Классические ортогональные полиномы

1 Канонический вид полиномов гипергеометрического типа

Как было показано в первой главе, полиномы гипергеометрического типа $y_n(z)$ являются частными решениями уравнения

$$\sigma y'' + \tau y' + \lambda y = 0, \tag{1.1}$$

отвечающими $\lambda_n = -n\tau' - \dfrac{n(n-1)}{2}\sigma''$, где $\sigma(z)$ — полином не старше второй степени, а $\tau(z)$ — полином не старше первой степени.

Уравнение (1.1) можно записать в дивергентном виде

$$(\sigma\rho y')' + \lambda\rho y = 0, \tag{1.2}$$

где функция $\rho(z)$ удовлетворяет уравнению Пирсона $(\sigma\rho)' = \tau\rho$, из которого находим

$$\rho(z) = \frac{1}{\sigma(z)} \exp\left(\int \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} dz\right).$$

Явное выражение для полиномов гипергеометрического типа дает формула Родрига:

$$y_n(z) = \frac{B_n}{\rho(z)} \frac{d^n}{dz^z} \left(\sigma^n(z)\rho(z)\right), \tag{1.3}$$

где B_n — нормировочная постоянная.

Далее будем считать, что $\sigma(z)$ не имеет кратных корней, то есть будем рассматривать три возможных случая:

$$\text{а) } \sigma(z) = (b-z)(z-a), \qquad \text{б) } \sigma(z) = z-a, \qquad \text{в) } \sigma(z) = 1.$$

В случае (а) $\rho(z) = (b-z)^\alpha (z-a)^\beta$ с точностью до нормировочного множителя, где α, β — числа, выражающиеся через параметры a, b и коэффициенты линейной функции

$\tau(z)$. С помощью линейной замены независимой переменной $\tilde{z} = c_1 z + c_2$ уравнение (1.2) можно привести к каноническому виду

$$\frac{d}{d\tilde{z}}\left(\tilde{\sigma}\tilde{\rho}\frac{dy}{d\tilde{z}}\right) + \lambda\tilde{\rho}y = 0,$$

где $\tilde{\sigma} = 1 - \tilde{z}^2$, $\tilde{\rho} = (1-\tilde{z})^{\alpha}(1+\tilde{z})^{\beta}$.

Далее будем считать, что уравнение (1.2) уже приведено к каноническому виду, и значок «тильда» над функциями и независимой переменной опустим. Полиномиальные решения $y_n(z)$ уравнения (1.2) при $\sigma = 1 - z^2$ и $\rho = (1-z)^{\alpha}(1+z)^{\beta}$ называются полиномами Якоби. Нормировочный множитель для полиномов Якоби принято брать равным $B_n = \dfrac{(-1)^n}{2^n n!}$:

$$P_n^{(\alpha,\beta)} = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-z)^{-\alpha}(1+z)^{-\beta}\frac{d^n}{dz^n}\left\{(1-z)^{n+\alpha}(1+z)^{n+\beta}\right\}. \tag{1.4}$$

Важные частные случаи полиномов Якоби:

1) Полиномы Лежандра: $P_n(z) = P_n^{(0,0)}(z)$;

2) Полиномы Чебышева I-го рода:

$$T_n(z) = \frac{n!}{(1/2)_n}P_n^{(-1/2,-1/2)}(z)$$

и полиномы Чебышева II-го рода:

$$U_n(z) = \frac{(n+1)!}{(3/2)_n}P_n^{(1/2,1/2)}(z),$$

где использовано обозначение $(\alpha)_n = \dfrac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\alpha)}$;

3) Полиномы Гегенбауэра:

$$C_n^{\lambda}(z) = \frac{(2\lambda)_n}{(\lambda+1/2)_n}P_n^{(\lambda-1/2,\lambda-1/2)}(z).$$

В случае (б) получаем $\rho(z) = (z-a)^{\alpha}e^{\beta z}$, где числа α и β выражаются через параметр a и коэффициенты линейной функции $\tau(z)$. С помощью линейной замены независимой переменной $\tilde{z} = c_1 z + c_2$ уравнение (1.2) можно привести к каноническому виду

$$\frac{d}{d\tilde{z}}\left(\tilde{\sigma}\tilde{\rho}\frac{dy}{d\tilde{z}}\right) + \lambda\tilde{\rho}y = 0,$$

где $\tilde{\sigma} = \tilde{z}$, $\tilde{\rho} = \tilde{z}^{\alpha}e^{-\tilde{z}}$.

Пусть уравнение (1.2) приведено к каноническому виду, а «тильда» для краткости опущена. Полиномиальные решения соответствующего уравнения с нормировочными множителями $B_n = \dfrac{1}{n!}$ называются полиномами Лагерра и обозначаются $L_n^{\alpha}(z)$:

$$L_n^{\alpha}(z) = \frac{1}{n!}e^{z}z^{-\alpha}\frac{d^n}{dz^n}\left(z^{n+\alpha}e^{-z}\right). \tag{1.5}$$

В случае, когда $\sigma = 1$ (случай (в)) функция $\rho(z)$ имеет вид $\rho(z) = e^{\alpha z^2 + \beta z}$. С помощью линейной замены $\tilde{z} = c_1 z + c_2$ функцию ρ можно привести к каноническому виду $\tilde{\rho} = e^{-\tilde{z}^2}$.

Пусть уравнение (1.2) приведено к каноническому виду. Его полиномиальные частные решения с нормировочными множителями $B_n = (-1)^n$ называются полиномами Эрмита и обозначаются $H_n(z)$:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-z^2}. \tag{1.6}$$

2 Ортогональность полиномов гипергеометрического типа

Если подчинить функцию $\rho(z)$ некоторым дополнительным условиям, то можно добиться ортогональности рассмотренных выше полиномов гипергеометрического типа на интервале (a, b).

Теорема 2.1 *Если функция $\rho(z)$ удовлетворяет на концах некоторого интервала (a, b) условиям:*

$$\sigma(z)\rho(z)z^k\Big|_{z=a,\, z=b} = 0, \quad \text{где} \quad k = 0, 1, ..., \tag{2.1}$$

то полиномы гипергеометрического типа $y_n(z)$, соответствующие различным λ_n, будут ортогональны на интервале (a, b) с весом $\rho(z)$:

$$\int_a^b y_n(z) y_m(z) \rho(z) dz = 0, \quad n \neq m. \tag{2.2}$$

Доказательство. Рассмотрим уравнения для y_n и y_m:

$$(\sigma\rho y_n')' + \lambda_n \rho y_n = 0, \qquad (\sigma\rho y_m')' + \lambda_m \rho y_m = 0 \quad \Rightarrow$$

$$(\lambda_m - \lambda_n)\rho y_n y_m = y_m(\sigma\rho y_n')' - y_n(\sigma\rho y_m')' = [\sigma\rho \underbrace{(y_m y_n' - y_n y_m')}_{W[y_m, y_n]}]',$$

где $W[y_m, y_n]$ — определитель Вронского:

$$W[y_m, y_n] = \begin{vmatrix} y_m & y_m' \\ y_n & y_n' \end{vmatrix}.$$

Так как y_n и y_m — полиномы, то $W[y_m, y_n]$ также является полиномом, а значит в силу условия (2.1) получаем:

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b \rho y_n y_m dz = \sigma\rho W[y_m, y_n]\big|_a^b = 0,$$

откуда следует (2.2). ■

Для полиномов Якоби условие (2.1) принимает вид

$$\sigma\rho z^k\Big|_{z=a,\,z=b} = (1-z)^{\alpha+1}(1+z)^{\beta+1}z^k\Big|_{z=a,\,z=b} = 0, \quad k=0,1,2,...$$

Оно выполнено при $a=-1$, $b=1$, $\alpha>-1$, $\beta>-1$.

Для полиномов Лагерра условие (2.1) принимает вид

$$\sigma\rho z^k\Big|_{z=a,\,z=b} = z^{\alpha+1+k}e^{-z}\Big|_{z=a,\,z=b} = 0, \quad k=0,1,2,...$$

Оно выполнено при $a=0$, $b=+\infty$, $\alpha>-1$.

Для полиномов Эрмита условие (2.1) принимает вид

$$\sigma\rho z^k\Big|_{z=a,\,z=b} = z^k e^{-z^2}\Big|_{z=a,\,z=b} = 0, \quad k=0,1,2,...$$

Оно выполнено при $a=-\infty$, $b=+\infty$.

Полиномы гипергеометрического типа, для которых выполнено условие (2.1), называются *классическими ортогональными полиномами*. Из свойств производных полиномов гипергеометрического типа следует, что производные $y_n^{(m)}$ классических ортогональных полиномов y_n также являются классическими ортогональными полиномами на том же интервале (a,b), что и полиномы y_n, с весом $\rho_m=\sigma^m\rho$.

Утверждение 2.2 *Задание интервала (a,b) и веса $\rho(x)$ определяет с точностью до нормировочного множителя систему полиномов всех степеней $\{p_n(x)\}$, удовлетворяющих условиям ортогональности*

$$\int\limits_a^b p_n(x)p_m(x)\rho(x)dx = 0, \quad n\neq m. \tag{2.3}$$

Доказательство. Пусть существуют две системы полиномов $\{p_n(x)\}$ и $\{\tilde{p}_n(x)\}$, $n=0,1,...$, удовлетворяющие условиям (2.3). Тогда имеют место равенства:

$$\tilde{p}_n(x) = \sum_{k=0}^{n} C_{kn}p_k(x),$$

где коэффициенты C_{kn} в силу (2.3) имеют вид

$$C_{kn} = \|p_k\|^{-2}\int\limits_a^b \tilde{p}_n(x)p_k(x)\rho(x)dx.$$

Так как для полиномов $\{\tilde{p}_n(x)\}$, $n=0,1,...$, также выполняются условия (2.3), получаем

$$p_k(x) = \sum_{m=0}^{k}\tilde{C}_{km}\tilde{p}_m(x) \quad\Rightarrow\quad C_{kn} = \|p_k\|^{-2}\sum_{m=0}^{k}\tilde{C}_{km}\|\tilde{p}_n\|^2\delta_{n,m} = 0,$$

если $k<n$. Следовательно, $\tilde{p}_n(x)=C_{nn}p_n(x)$, что и требовалось доказать. ■

Пример 2.1. *Используя единственность системы ортогональных полиномов при заданном весе и интервале, получите выражение для полиномов Чебышева I-го рода $T_n(x)$, ортогональных на интервале $(-1, 1)$ с весом $(1-x^2)^{-1/2}$.*

Решение. Необходимо найти систему полиномов $T_n(x)$, удовлетворяющих условиям

$$\int_{-1}^{1} T_n(x)T_m(x)(1-x^2)^{-1/2}dx = 0, \qquad n \neq m. \tag{2.4}$$

Пусть $x = \cos\varphi$, где $\varphi \in [0, \pi]$. Тогда $(1-x^2)^{-1/2} = \sin^{-1}\varphi$, $dx = -\sin\varphi d\varphi$, и условия (2.4) принимают вид:

$$\int_{0}^{\pi} T_n(\cos\varphi)T_m(\cos\varphi)d\varphi = 0, \qquad n \neq m.$$

Поскольку имеют место равенства

$$\int_{0}^{\pi} \cos n\varphi \cos m\varphi d\varphi = 0, \qquad n \neq m,$$

и функция $\cos n\varphi$ является полиномом n-й степени относительно $\cos\varphi$, то в силу единственности (с точностью до нормировочного множителя) полиномов, ортогональных на интервале $(0, \pi)$ с весом 1 получаем, что

$$T_n(\cos\varphi) = A_n \cos(n\varphi) \quad \Rightarrow \quad T_n(x) = A_n \cos(n \cdot \mathrm{arccos} x).$$

Непосредственно из формулы Родрига для полиномов Чебышева I-го рода следует, что $T_n(1) = 1$, откуда получаем $A_n = 1$. Таким образом,

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \mathrm{arccos} x).$$

Замечание 2.3 *Коэффициент при старшей степени в $T_n(x)$ равен 2^{n-1}. Полиномы $\tilde{T}_n(x) = 2^{1-n}T_n(x)$ широко используются при аппроксимации функций, так как для них достигается минимум выражения*

$$\max_{-1 \leqslant x \leqslant 1} |q_n(x)|,$$

где $q_n(x)$ — полином степени n с единичным коэффициентом при старшей степени.

3 Основные характеристики классических ортогональных полиномов

Пусть $\{y_n(z)\}$ — система классических полиномов, ортогональных на (a, b) с весом $\rho(z)$, причем $y_n(z) = a_n z^n + b_n z^{n-1} + ...$, то есть a_n — коэффициент при старшей степени полинома $y_n(z)$, а b_n — коэффициент при степени $(n-1)$. Квадратом нормы полинома $y_n(z)$ называется число

$$d_n^2 = \int\limits_a^b y_n^2(z)\rho(z)dz.$$

Значения основных параметров для полиномов Якоби, Лагерра и Эрмита приведены в таблице 1.

Таблица 1: Основные характеристики классических ортогональных полиномов

$y_n(z)$	$P_n^{(\alpha,\beta)}(z),\ \ \alpha > -1, \beta > -1$	$L_n^\alpha(z),\ \ \alpha > -1$	$H_n(z)$
(a, b)	$(-1, 1)$	$(0, +\infty)$	$(-\infty, +\infty)$
$\rho(z)$	$(1-z)^\alpha(1+z)^\beta$	$z^\alpha e^{-z}$	e^{-z^2}
$\sigma(z)$	$1 - z^2$	z	1
$\tau(z)$	$\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)z$	$1 + \alpha - z$	$-2z$
λ_n	$n(n + \alpha + \beta + 1)$	n	$2n$
B_n	$\dfrac{(-1)^n}{2^n n!}$	$\dfrac{1}{n!}$	$(-1)^n$
a_n	$\dfrac{\Gamma(2n + \alpha + \beta + 1)}{2^n n!\Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}$	$\dfrac{(-1)^n}{n!}$	2^n
b_n	$\dfrac{(\alpha - \beta)\Gamma(2n + \alpha + \beta)}{2^n(n-1)!\Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}$	$(-1)^{n-1}\dfrac{n + \alpha}{(n-1)!}$	0
d_n^2	$\dfrac{2^{\alpha+\beta+1}\Gamma(n + \alpha + 1)\Gamma(n + \beta + 1)}{n!(2n + \alpha + \beta + 1)\Gamma(n + \alpha + \beta + 1)}$	$\dfrac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!}$	$2^n n!\sqrt{\pi}$

Для классических ортогональных полиномов $y_n(z)$ имеет место рекуррентное соотношение:

$$zy_n(z) = \alpha_n y_{n+1}(z) + \beta_n y_n(z) + \gamma_n y_{n-1}(z). \tag{3.1}$$

Сравнивая слагаемые с одинаковыми степенями в правой и левой частях равенства

(3.1), получаем:

$$\alpha_n = \frac{a_n}{a_{n+1}}, \qquad \beta_n = \frac{b_n}{a_n} - \alpha_n \frac{b_{n+1}}{a_n} = \frac{b_n}{a_n} - \frac{b_{n+1}}{a_{n+1}}.$$

В силу ортогональности полиномов $y_n(z)$ получаем:

$$\gamma_n = \frac{1}{d_{n-1}^2} \int\limits_a^b \underbrace{z y_{n-1}(z)}_{\alpha_{n-1} y_n(z) + \ldots} y_n(z) \rho(z) dz = \alpha_{n-1} \frac{d_n^2}{d_{n-1}^2} = \frac{a_{n-1}}{a_n} \frac{d_n^2}{d_{n-1}^2}.$$

4 Поведение второго решения дифференциального уравнения для классических ортогональных полиномов, линейно независимого по отношению к полиномиальному

Для исследования линейно независимого по отношению к полиномиальному решения уравнения гипергеометрического типа

$$\sigma y'' + \tau y' + \lambda_n y = 0, \qquad \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''$$

воспользуемся тем, что любые два линейно независимые решения $y_1(z)$ и $y_2(z)$ уравнения

$$\frac{d}{dz}\left(k(z)\frac{dy}{dz}\right) - q(z)y = 0 \tag{4.1}$$

связаны соотношением $k(z)W[y_1(z), y_2(z)] = C$, где $C \neq 0$ — некоторая постоянная. На основании равенства

$$\frac{d}{dz}\left[\frac{y_2(z)}{y_1(z)}\right] = \frac{W[y_1(z), y_2(z)]}{y_1^2(z)}$$

получаем:

$$y_2(z) = y_1(z)\left\{\frac{y_2(z_0)}{y_1(z_0)} + \int\limits_{z_0}^{z} \frac{W[y_1(s), y_2(s)]}{y_1^2(s)} ds\right\}, \tag{4.2}$$

где z_0 таково, что на отрезке $[z_0, z]$ функция $y_1(z)$ не имеет нулей. Итак, если мы хотим записать выражение для линейно независимого по отношению к $y_1(z)$ решения $y_2(z)$ уравнения (4.1), то слагаемое

$$y_1(z)\frac{y_2(z_0)}{y_1(z_0)}$$

в выражении (4.2) можно отбросить, в результате чего получим

$$y_2(z) = C y_1(z) \int\limits_{z_0}^{z} \frac{ds}{k(s) y_1^2(s)}.$$

Теорема 4.1 *Пусть существует такая точка a, что функция $k(z)$ и решение $y_1(z)$ уравнения (4.1) представимы в виде*

$$k(z) = (z-a)^{\mu} r(z), \quad r(a) \neq 0,$$

$$y_1(z) = (z-a)^m v_1(z), \quad v_1(a) \neq 0$$

при $z \to a$, где $r(z)$ и $v_1(z)$ — непрерывные в некоторой окрестности точки $z = a$ функции. Тогда линейно независимое по отношению к $y_1(z)$ решение $y_2(z)$ уравнения (4.1) имеет вид:

$$y_2(z) = \begin{cases} (z-a)^{1-m-\mu} v_2(z), & \text{если } 2m+\mu \neq 1, \\ (z-a)^m \ln(z-a) v_2(z), & \text{если } 2m+\mu = 1, \end{cases}$$

где $v_2(z)$ — непрерывная в некоторой окрестности точки $z = a$ функция, такая что $v_2(a) \neq 0$.

Доказательство. 1) Пусть $2m+\mu > 1$. Тогда предел отношения

$$\frac{y_2(z)}{(z-a)^{1-m-\mu}} = \frac{C v_1(z) \displaystyle\int_{z_0}^{z} \frac{ds}{r(s) v_1^2(s) (s-a)^{2m+\mu}}}{(z-a)^{1-2m-\mu}}$$

при $z \to a$ можно найти по правилу Лопиталя:

$$\lim_{z\to a} \frac{y_2(z)}{(z-a)^{1-m-\mu}} = C v_1(a) \lim_{z\to a} \frac{\displaystyle\int_{z_0}^{z} \frac{ds}{r(s) v_1^2(s)(s-a)^{2m+\mu}}}{(z-a)^{1-2m-\mu}} =$$

$$= C v_1(a) \lim_{z\to a} \frac{\dfrac{1}{r(z) v_1^2(z)(z-a)^{2m+\mu}}}{(1-2m-\mu)(z-a)^{-2m-\mu}} = \frac{C}{r(a) v_1(a)(1-2m-\mu)} = const.$$

2) Пусть $2m+\mu < 1$. Тогда интеграл

$$I(z) = \int_{z_0}^{z} \frac{ds}{r(s) v_1^2(s)(s-a)^{2m+\mu}}$$

сходится, и в нем можно взять $z_0 = a$. По теореме о среднем получаем:

$$y_2(z) = C(z-a)^m v_1(z) \int_a^z \frac{ds}{r(s) v_1^2(s)(s-a)^{2m+\mu}} = \frac{C(z-a)^m v_1(z)}{r(s^*) v_1^2(s^*)} \int_a^z \frac{ds}{(s-a)^{2m+\mu}} =$$

$$= \frac{C(z-a)^m v_1(z)}{(1-2m-\mu) r(s^*) v_1^2(s^*)} \left[(s-a)^{1-2m-\mu} \right]\Big|_a^z = (z-a)^{1-m-\mu} \underbrace{\frac{C v_1(z)}{(1-2m-\mu) r(s^*) v_1^2(s^*)}}_{= v_2(z)},$$

где $s^* \in (a, z)$. В данном случае $y_2(a) = 0$.

3) Если $2m + \mu = 1$, то по теореме о среднем найдется такое $s^* \in (a, z)$, что

$$\int\limits_{z_0}^{z} \frac{ds}{r(s)v_1^2(s)(s-a)^{2m+\mu}} = \int\limits_{z_0}^{z} \frac{ds}{r(s)v_1^2(s)(s-a)} = \frac{1}{r(s^*)v_1^2(s^*)} \ln(s-a)\big|_{z_0}^{z}.$$

Так как мы ищем линейно независимое по отношению к $y_1(z)$ решение, то

$$y_2(z) = (z-a)^m \ln(z-a) \underbrace{\frac{Cv_1(z)}{r(s^*)v_1^2(s^*)}}_{=v_2(z)},$$

что и требовалось доказать. ■

Применим доказанную теорему для исследования поведения в окрестности особых точек решений уравнения гипергеометрического типа, линейно независимых по отношению к полиномиальным решениям.

1) *Решения, линейно независимые по отношению к полиномам Якоби.*

В случае $\sigma = 1 - z^2$, $\rho = (1-z)^\alpha(1+z)^\beta$ получаем $k(z) = \sigma(z)\rho(z) = (1-z)^{\alpha+1}(1+z)^{\beta+1}$. Следовательно, $\mu = \alpha + 1$ в окрестности особой точки $z = 1$ и $\mu = \beta + 1$ в окрестности особой точки $z = -1$. Так как $P_n^{\alpha,\beta}(\pm 1) \neq 0$, то $m = 0$ как в окрестности $z = 1$, так и в окрестности $z = -1$. Таким образом, линейно независимое к $P_n^{\alpha,\beta}(z)$ решение уравнения ведет себя как $(1-z)^{-\alpha}$ в окрестности $z = 1$ и как $(1+z)^{-\beta}$ в окрестности $z = -1$, если $\alpha \neq 0$ и $\beta \neq 0$. Если $\alpha = 0$, то $y_2(z)$ ведет себя как $\ln(1-z)$ в окрестности $z = 1$, и если $\beta = 0$, то $y_2(z)$ ведет себя как $\ln(1+z)$ в окрестности $z = -1$. Это означает, что функция $\sqrt{\rho(z)}y_2(z)$ не ограничена при $z \to \pm 1$ в случае $\alpha \geqslant 0$ и $\beta \geqslant 0$.

2) *Решения, линейно независимые по отношению к полиномам Лагерра.*

В случае $\sigma = z$, $\rho = z^\alpha e^{-z}$ получаем $k(z) = \sigma(z)\rho(z) = z^{\alpha+1}e^{-z}$. Воспользуемся теоремой 4.1 в окрестности особой точки $z = 0$. В данном случае $\mu = \alpha + 1$, $m = 0$. Следовательно, если $\alpha \neq 0$, то при $z \to 0$ линейно независимое по отношению к полиномам Лагерра $L_n^\alpha(z)$ решение уравнения $y_2(z)$ ведет себя как $z^{-\alpha}$, и если $\alpha = 0$, то $y_2(z) \sim \ln z$ при $z \to 0$. Это означает, что функция $\sqrt{\rho(z)}y_2(z)$ не ограничена при $z \to 0$ в случае $\alpha \geqslant 0$.

Рассмотрим поведение y_2, линейно независимого по отношению к $L_n^\alpha(z)$, при $z \to \infty$. Пусть точка z_0 лежит правее всех нулей полинома $y_1(z) = L_n^\alpha(z)$. Интеграл

$$I(z) = \int\limits_{z_0}^{z} \frac{ds}{k(s)y_1^2(s)} = \int\limits_{z_0}^{z} \frac{e^s}{s^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(s)\right]^2} ds$$

расходится при $z \to \infty$. Для того, чтобы оценить скорость роста функции $y_2(z) = Cy_1(z)I(z)$, воспользуемся правилом Лопиталя для вычисления следующего предела:

$$\lim_{z\to\infty}\frac{\displaystyle\int\limits_{z_0}^{z}\frac{e^s ds}{s^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(s)\right]^2}}{\dfrac{e^z}{z^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(z)\right]^2}}=\lim_{z\to\infty}\frac{\dfrac{e^z}{z^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(z)\right]^2}}{\dfrac{e^z}{z^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(z)\right]^2}+e^z\underbrace{\left(z^{-\alpha-1}\left[L_n^\alpha(z)\right]^{-2}\right)'}_{\sim z^{-(2n+\alpha+2)}}}=$$

$$=\lim_{z\to\infty}\frac{1}{1+\underbrace{z^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(z)\right]^2\left(z^{-\alpha-1}\left[L_n^\alpha(z)\right]^{-2}\right)'}_{\sim z^{-1}}}=1.$$

Следовательно, функция $y_2(z)=Cy_1(z)I(z)$ растет как $e^z z^{-(1+\alpha+n)}$ при $z\to\infty$. Это означает, что функция $\sqrt{\rho(z)}y_2(z)$ ведет себя как $e^{z/2}z^{-(1+\alpha/2+n)}$ при $z\to\infty$, то есть интеграл

$$\int\limits_0^\infty y_2^2(z)\rho(z)dz$$

расходится.

3) *Решения, линейно независимые по отношению к полиномам Эрмита.*

В случае $\sigma=1$, $\rho=e^{-z^2}$ получаем $k(z)=\sigma(z)\rho(z)=e^{-z^2}$. Исследуем поведение решения $y_2(z)$, линейно независимого по отношению к полиномам $H_n(z)$, при $z\to+\infty$. Пусть z_0 лежит правее всех нулей $H_n(z)$. Тогда решение y_2 имеет вид:

$$y_2(z)=CH_n(z)\int\limits_{z_0}^{z}\frac{e^{s^2}ds}{H_n^2(s)}.$$

Интеграл в выражении для $y_2(z)$ расходится при $z\to+\infty$. Оценим скорость роста y_2, используя правило Лопиталя:

$$\lim_{z\to+\infty}\frac{\displaystyle\int\limits_{z_0}^{z}\frac{e^{s^2}ds}{H_n^2(s)}}{\dfrac{e^{z^2}}{zH_n^2(z)}}=\lim_{z\to+\infty}\frac{\dfrac{e^{z^2}}{H_n^2(z)}}{\dfrac{2ze^{z^2}}{zH_n^2(z)}+e^{z^2}\underbrace{\left(z^{-1}H_n^{-2}(z)\right)'}_{\sim z^{-2n-2}}}=$$

$$=\lim_{z\to+\infty}\frac{1}{2+\underbrace{H_n^2(z)\left(z^{-1}H_n^{-2}(z)\right)'}_{\sim z^{-2}}}=\frac{1}{2}.$$

Следовательно, функция $y_2(z)$ ведет себя как $z^{-(1+n)}e^{z^2}$ при $z\to+\infty$. Аналогичное поведение имеет место при $z\to-\infty$. Это означает, что функция $\sqrt{\rho}y_2$ растет как $z^{-(1+n)}e^{z^2/2}$ при $z\to\pm\infty$, то есть интеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} y_2^2(z)\rho(z)dz$$

расходится.

5 Задача Штурма-Лиувилля для классических ортогональных полиномов

Теорема 5.1 *Система классических ортогональных полиномов* $\{y_n(x)\}$ *является полной на интервале* (a,b) *для непрерывных функций* $f(x)$, *удовлетворяющих требованию квадратичной интегрируемости*

$$\int\limits_a^b f^2(x)\rho(x)dx < \infty, \tag{5.1}$$

то есть из равенств

$$\int\limits_a^b f(x)y_n(x)\rho(x)dx = 0, \quad n = 0, 1, 2, ... \tag{5.2}$$

вытекает равенство $f(x) \equiv 0$ *при всех* $x \in (a,b)$.

Доказательство. Предположим, что существует $f(x) \not\equiv 0$, непрерывная на (a,b) и удовлетворяющая условиям (5.1), (5.2). Рассмотрим функцию

$$F(z) = \int\limits_a^b e^{izx} f(x)\rho(x)dx, \tag{5.3}$$

где $|z| \leqslant C$, $C > 0$ — некоторое число. Для функции $F(z)$ имеют место оценки:

$$|F(z)| \leqslant \int\limits_a^b e^{C|x|}|f(x)|\rho(x)dx \leqslant \sqrt{\int\limits_a^b e^{2C|x|}\rho(x)dx} \cdot \underbrace{\sqrt{\int\limits_a^b f^2(x)\rho(x)dx}}_{< \infty \text{ по условию}}.$$

Так как

$$\rho(x) = \left[\begin{array}{l} (b-x)^\alpha (x-a)^\beta, \quad \alpha > -1, \ \beta > -1 \text{ при конечных } a, \, b, \\ (x-a)^\alpha e^{-x}, \quad \alpha > -1, \text{ при конечном } a \text{ и } b = +\infty, \\ e^{-x^2}, \text{ при } \ a = -\infty, \ b = +\infty, \end{array} \right.$$

то интеграл

$$\int\limits_a^b e^{2C|x|}\rho(x)dx < \infty$$

при любом конечном $C > 0$ в случае, когда a и b конечны, либо $a = -\infty$, $b = +\infty$, и при некотором конечном $C > 0$ в случае конечного a и $b = +\infty$. Таким образом, интеграл $F(z)$ сходится равномерно по z при $|z| \leqslant C < C_0$, а значит является аналитической функцией переменной z в круге $|z| \leqslant C < C_0$. Следовательно, функцию $F(z)$ можно разложить в ряд Тейлора :

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} F^{(n)}(0)\frac{z^n}{n!}$$

в круге $|z| \leqslant C < C_0$, причем производные $F^{(n)}(z)$ можно получить дифференцированием интеграла (5.3) по параметру z. В самом деле, получаемые формальным дифференцированием по z интегралы

$$F^{(n)}(z) = \int\limits_a^b (ix)^n e^{izx} f(x)\rho(x)dx$$

сходятся равномерно в области $|z| \leqslant C < C_0$:

$$|F^{(n)}(z)| \leqslant \underbrace{\sqrt{\int\limits_a^b |x|^{2n} e^{2C|x|}\rho(x)dx}}_{\text{сходится}} \cdot \underbrace{\sqrt{\int\limits_a^b f^2(x)\rho(x)dx}}_{\text{сходится по условию}} .$$

Следовательно,

$$F^{(n)}(0) = \int\limits_a^b (ix)^n f(x)\rho(x)dx,$$

причем полином $(ix)^n$ можно представить в виде линейной комбинации классических ортогональных полиномов $\{y_n\}$:

$$(ix)^n = \sum_{k=0}^{n} C_{nk} y_k(x).$$

Но тогда в силу условий ортогональности (5.2) получаем, что $F^{(n)}(0) = 0$ для всех $n = 0, 1, \ldots$ Это означает, что $F(z) \equiv 0$ в круге $|z| \leqslant C < C_0$. Согласно принципу аналитического продолжения $F(z) \equiv 0$ при любом z.

Доопределим функцию $\rho(x)f(x)$ нулем при $x < a$ и $x > b$. Тогда

$$F(z) = \int\limits_a^b e^{ixz} f(x)\rho(x)dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ixz} f(x)\rho(x)dx$$

представляет собой Фурье-образ функции $f(x)\rho(x)$. Согласно равенству Парсеваля

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} [f(x)\rho(x)]^2\, dx = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |F(z)|^2 dz = 0,$$

откуда получаем, что

$$\int\limits_a^b [f(x)\rho(x)]^2\, dx = 0.$$

Так как по предположению теоремы $f(x)$ — непрерывная на (a, b) функция, то $f(x) \equiv 0$ на всем интервале (a, b), что противоречит исходному предположению. ■

Теорема 5.2 *Пусть функции $\sigma(x)$ и $\tau(x)$ в уравнении гипергеометрического типа*

$$\sigma y'' + \tau y' + \lambda y = 0 \tag{5.4}$$

таковы, что функция $\rho(x)$, удовлетворяющая уравнению Пирсона $(\sigma\rho)' = \tau\rho$, на некотором интервале (a, b) является ограниченной, принимает неотрицательные значения и удовлетворяет условию

$$\sigma(x)\rho(x)x^k\Big|_{x=a,\,x=b} = 0, \quad k = 0, 1, ...$$

Тогда нетривиальные решения $y(x)$ уравнения (5.4), удовлетворяющие условиям ограниченности и квадратичной интегрируемости на $[a, b]$ функции $\sqrt{\rho}y$, существуют лишь при

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'', \quad n = 0, 1, ... \tag{5.5}$$

и имеют вид

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)}\frac{d^n}{dx^n}\left(\sigma^n(x)\rho(x)\right), \tag{5.6}$$

то есть являются классическими полиномами, ортогональными на интервале (a, b) с весом $\rho(x)$.

Замечание 5.3 *Если a и b конечны, то условие*

$$\int_a^b y^2(x)\rho(x)dx < \infty$$

может быть опущено.

Доказательство. 1) Пусть $\lambda = \lambda_n$. Тогда полином $y_n(x)$, определяемый формулой Родрига (5.6), удовлетворяет уравнению (5.4) и условиям

$$\left|\sqrt{\rho(x)}y_n(x)\right|_{x=a,\ x=b} < \infty, \quad \int_a^b y_n^2(x)\rho(x)dx < \infty. \tag{5.7}$$

Нужно показать, что других собственных функций, отвечающих λ_n и удовлетворяющих условиям (5.7), нет. Пусть $y(x)$ — линейно независимое по отношению к y_n решения уравнения (5.4), отвечающее $\lambda = \lambda_n$. Рассмотрим три возможных случая:
а) Если a и b конечные, то $\rho(x) = (b-x)^\alpha(x-a)^\beta$. По условию теоремы функция $\rho(x)$ должна быть ограниченной на $[a, b]$, что возможно только при $\alpha \geqslant 0$, $\beta \geqslant 0$. На основании теоремы о поведении линейно независимого к полиномиальному решения уравнения (5.4) получаем, что в окрестности $x = a$ функция $\sqrt{\rho}y$ ведет себя как

$$\sqrt{\rho}y \sim \left[\begin{array}{l} (x-a)^{-\beta/2}, \text{ если } \beta > 0, \\ \ln(x-a), \text{ если } \beta = 0, \end{array}\right.$$

а в окрестности $x = b$ как

$$\sqrt{\rho}y \sim \left[\begin{array}{l} (b-x)^{-\alpha/2}, \ \text{если } \alpha > 0, \\ \ln(b-x), \ \text{если } \alpha = 0. \end{array} \right.$$

б) Если a конечно, а $b = +\infty$, то $\rho(x) = (x-a)^{\alpha} e^{-\beta x}$. Функция $\rho(x)$ будет ограниченной на $[a, +\infty)$, только если $\alpha \geqslant 0$, $\beta > 0$. В окрестности $x = a$ функция $\sqrt{\rho}y$ ведет себя как

$$\sqrt{\rho}y \sim \left[\begin{array}{l} (x-a)^{-\alpha/2}, \ \text{если } \alpha > 0, \\ \ln(x-a), \ \text{если } \alpha = 0, \end{array} \right.$$

а при $x \to +\infty$ экспоненциально растет.

3) Если $a = -\infty$, $b = +\infty$, то, как было показано при исследовании поведения решений уравнения гипергеометрического типа, линейно независимых по отношению к полиномам Эрмита, функция $\sqrt{\rho}y$ растет как $e^{\alpha x^2}$, $\alpha > 0$, при $x \to \pm\infty$.

Таким образом, условия (5.7) для $y(x)$, линейно независимого по отношению к $y_n(x)$, не выполняются.

2) Пусть $\lambda \neq \lambda_n$. Предположим, что $y(x)$ — нетривиальное решение уравнения (5.4), соответствующее λ и удовлетворяющее условиям (5.7). Тогда для любого $n = 0, 1, ...$ имеет место равенство

$$(\lambda - \lambda_n) \int\limits_a^b y(x) y_n(x) \rho(x) dx + \sigma(x)\rho(x) W[y_n(x), y(x)]\big|_a^b = 0, \tag{5.8}$$

где $y_n(x)$ — полиномиальное решение уравнения (5.4), соответствующее λ_n.

Интеграл $\int\limits_a^b y(x) y_n(x) \rho(x) dx$ сходится:

$$\left| \int\limits_a^b y(x) y_n(x) \rho(x) dx \right| \leqslant \underbrace{\sqrt{\int\limits_a^b y^2(x) \rho(x) dx}}_{< \infty} \cdot \underbrace{\sqrt{\int\limits_a^b y_n^2(x) \rho(x) dx}}_{< \infty} < \infty.$$

Введем обозначения:

$$C_1 = \lim_{x \to b} \sigma\rho W[y_n, y], \qquad C_2 = \lim_{x \to a} \sigma\rho W[y_n, y].$$

Покажем, что $C_1 = C_2 = 0$. Так как

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{y}{y_n}\right) = \frac{W[y_n, y]}{y_n^2},$$

то в окрестности $x = b$ имеет место равенство:

$$y(x) = y_n(x) \cdot \left(\frac{y(x_0)}{y_n(x_0)} + \int\limits_{x_0}^{x} \frac{W[y_n(s), y(s)]}{y_n^2(s)} ds \right),$$

где точка $x_0 < b$ расположена правее всех нулей полинома y_n, причем

$$\frac{W[y_n(s), y(s)]}{y_n^2(s)} \sim \frac{C_1}{\sigma(s)\rho(s)y_n^2(s)} \text{ в окрестности } s = b.$$

При $x \to b$ возможны три случая:

а) b — конечное число, $\sigma(x) \sim (b - x)$, $\rho(x) \sim (b - x)^\alpha$, где $\alpha \geqslant 0$;

б) $b = +\infty$, $\sigma(x) \sim x$, $\rho(x) \sim x^\alpha e^{-\beta x}$, где $\alpha \geqslant 0$, $\beta > 0$;

в) $b = +\infty$, $\sigma(x) = 1$, $\rho(x) \sim e^{-\alpha x^2 + \beta x}$, где $\alpha > 0$.

В случае (а) получаем:

$$\int\limits_{x_0}^{x} \frac{W[y_n(s), y(s)]}{y_n^2(s)} ds \sim C_1 \int\limits_{x_0}^{x} \frac{ds}{(b - s)^{\alpha+1} y_n^2(s)} \sim C_1 \left[\begin{array}{ll} (b - x)^{-\alpha}, & \alpha > 0, \\ \ln(b - x), & \alpha = 0 \end{array} \right.$$

при $x \to b$, откуда следует, что

$$\sqrt{\rho} y \sim C_1 \left[\begin{array}{ll} (b - x)^{-\alpha/2}, & \alpha > 0, \\ \ln(b - x), & \alpha = 0 \end{array} \right.$$

в окрестности $x = b$. По предположению функция $\sqrt{\rho} y$ ограничена при $x = b$ и квадратично интегрируема на (a, b). Это возможно только в случае $C_1 = 0$.

В случае (б) и (в) при $x \to +\infty$ получаем:

$$I(x) = \int\limits_{x_0}^{x} \frac{W[y_n(s), y(s)]}{y_n^2(s)} ds \sim C_1 \left[\begin{array}{ll} \displaystyle\int\limits_{x_0}^{x} \frac{e^{\beta s} ds}{s^{2n} s^{\alpha+1}}, & \alpha \geqslant 0, \;\; \beta > 0, \\ \displaystyle\int\limits_{x_0}^{x} \frac{e^{\alpha s^2 - \beta s} ds}{s^{2n}}, & \alpha > 0. \end{array} \right.$$

На основании правила Лопиталя получаем:

$$\lim_{x \to +\infty} \frac{I(x)}{x} = \lim_{x \to +\infty} I'(x),$$

откуда следует, что при $x \to +\infty$

$$I(x) \sim x I'(x) \sim C_1 \left[\begin{array}{ll} \dfrac{e^{\beta x}}{x^{2n+\alpha}}, & \alpha \geqslant 0, \;\; \beta > 0, \\ \dfrac{e^{\alpha x^2 - \beta x}}{x^{2n-1}}, & \alpha > 0. \end{array} \right.$$

Таким образом, функция $\sqrt{\rho}y$ ведет себя как

$$\sqrt{\rho}y \sim \sqrt{\rho}y_n I(x) \sim C_1 \left[\begin{array}{l} \dfrac{e^{\beta x/2}}{x^{n+\alpha/2}}, \quad \alpha \geqslant 0, \quad \beta > 0, \\ \dfrac{e^{(\alpha x^2-\beta x)/2}}{x^{n-1}}, \quad \alpha > 0 \end{array} \right.$$

при $x \to +\infty$, то есть она может быть квадратично интегрируемой на (a, b) только в случае $C_1 = 0$. Аналогично можно показать, что $C_2 = 0$.

Так как $C_1 = C_2 = 0$, то из равенства (5.8) следует, что

$$\int\limits_a^b y(x)y_n(x)\rho(x)dx = 0, \quad n = 0, 1, 2, ...$$

Но тогда, в силу полноты системы функций $\{y_n\}$, приходим к выводу, что $y \equiv 0$. Следовательно, рассматриваемая задача Штурма-Лиувилля не имеет собственных функций, отличных от классических ортогональных полиномов. ■

6 Классические ортогональные полиномы в задачах квантовой механики

Пример 6.1. *Найдите уровни энергии и волновые функции линейного гармонического осциллятора, то есть частицы в поле с потенциальной энергией* $U = \dfrac{m\omega^2x^2}{2}$, *где* m — *масса частицы,* x — *отклонение от положения равновесия,* ω — *циклическая частота.*

Решение. Необходимо решить следующую задачу Штурма-Лиувилля:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = \left(E - \dfrac{m\omega^2x^2}{2}\right)\psi, \quad -\infty < x < +\infty, \\ \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \end{cases} \tag{6.1}$$

где последнее равенство представляет собой условие нормировки.

Приведем уравнение к безразмерному виду. Для этого сделаем замену $x = \alpha\xi$, $E = \hbar\omega\varepsilon$. При этом получаем:

$$\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\hbar\omega\varepsilon - \frac{m\omega^2}{2}\alpha^2\xi^2\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\frac{2m\omega\alpha^2}{\hbar}\varepsilon - \frac{m^2\omega^2\alpha^4}{\hbar^2}\xi^2\right)\psi = 0.$$

Пусть $\dfrac{m^2\omega^2\alpha^4}{\hbar^2} = 1$, тогда $\alpha = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$, и уравнение принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (2\varepsilon - \xi^2)\psi = 0. \tag{6.2}$$

Уравнение (6.2) является обобщенным уравнением гипергеометрического типа, где $\sigma = 1$, $\tilde{\tau} = 0$, $\tilde{\sigma} = 2\varepsilon - \xi^2$. Приведем полученное уравнение к виду

$$\sigma y'' + \tau y' + \lambda y = 0, \tag{6.3}$$

где $\psi = \varphi y$, $\ln' \varphi = \dfrac{\pi(\xi)}{\sigma(\xi)} = \pi(\xi)$ — полином не старше первой степени. Подставляя $\psi = \varphi y$ в уравнение (6.2), получаем:

$$\psi' = \varphi' y + \varphi y', \quad \psi'' = \varphi'' y + 2\varphi' y' + \varphi y'' \quad \Rightarrow$$

$$y'' + 2\frac{\varphi'}{\varphi} y' + \left(2\varepsilon - \xi^2 + \frac{\varphi''}{\varphi}\right) y = 0, \text{ где } \frac{\varphi''}{\varphi} = \left(\frac{\varphi'}{\varphi}\right)' + \left(\frac{\varphi'}{\varphi}\right)^2 = \pi' + \pi^2 \quad \Rightarrow$$

$$y'' + \underbrace{2\pi}_{\tau(\xi)} y' + (\underbrace{2\varepsilon + \pi'}_{\text{число}} \qquad \underbrace{-\xi^2 + \pi^2}_{\text{должно быть числом}} \qquad)y = 0.$$

Пусть $\pi^2 - \xi^2 = k$ — число. Это возможно, только если $k = 0$, откуда получаем $\pi_\pm(\xi) = \pm\xi$, $\tau_\pm(\xi) = \pm 2\xi$ и $\lambda_\pm = 2\varepsilon + \pi'_\pm = 2\varepsilon \pm 1$.

Уравнение (6.3) эквивалентно уравнению

$$\frac{d}{d\xi}\left(\sigma\rho\frac{dy}{d\xi}\right) + \lambda\rho y = 0,$$

где функция $\rho(\xi)$ удовлетворяет уравнению $(\sigma\rho)' = \tau\rho$. Знак в функции $\pi(\xi)$ логично выбирать так, чтобы функция $\rho(\xi)$ была ограниченной при $\xi \in (-\infty, +\infty)$:

$$\frac{\rho'_\pm}{\rho_\pm} = \pm 2\xi \quad \Rightarrow \quad \rho_\pm = e^{\pm\xi^2}$$

с точностью до нормировочного множителя. Очевидно, что нужно выбрать знак минус, что соответствует $\pi = -\xi$, $\tau = -2\xi$, $\rho = e^{-\xi^2}$. При этом $\ln' \varphi = -\xi$, откуда получаем $\varphi = e^{-\xi^2/2}$ с точностью до нормировочного множителя. Итак, $\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} y(\xi)$, где $y(\xi)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2}\frac{dy}{d\xi}\right) + (2\varepsilon - 1)e^{-\xi^2} y = 0. \tag{6.4}$$

Условие нормировки в задаче Штурма-Лиувилля (6.1) означает, что должен быть ограничен следующий интеграл:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}|y(\xi)|^2 d\xi < \infty. \tag{6.5}$$

Задача (6.4)-(6.5) представляет собой задачу Штурма-Лиувилля для полиномов Эрмита. Следовательно,

$$(2\varepsilon_n - 1) = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' = 2n, \;\; n = 0, 1, 2, ... \;\; \Rightarrow \;\; \varepsilon_n = n + \frac{1}{2},$$

то есть уровни энергии осциллятора имеют вид

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, ... \tag{6.6}$$

Собственные функции находим по формуле Родрига:

$$y_n(\xi) = B_n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right) = \tilde{B}_n H_n(\xi), \tag{6.7}$$

где $H_n(\xi)$ — полиномы Эрмита. Найдем множители $\tilde{B}_n$, пользуясь условием нормировки и тем, что квадрат нормы полиномов Эрмита равен $d_n^2 = 2^n n!\sqrt{\pi}$. Следовательно,

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \left\{x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi\right\} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}\tilde{B}_n^2 H_n^2(\xi) d\xi = \tilde{B}_n^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} d_n^2 = 1,$$

откуда получаем

$$\tilde{B}_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}.$$

Пример 6.2. *Найдите уровни энергии и волновые функции электрона в водородоподобном атоме.*

Решение. Прежде всего рассмотрим задачу Штурма-Лиувилля для частицы массы m в центрально-симметричном поле $U(r)$:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = (E - U(r))\psi, \quad r > 0, \;\; \varphi \in [0, 2\pi), \;\; \theta \in (0, \pi), \\ \psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi + 2\pi), \quad |\psi||_{\theta=0,\,\theta=\pi} < \infty, \;\; |\psi||_{r=0} < \infty, \\ \displaystyle\int\limits_{\mathbb{R}_3} |\psi|^2 dV = 1. \end{cases} \tag{6.8}$$

Будем искать решение задачи (6.8) методом разделения переменных: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$, где $Y(\theta, \varphi)$ удовлетворяет задаче на сферические функции, то есть

$$Y_l^{(m)}(\theta, \varphi) = P_l^{(m)}(\cos\theta)\begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases} \qquad l = 0, 1, ..., \;\; m = 0, 1, ..., l;$$

$$\|Y_l^{(m)}\|^2 = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}.$$

В результате для множителя $R(r)$ получаем задачу Штурма-Лиувилля:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r^2}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR}{dr}\right) + \left[\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U(r)) - \dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0, \quad r\in(0,\infty), \\ \int\limits_0^{+\infty}|R|^2 r^2 dr = \|Y_l^{(m)}\|^{-2}, \quad |R(0)|<\infty. \end{cases}$$

Сделаем стандартную замену $R = \dfrac{F(r)}{r}$, в результате которой перейдем к задаче

$$\begin{cases} F'' + \left[\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U(r)) - \dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]F = 0, \quad r\in(0,\infty), \\ \int\limits_0^{+\infty}|F(r)|^2 dr = \|Y_l^{(m)}\|^{-2}, \quad |F(0)|=0. \end{cases} \tag{6.9}$$

Далее будем рассматривать водородоподобный атом, то есть атом, состоящий из ядра с зарядом Ze и массой M и электрона с зарядом $-e$ и массой m. При этом задача о движении электрона сводится к задаче о движении частицы с приведенной массой $\mu = \dfrac{mM}{m+M} \approx m$ в кулоновском поле $U(r) = -\dfrac{Ze^2}{r}$. Задача (6.9) в рассматриваемом случае принимает вид:

$$\begin{cases} F'' + \left[\dfrac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \dfrac{Ze^2}{r}\right) - \dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]F = 0, \quad r\in(0,\infty), \\ \int\limits_0^{+\infty}|F(r)|^2 dr = \|Y_l^{(m)}\|^{-2}, \quad |F(0)|=0. \end{cases}$$

Приведем уравнение к безразмерному виду. Для этого сделаем замену переменных $r = a_0 x$, в результате которой получаем:

$$\frac{d^2F}{dx^2} + \left[\frac{2\mu a_0^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{a_0 x}\right) - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]F = 0.$$

Положим $\dfrac{\mu e^2 a_0}{\hbar^2} = 1$, что соответствует $a_0 = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$. При этом

$$\frac{\mu a_0^2 E}{\hbar^2} = \frac{\mu}{\hbar^2}\frac{\hbar^4 E}{\mu^2 e^4} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\frac{E}{e^2} = \frac{a_0}{e^2}E.$$

Пусть $E = \dfrac{e^2}{a_0}\varepsilon$. Тогда уравнение для функции $F(x)$ принимает вид:

$$F'' + \left[2\left(\varepsilon + \frac{Z}{x}\right) - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]F = 0. \tag{6.10}$$

Это уравнение принадлежит классу обобщенных уравнений гипергеометрического типа

$$F'' + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma}F' + \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2}F = 0,$$

где $\sigma = x$, $\tilde{\tau} = 0$, $\tilde{\sigma} = 2\varepsilon x^2 + 2Zx - l(l+1)$. Приведем уравнение (6.10) к виду

$$\sigma y'' + \tau y' + \lambda y = 0$$

с помощью стандартной замены $F(x) = \varphi(x)y(x)$. Так как $F'' = \varphi'' y + 2\varphi' y' + \varphi y''$, то для функции $y(x)$ получаем уравнение

$$xy'' + 2\frac{\varphi'}{\varphi}xy' + \left[x\frac{\varphi''}{\varphi} + \frac{2\varepsilon x^2 + 2Zx - l(l+1)}{x}\right]y = 0.$$

Пусть $\dfrac{\varphi'}{\varphi} = \dfrac{\pi(x)}{\sigma(x)} = \dfrac{\pi(x)}{x}$. Тогда

$$\frac{\varphi''}{\varphi} = \left(\frac{\varphi'}{\varphi}\right)' + \left(\frac{\varphi'}{\varphi}\right)^2 = \left(\frac{\pi}{x}\right)' + \frac{\pi^2}{x^2} = \frac{\pi'}{x} + \frac{\pi^2 - \pi}{x^2},$$

и уравнение для функции $y(x)$ принимает вид:

$$xy'' + \underbrace{2\pi}_{=\tau(x)}\, y' + \Bigg[\underbrace{\pi'}_{\text{число}} + \underbrace{\frac{\pi^2 - \pi + 2\varepsilon x^2 + 2Zx - l(l+1)}{x}}_{\text{пусть равно } (-k)}\Bigg]y = 0,$$

где полином $\pi(x)$ не старше первой степени удовлетворяет квадратному уравнению

$$\pi^2 - \pi + 2\varepsilon x^2 + (2Z + k)x - l(l+1) = 0,$$

из которого получаем:

$$\pi(x) = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - 2\varepsilon x^2 - (2Z + k)x + l(l+1)}.$$

Под корнем должен быть полный квадрат, то есть дискриминант подкоренного выражения должен быть равен нулю:

$$D = (2Z+k)^2 + 4\underbrace{\left(\frac{1}{4} + l(l+1)\right)}_{=(l+1/2)^2} 2\varepsilon = (2Z+k)^2 + (2l+1)^2\, 2\varepsilon = 0 \quad \Rightarrow \quad k = -2Z \pm (2l+1)\sqrt{-2\varepsilon}.$$

Подкоренное выражение в функции $\pi(x)$ при этом имеет вид:

$$\frac{1}{4} - 2\varepsilon x^2 \mp (2l+1)\sqrt{-2\varepsilon}x + l(l+1) = -2\varepsilon x^2 \mp (2l+1)\sqrt{-2\varepsilon}x + \frac{(2l+1)^2}{4} = \left(\sqrt{-2\varepsilon}x \mp \frac{2l+1}{2}\right)^2,$$

то есть
$$\pi_{\pm}^{\pm} = \frac{1}{2} \pm \left(\sqrt{-2\varepsilon}x \mp \frac{2l+1}{2}\right).$$

Выберем знаки в выражении для $\pi(x)$ так, чтобы функция $\rho(x)$, удовлетворяющая уравнению Пирсона $(\sigma\rho)' = \tau\rho$, была ограничена в нуле и на бесконечности. Так как в данном случае
$$\rho(x) = \frac{1}{x}\exp\left\{\int \frac{2\pi(x)}{x}dx\right\},$$
то она будет ограничена, если
$$\pi = \frac{1}{2} - \left(\sqrt{-2\varepsilon}x - \frac{2l+1}{2}\right) = -\sqrt{-2\varepsilon}x + l + 1 \quad \Leftrightarrow \quad k = -2Z + (2l+1)\sqrt{-2\varepsilon}.$$
В самом деле:
$$\rho(x) = \frac{1}{x}\exp\left\{\int \left(-2\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{2(l+1)}{x}\right)dx\right\} = x^{2l+1}e^{-2\sqrt{-2\varepsilon}x}$$
с точностью до нормировочного множителя. При этом
$$\ln'\varphi = \frac{\pi}{x} = -\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{l+1}{x} \quad \Rightarrow \quad \varphi = x^{l+1}e^{-\sqrt{-2\varepsilon}x},$$

$$\lambda = \pi' - k = -\sqrt{-2\varepsilon} + 2Z - (2l+1)\sqrt{-2\varepsilon} = -2(l+1)\sqrt{-2\varepsilon} + 2Z.$$

Собственные значения безразмерной энергии ε определяются из уравнения:
$$\lambda_{n_r} + n_r\tau' + \frac{n_r(n_r+1)}{2}\sigma'' = 0 \quad \Leftrightarrow \quad -2(l+1)\sqrt{-2\varepsilon_{n_r}} + 2Z - n_r 2\sqrt{-2\varepsilon_{n_r}} = 0 \quad \Leftrightarrow$$
$$(n_r + l + 1)\sqrt{-2\varepsilon_{n_r}} = Z, \quad n_r = 0, 1, 2, ...$$

Обычно уровни энергии ε_n характеризуют числом $n = n_r + l + 1$, которое называется главным квантовым числом:
$$\varepsilon_n = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad n = n_r + l + 1, \;\; n_r = 0, 1, 2, ..., \;\; l = 0, 1, 2, ...$$

Собственные функции задачи Штурма-Лиувилля имеют вид:
$$y_{n_r,l}(x) = \frac{B_{n_r,l}}{x^{2l+1}\exp\left(-\frac{2Zx}{n_r+l+1}\right)}\frac{d^{n_r}}{dx^{n_r}}\left[x^{n_r+2l+1}\exp\left(-\frac{2Zx}{n_r+l+1}\right)\right],$$
и с точностью до нормировочного множителя совпадают с полиномами Лагерра $L_{n_r}^{2l+1}(\tilde{x})$, где $\tilde{x} = \dfrac{2Zx}{n_r+l+1}$. При этом
$$F_{n_r,l}(x) = x^{l+1}\exp\left(-\frac{Zx}{n_r+l+1}\right)y_{n_r,l}(x), \qquad R_{n_r,l}(r) = \frac{F_{n_r,l}(r/a_0)}{r}.$$

Окончательно получаем:

$$R_{n_r,l}(r) = \frac{C_{n_r,l}}{r}\tilde{x}^{l+1}e^{-\tilde{x}/2}L_{n_r}^{2l+1}(\tilde{x}), \qquad \tilde{x} = \frac{2Z}{n_r+l+1}\frac{r}{a_0}.$$

Постоянная $C_{n_r,l}$ находится из условия нормировки:

$$\int\limits_0^{+\infty} |R_{n_r,l}(r)|^2 r^2 dr = \int\limits_0^{+\infty} |F_{n_r,l}(r)|^2 dr = \left\{ dr = a_0\frac{n_r+l+1}{2Z}d\tilde{x} \right\} =$$

$$= a_0\frac{n_r+l+1}{2Z}C_{n_r,l}^2 \int\limits_0^{+\infty} e^{-\tilde{x}}\tilde{x}^{2l+2}\left[L_{n_r}^{2l+1}(\tilde{x})\right]^2 d\tilde{x} = \|Y_l^{(m)}\|^{-2}.$$

Интеграл в последнем равенстве можно вычислить с помощью рекуррентного соотношения для полиномов Лагерра:

$$\tilde{x}L_{n_r}^{2l+1} = 2(n_r+l+1)L_{n_r}^{2l+1} - (n_r+1)L_{n_r+1}^{2l+1} - (n_r+2l+1)L_{n_r-1}^{2l+1},$$

из которого в силу ортогональности полиномов получаем:

$$\int\limits_0^{+\infty} e^{-\tilde{x}}\tilde{x}^{2l+2}\left[L_{n_r}^{2l+1}(\tilde{x})\right]^2 d\tilde{x} = \int\limits_0^{+\infty} e^{-\tilde{x}}\tilde{x}^{2l+1}L_{n_r}^{2l+1}(\tilde{x})\left\{2(n_r+l+1)L_{n_r}^{2l+1} + ...\right\} d\tilde{x} =$$

$$= 2(n_r+l+1)\int\limits_0^{+\infty} e^{-\tilde{x}}\tilde{x}^{2l+1}\left[L_{n_r}^{2l+1}(\tilde{x})\right]^2 d\tilde{x} = 2(n_r+l+1)\|L_{n_r}^{2l+1}\|^2.$$

Следовательно,

$$C_{n_r,l}^2 = \frac{Z}{(n_r+l+1)^2}\cdot\frac{1}{a_0\|L_{n_r}^{2l+1}\|^2\|Y_l^{(m)}\|^2}, \qquad \|L_{n_r}^{2l+1}\|^2 = \frac{(n_r+2l+1)!}{n_r!}.$$