP_l'(x) - P_{l+1}'(x) = P_{l-1}'(x)$$

$$(x^2-1)P_l'(x) = xlP_l(x) - lP_{l-1}(x)$$

$$P_{l+1}'(x) - xP_l'(x) = (l+1)P_l(x)$$

Ortogonalidade dos Polinômios de Legendre

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_l(x).P_n(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{l,n} \qquad \delta_{l,n} = \begin{cases} 1 \ se\ n = l \\ 0 \ se\ n \neq l \end{cases}$$

$$\bar{P}_l(x) = \left(\frac{2l+1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} P_l(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{P}_l(x).\bar{P}_n(x)dx = \delta_{l,n}$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \text{sen } nx \cos mx \, dx = 0 \quad (\text{para todos os } n, m)$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos nx \cos mx dx = \begin{cases} 0 & (\text{se } n \neq m) \\ 2\pi & (\text{se } n = m = 0) \\ \pi & (\text{se } n = m \neq 0) \end{cases}$$

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \text{sen } nx \text{ sen } mx \, dx = \begin{cases} 0 & (\text{se } n \neq m) \\ \pi & (\text{se } n = m) \end{cases}$$

Expansão de uma função em polinômios de Legendre

Seja *f(x)* uma função definida e contínua no intervalo *-1 ≥ x ≥ 1*. Esta função pode ser expandida numa série de polinômios de Legendre e a série converge no intervalo.

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(x)$$

$$A_l = \left(\frac{2l+1}{2}\right) \int_{-1}^{+1} f(x).P_l(x)dx$$

Observe a diferença entre a função geratriz G(x,t) e a expansão acima.

$$G(x,t) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l$$

$$G(x,t) = (1 - 2xt + t^2)^{-1/2}$$

Problema:

Uma função *f(x)* é expandida numa série de Legendre e a série converge no intervalo.

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(x)$$

Mostre que:

$$\int_{-1}^{+1} [f(x)]^2 dx = \sum_{0}^{\infty} \frac{2A_n^2}{2n+1}$$

FORMULA DE RODRIGUES para a funções de Legendre

$$P_l(x) = \frac{1}{l!\,2^l}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

Polinômios de Legendre Associados m≠0

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(Q-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0$$

$$x = cos\theta$$

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2}-2x\frac{d\Theta}{dx}+\left(n^2-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta=0$$

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \left(n^2 - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0$$

$$\boldsymbol{com \quad Q = n^2 = l(l+1)}$$

Procurar soluções do tipo:

$$\boldsymbol{\Theta(x) = A(1-x^2)^{\frac{m}{2}} f(x)}$$

$$\left(1-x^2\right)\frac{d^2f}{dx^2}-2(m+1)x\frac{df}{dx}+(l-m)(l+m+1)f=0$$

Para *m = 0* a equação diferencial acima é a Equação de Legendre e a solução é *f(x) = P_l(x).*

Se diferenciarmos a equação acima *m* vezes:

$$\left[\left(1-x^2\right)\frac{d^2}{dx^2}-2(m+1)x\frac{d}{dx}+[l-m)(l+m+1)]\right]\frac{d^mP_l}{dx^m}=0$$

$$\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2} - 2(m+1)x\frac{d}{dx} + [l-m)(l+m+1)]\right]\frac{d^m P_l}{dx^m} = 0$$

$$f(x) = \frac{d^m P_l}{dx^m}$$

E como: $\Theta(x) = A(1-x^2)^{\frac{m}{2}} f(x)$

$$\Theta_l^m(x) = A\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}} \times \frac{d^m P_l}{dx^m} = AP_l^m(x)$$

A partir da fórmula de Rodrigues para $P_l(x) \rightarrow$

$$P_l(x) = \frac{1}{l!\,2^l}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \left(n^2 - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0$$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{m > 0 \text{ ou } m < 0}$

$$\boldsymbol{P_l^m = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{1}{l!\,2^l}\frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}}(x^2-1)^l}$$

$$\boldsymbol{P_l^{-m} = (1-x^2)^{\frac{-m}{2}}\frac{1}{l!\,2^l}\frac{d^{-m+l}}{dx^{-m+l}}(x^2-1)^l}$$

$$\boldsymbol{-l \le m \le l}$$

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \left(n^2 - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0$$

$$\Theta_l^m(x) = A\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}} \times \frac{d^m P_l}{dx^m} = A P_l^m(x)$$

Forma normalizada dos Polinômios Associados de Legendre

$$\Theta_l^m(x) = \sqrt{\left(\frac{2l+1}{2}\right)\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(x),$$

Formula de Rodrigues para os Polinômios de Legendre Associados:

$$P_l(x) = \frac{1}{l!\,2^l}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

e

$$\boldsymbol{P_l^m(x) = \left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}} \times \frac{d^m P_l}{dx^m}(x)}$$

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l\,l!}(1-x^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l$$

$P_l^m(x)$

$$P_1^{-1}(x) = -\tfrac{1}{2}\, P_1^1(x)$$
$$P_1^0(x) = x$$
$$P_1^1(x) = -(1-x^2)^{1/2}$$
$$P_2^{-2}(x) = \tfrac{1}{24}\, P_2^2(x)$$
$$P_2^{-1}(x) = -\tfrac{1}{6}\, P_2^1(x)$$
$$P_2^0(x) = \tfrac{1}{2}\,(3x^2-1)$$
$$P_2^1(x) = -3x(1-x^2)^{1/2}$$
$$P_2^2(x) = 3(1-x^2)$$
$$P_3^{-3}(x) = -\tfrac{1}{720}\, P_3^3(x)$$
$$P_3^{-2}(x) = \tfrac{1}{120}\, P_3^2(x)$$
$$P_3^{-1}(x) = -\tfrac{1}{12}\, P_3^1(x)$$
$$P_3^0(x) = \tfrac{1}{2}\,(5x^3-3x)$$
$$P_3^1(x) = -\tfrac{3}{2}\,(5x^2-1)(1-x^2)^{1/2}$$
$$P_3^2(x) = 15x(1-x^2)$$
$$P_3^3(x) = -15(1-x^2)^{3/2}$$
$$P_4^{-4}(x) = \tfrac{1}{40320}\, P_4^4(x)$$
$$P_4^{-3}(x) = -\tfrac{1}{5040}\, P_4^3(x)$$
$$P_4^{-2}(x) = \tfrac{1}{360}\, P_4^2(x)$$

$P_l\ (x)$

$$P_0(x) = 1$$
$$P_1(x) = x$$
$$P_2(x) = \tfrac{1}{2}(3x^2-1)$$
$$P_3(x) = \tfrac{1}{2}(5x^3-3x)$$
$$P_4(x) = \tfrac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$
$$P_5(x) = \tfrac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x)$$
$$P_6(x) = \tfrac{1}{16}(231x^6-315x^4+105x^2-5)$$

$x = \cos\theta$

Relembrando ...

$$\nabla^2 \psi = 0$$

Coordenadas esféricas

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 sen\theta}\left[sen\theta \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial \theta}\left(sen\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{sen\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\phi(\varphi).$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2$$

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

Na parte angular podemos escrever:

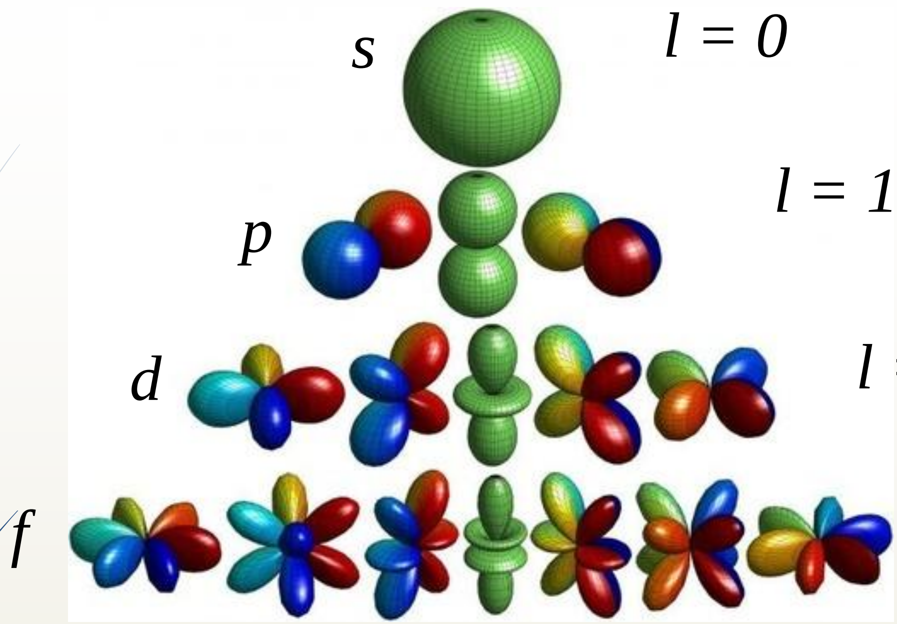
$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\phi(\varphi).$$

$$\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = \boxed{Y_l^m(\theta,\varphi)} = A_l^m P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}$$

Harmônicos Esféricos

$$A_l^m = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]$$

Orbitais dos elétrons



$l = 0$

$l = 1$ $\quad -1 \leq m \leq 1$

$l = 2$ $\quad -2 \leq m \leq 2$

$l = 3$ $\quad -3 \leq m \leq 3$

Outros:

Padrões de radiações emitidas por antenas.

Distribuição de campo elétrico ao redor de uma molécula, que é a soma de monopolos, dipolos, quadrupolos, etc