Федеральное агентство по образованию

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина»

**А.П. Мелехов**

# АТОМ ВОДОРОДА
# В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

*Методические материалы*
*для самостоятельной работы студентов*
*по курсу теоретической физики*

Рязань –2008

ББК 22.314
М 47

Печатается по решению редакционно-издательского совета Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина» в соответствии с планом изданий на 2008 год.

Научный редактор *Н.В. Коненков*, д-р физ.-мат. наук, проф.

Рецензенты: *М.Т. Терехин*, д-р физ.-мат. наук, проф.
А.Б. Ястребков, канд. физ.-мат. наук, доц.

**Мелехов А.П.** Атом водорода в квантовой механике: учебно-методическое пособие; Ряз. гос. ун-т им. С.А. Есенина. – Рязань, 2008. – 40 с.

Рассмотрены концептуальные физические и математические моменты, относящиеся к задаче об атоме водорода. Приведены подробные доказательства соотношений ортогональности для полиномов Лежандра, Лагерра и сферических функций. В общем виде вычислены нормировочные множители функций радиального и углового распределений.

*Ключевые слова:* атом водорода, волновые функции, полиномы Лагерра, соотношения ортогональности, электронные облака.

**ББК 22.311**

**ОГЛАВЛЕНИЕ**

## Введение

Атом водорода – одна из простейших квантовых систем. Он состоит из тяжелого ядра – протона и, движущегося вокруг него электрона. Математическая модель такой системы – уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом, оказывается точно решаемой. Более того, к такой модели сводится еще целый ряд задач квантовой механики.

Эти обстоятельства придают задаче об атоме водорода особый статус в квантовой теории, и она подробно излагается почти во всех учебниках. Тем не менее, изучение квантовой теории атома водорода сопряжено с определенными методическими трудностями. Одна из них заключается в том, что радиальная часть волновой функции выражается через так называемые *полиномы Лагерра*, коэффициенты которых связаны между собой *рекуррентной формулой* и заданы с *точностью до константы*. Указанная константа определяется по-разному. Например, в задачах квантовой механики ее можно вычислять, пользуясь *условием нормировки* волновой функции, и тогда она относится не к полиномам Лагерра, а к нормировочному множителю волновой функции. Однако иногда ее определяют в рамках самих полиномов[1], сохраняя для них те же обозначения, что и в первом случае. В результате часто в разных учебниках одним и тем же символом обозначаются полиномы Лагерра, нормированные по-разному. И не всегда бывает ясно, какова именно эта нормировка. Отсюда и возникают некоторые вопросы, связанные с представлением общего вида радиальной части волновой функции. Есть и другие причины, по которым общий вид радиальной части представляется *на первый взгляд* различным в разных учебниках.

[1] Эта процедура может быть осуществлена не мене чем двумя различными способами.

В настоящем пособии мы последовательно излагаем теорию атома водорода, *уделяя особое внимание именно математическим тонкостям рассматриваемой задачи.*

## § 1. Движение заряженной частицы в центрально-симметричном поле

Центрально-симметричным или просто центральным называется поле, потенциальная энергия которого зависит лишь от расстояния $r$ до некоторого центра. Законы движения микрообъектов в центрально-симметричном поле образуют фундамент атомной физики. Решение общей задачи о движении электронов в атоме опирается на результаты, относящиеся к движению одной частицы в центральном поле.

Если обозначить через $U(r)$ потенциальную энергию частицы, то оператор полной энергии можно написать в виде

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{M}^2}{2\mu r^2} + U(r), \tag{1.1}$$

где $\hat{M}^2$ – оператор квадрата момента импульса, а $\hat{T}_r$ – оператор кинетической энергии для радиального движения. Возможность такого представления оператора полной энергии вытекает из общего вида гамильтониана:

$$\hat{H} = \hat{T} + U(x, y, z), \tag{1.2}$$

где $\hat{T}$ оператор кинетической энергии:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2. \tag{1.3}$$

Учитывая, то обстоятельство, что центрально-симметричное поле обладает сферической симметрией, оператор Лапласа $\nabla^2$ можно записать в сферических координатах

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (1.4)$$

Подставляя (1.4) в (1.3), получим

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (1.5)$$

Формула (1.5) представляет собой выражение оператора кинетической энергии в сферических координатах. Первое слагаемое в этой формуле – есть оператор кинетической энергии для радиального движения. Именно он и обозначается символом $\hat{T}_r$ . Поэтому

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right). \qquad (1.6)$$

Второе слагаемо обычно записывают в виде $\dfrac{\hat{M}^2}{2\mu r^2}$ и называют оператором *трансверсального* движения. Ясно, что оператор $\hat{M}^2$ имеет вид

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (1.7)$$

Его называют оператором квадрата момента импульса. Выражение в квадратных скобках называют угловой частью оператора Лапласа и обычно обозначают символом $\nabla^2_{\theta\varphi}$ . Наконец, оператор

$$\Lambda = -\nabla^2_{\theta\varphi} \qquad (1.8)$$

называют оператором Лежандра.

С учетом сказанного, уравнение Шредингера для стационарных состояний в рассматриваемом случае имеет вид

$$\hat{T}_r \psi + \frac{\hat{M}^2}{2\mu r^2}\psi + U(r)\psi = E\psi \quad . \qquad (1.9)$$

Волновую функцию $\psi$ естественно искать как функцию сферических координат $r, \theta, \varphi$, т.е. $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$.

Искомое решение должно быть однозначным, непрерывным и конечным во всей области изменения переменных $r, \theta, \varphi$, т.е. в области $0 \le r \le \infty, \quad 0 \le \theta \le \pi, \quad 0 \le \varphi \le 2\pi$ .

Будем искать решение уравнения (1.9) методом Фурье. В соответствие с этим представим искомую функцию $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ в виде произведения трех функций, каждая из которых зависит только от одной соответствующей переменной

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi)\Theta(\theta). \qquad (1.10)$$

Введем обозначение

$$Y(\theta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\theta). \qquad (1.11)$$

Подставляя эти выражения в уравнение (1.9) и, разделяя переменные, получим

$$\frac{2\mu r^2}{R}\hat{T}_r R + 2\mu(U - E)r^2 = -\frac{1}{Y}\hat{M}^2 Y = -\lambda' . \qquad (1.12)$$

Здесь $\lambda'$ – константа разделения переменных.

Таким образом, получаем два уравнения:

$$\hat{M}^2 Y = \lambda' Y , \qquad (1.13)$$

$$\hat{T}_r R + \frac{\lambda'}{2\mu r^2} R + U(r)R = ER. \qquad (1.14)$$

Последнее из этих уравнений называется уравнением Шредингера для радиальной функции $R(r)$. Именно оно определяет возможные значения энергии. Очевидно, эти значения зависят от вида функции $U(r)$. Кроме того, они могут зависеть от величины $\lambda'$, которая определяется уравнением (1.13).

Поэтому сначала найдем решение уравнения (1.13). Это задача на собственные значения оператора квадрата момента импульса. Учитывая, что

$$\hat{M}^2 = \hbar^2 \Lambda, \tag{1.15}$$

и вводя обозначение $\lambda = \dfrac{\lambda'}{\hbar^2}$, вместо (1.13) будем иметь

$$\Lambda Y = \lambda Y. \tag{1.16}$$

Перепишем это уравнение с учетом явного вида оператора Лежандра и представления (1.11)

$$-\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) - \frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = \lambda\Theta\Phi. \tag{1.17}$$

Умножим обе части этого уравнения на величину $\dfrac{\sin^2\theta}{\Theta\Phi}$

$$-\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = \lambda\sin^2\theta.$$

Разделяя переменные, находим

$$-\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) - \lambda\sin^2\theta = \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -m^2. \tag{1.18}$$

Соотношение (1.18) эквивалентно двум обыкновенным дифференциальным уравнениям:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi = 0, \tag{1.19}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\,\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0. \tag{1.20}$$

Последнее из этих уравнений называется уравнением Лежандра. К его решению мы вернемся чуть позже, а пока, напомним, как решается уравнение (1.19). Для этого составим и решим характеристическое уравнение

$$k^2 + m^2 = 0, \quad k = \pm im. \tag{1.21}$$

Поскольку корни характеристического уравнения комплексны, то решение уравнения (1.19) можно записать в виде

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \tag{1.22}$$

Число $m$ называется *магнитным квантовым числом*.

Теперь приступим к решению уравнения Лежандра. Прежде всего, преобразуем это уравнение, вводя новую переменную

$$x = \cos\theta\ , \tag{1.23}$$

а функцию $\Theta(\theta)$ обозначим как $P(x)$:

$$\Theta(\theta) = P(x). \tag{1.24}$$

Тогда очевидно, что

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dP}{dx}\frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta\,\frac{dP}{dx}. \tag{1.25}$$

Откуда также следует

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} = -\frac{d}{dx}. \tag{1.26}$$

С учетом этих обозначений уравнение Лежандра (1.20) принимает вид

$$\frac{d}{dx}\left(1 - x^2\right)\frac{dP}{dx} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - x^2}\right)P = 0. \tag{1.27}$$

Заметим, что поскольку величина $0 \le \theta \le \pi$ , то решение уравнения (1.27) ищется на отрезке $-1 \le x \le 1$ .

Рассмотрим сначала частный случай этого уравнения (при $m = 0$). Имеем

$$\frac{d}{dx}\left(1 - x^2\right)\frac{dP}{dx} + \lambda P = 0. \tag{1.28}$$

Или

$$\left(1-x^2\right)\frac{d^2P}{dx^2}-2x\frac{dP}{dx}+\lambda P=0\,. \qquad (1.29)$$

Будем искать решение уравнения (1.29) в виде степенного ряда

$$P(x)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k x^k\,. \qquad (1.30)$$

Найдем первую и вторую производные функции (1.30)

$$P'(x)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k k\,x^{k-1}\,, \qquad (1.31)$$

$$P''(x)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k k(k-1)x^{k-2}\,. \qquad (1.32)$$

Подставляя теперь выражения (1.30)-(1.32) в уравнение (1.29) , получим

$$\left(1-x^2\right)\sum_{k=0}^{\infty}a_k k(k-1)x^{k-2}-2x\sum_{k=0}^{\infty}a_k k\,x^{k-1}+\lambda\sum_{k=0}^{\infty}a_k\,x^k=0\,.$$

Раскроем скобки и проведем группировку

$$\sum_{k=0}^{\infty}a_k k(k-1)x^{k-2}-\sum_{k=0}^{\infty}\left(k(k-1)+2k-\lambda\right)a_k\,x^k=0\,.$$

Перенесем все члены, содержащие $x$ в $k-й$ степени, вправо:

$$\sum_{k=0}^{\infty}a_k k(k-1)x^{k-2}=\sum_{k=0}^{\infty}\left[k(k+1)-\lambda\right]a_k\,x^k.$$

Поскольку должно иметь место равенство коэффициентов при одинаковых степенях в обеих частях равенства, то

$$(k+2)(k+1)a_{k+2}=\left[k(k+1)-\lambda\right]a_k\,.$$

Отсюда получаем рекуррентную формулу

$$a_{k+2}=\frac{k(k+1)-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k\,, \qquad (1.33)$$

которая позволяет выразить все четные коэффициенты ряда (1.30) через $a_0$, а все нечетные через $a_1$.

Однако задачу нельзя считать решенной, поскольку нас интересуют лишь конечные решения уравнения (1.29). *А выражение (1.30) с коэффициентами (1.33) представляет собой ряд, который, в общем случае этому требованию не удовлетворяет.*

*И только в том частном случае, когда ряд «обрывается» на некотором члене и содержит конечное число слагаемых, т.е. представляет собой многочлен, условие ограниченности выражаемой им функции выполняется на всем отрезке* $-1 \le x \le 1$. Другими словами, искомое решение должно иметь вид

$$P_l(x) = \sum_{k=0}^{l} a_k x^k \ . \qquad (1.34)$$

Это может иметь место, если какой-нибудь из коэффициентов ряда обратится в нуль. Тогда и все последующие коэффициенты автоматически станут нулевыми. Заметим, что при $a_l \neq 0$ коэффициент $a_{l+2}$ исчезает только в том случае, если постоянная $\lambda$ равна произведению двух последовательных чисел $l$ и $l+1$:

$$\lambda = l(l+1). \qquad (1.35)$$

Поэтому формула (9.33) должна быть записана в виде

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - l(l+1)}{(k+2)(k+1)} a_k \ . \qquad (1.36)$$

Многочлены (1.34), у которых коэффициенты $a_0$ или $a_1$ выбраны так, чтобы в точке $x = 1$ их значения были равны 1, принято называть *полиномами Лежандра.*

Вычислим несколько первых полиномов Лежандра. При $l = 0$ мы имеем многочлен нулевой степени, которым является коэффициент $a_0$. Но чтобы $P_0(1) = 1$, нужно принять $a_0 = 1$. Итак,

$$P_0(x)=1.$$

При $l=1$ получаем многочлен первой степени

$$P_1(x)=a_0+a_1x.$$

Ясно, что коэффициент $a_2$ полагается равным нулю. Но тогда, в соответствие с формулой (1.36) имеем $a_0=0$. Поэтому

$$P_1(x)=a_1x.$$

Чтобы при $x=1$ этот многочлен был равен 1, необходимо принять $a_1=1$. Следовательно,

$$P_1(x)=x.$$

При $l=2$ получаем многочлен второй степени

$$P_2(x)=a_0+a_1x+a_2x^2.$$

Ясно, что коэффициент $a_3$ полагается равным нулю. Но тогда, в соответствие с формулой (1.36) имеем $a_1=0$. Поэтому

$$P_2(x)=a_0+a_2x^2.$$

Коэффициент $a_2$ согласно формуле (1.36) должен быть равен $-3a_0$. Поэтому

$$P_2(x)=a_0-3a_0x^2.$$

Чтобы при этом $P_2(1)=1$, постоянную $a_0$ нужно выбрать равной $-\frac{1}{2}$, так что

$$P_2(x)=\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right).$$

Вычисление полиномов Лежандра более высоких степеней удобнее производить с помощью *формулы Родрига:*

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l\cdot l!}\cdot\frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l. \tag{1.37}$$

Полиномы Лежандра обладают очень важным свойством. Они образуют полную и ортогональную систему функций. Соотношения ортогональности выражаются формулой

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) \cdot P_k(x)\, dx = \begin{cases} 0, & k \neq n, \\ \dfrac{2}{2n+1}, & k = n. \end{cases} \tag{1.38}$$

Опуская излишние подробности, укажем, что решениями уравнения Лежандра (1.27) являются, так называемые, *присоединенные функции Лежандра* $P_l^m(x)$, определяемые формулой:

$$P_l^m(x) = \left(1 - x^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x). \tag{1.39}$$

Обратим внимание на то, что при $m > l$ имеет место тождество $P_l^m(x) \equiv 0$. Поэтому каждому значению $l$ соответствует $l+1$ присоединенных полиномов Лежандра

$$P_l^m(x),$$
$$m = 0, 1, 2, \ldots, l.$$

Присоединенные полиномы Лежандра $P_l^m(x)$ так же как $P_l(x)$ образуют полную и ортогональную систему функций на отрезке $[-1, 1]$.

Теперь можно записать решение уравнения (1.16). Вспоминая формулу (1.11) находим

$$\begin{gathered} Y_l^m(\theta, \varphi) = P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi}, \quad l \geq |m| \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l. \end{gathered} \tag{1.40}$$

Функции (1.40) называют *сферическими функциями.* Важны два обстоятельства: во-первых, сферические функции являются собственными функциями операторы Лежандра, а, следовательно, и собственными функциями оператора квадрата момента импульса. Во-вторых, они образуют полную и ортогональную систему функций на сфере. Соотношения ортогональности таковы

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_n^m Y^{*k}_{\ l} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \begin{cases} 0, & k \neq m, n \neq l, \\ \dfrac{4\pi}{2l+1}\cdot\dfrac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}, & k = m, n = l. \end{cases} \quad (1.41)$$

В квантовой механике число $l$ называется *орбитальным квантовым числом.*

Вернемся теперь к рассмотрению уравнения Шредингера для радиальной функции $R(r)$. Напомним, что это уравнение (1.14). С учетом найденных значений $\lambda' = \hbar^2 l(l+1)$, оно принимает вид

$$\hat{T}_r R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R + U(r)R = ER. \quad (1.41)$$

Во всех реальных физических системах взаимодействие на бесконечно больших расстояниях бесконечно мало. Это означает, что асимптотически (при $r \to \infty$) потенциальная энергия принимает постоянное значение

$$U(r)_{r\to\infty} = const = C\,, \quad (1.42)$$

где $C$ – произвольная постоянная, определяющая уровень потенциальной энергии на бесконечности.

В дальнейшем мы увидим, что характер решения уравнения (1.41) существенно зависит от того, больше или меньше полная энергия $E$ значения потенциальной энергии на бесконечности. Так как $C$ произвольная постоянная, то в тех случаях, когда это специально не оговаривается, ее полагают равной нулю и различают два случая: $E > 0, \quad и \quad E < 0$.

Будем полагать, что

$$U(r)_{r\to 0} = \frac{A}{r^{\alpha}}, \quad \alpha < 2\,. \quad (1.43)$$

Сделанные предположения о виде функции $U(r)$ охватывают широкий круг задач атомной механики. Самой простой из них является задача о движении электрона в кулоновском поле ядра. С такой задачей мы встречаемся в атоме водорода $H$ и других *водородоподобных атомах*.

## § 2. Движение заряженной частицы в кулоновском поле

Обозначая заряд ядра $+eZ$, где $e$ – элементарный заряд, а $Z$ – номер ядра в системе Менделеева, мы получим, что потенциальная энергия электрона в поле такого ядра равна

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{2.1}$$

Подставляя это выражение потенциальной энергии в уравнение (1.41), получим

$$\hat{T}_r R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R - \frac{Ze^2}{r} R = ER\ . \tag{2.2}$$

Преобразуем последнее уравнение с учетом явного вида оператора кинетической энергии $\hat{T}_r$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R - \frac{Ze^2}{r} R = ER\ . \tag{2.2′}$$

Поэтому для функции $R(r)$ получаем уравнение

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0\ . \tag{2.3}$$

Рассматриваемый случай соответствует притяжению частиц. Известно, что при $E > 0$, энергетический спектр является непрерывным, а при $E < 0$ – дискретным. Нас будет интересовать именно этот последний случай. Поэтому наша ближайшая задача найти дискретный спектр энергии и соответствующие волновые функции. Введем новую переменную

$$\rho = \frac{r}{\beta}, \tag{2.4}$$

где $\beta$ – некоторое произвольное число. Тогда уравнение (2.3) принимает вид

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}\beta^2+\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2\rho}\beta-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0. \tag{2.5}$$

Подберем $\beta$ так, чтобы *(только из соображений удобства)*

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2}\beta^2=-\frac{1}{4}, \tag{2.6}$$

и введем обозначение

$$\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2}\beta=n. \tag{2.7}$$

Отсюда

$$\beta=n\frac{\hbar^2}{2\mu e^2}\frac{1}{Z}. \tag{*}$$

Число $n$ называется *главным квантовым числом*. Такое название обусловлено тем, что именно от этого числа зависит значение энергии квантовой системы. Действительно, из соотношений (2.6) – (2.7) находим

$$E=-\frac{\mu Z^2e^4}{2n^2\hbar^2}. \tag{2.8}$$

Таким образом, для того чтобы найти возможные значения энергии, нам нужно определить главное квантовое число, решив уравнение (2.5), которое с учетом обозначений (2.6)-(2.7) выглядит следующим образом

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{n}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0. \tag{2.9}$$

Найдем сначала асимптотическое решение уравнения (2.9) вдали от притягивающего цента, то есть при $\rho\to\infty$. В этом случае оно принимает вид

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{1}{4}R=0. \tag{2.10}$$

Решение этого уравнения обычно записывают так

$$R(\rho)=C_1e^{\frac{1}{2}\rho}+C_2e^{-\frac{1}{2}\rho}. \tag{2.11}$$

Однако слагаемое с положительной константой следует отбросить из-за требования конечности волновой функции.

При $\rho \to 0$ главными членами уравнения (2.9) являются слагаемые с максимальной степенью $\rho$ в знаменателе. Поэтому при $\rho \to 0$ уравнение имеет вид

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

Решениями этого уравнения являются функции $R \sim \rho^l, \quad R \sim \rho^{-l-1}$.

Второе решение должно быть отброшено, потому что оно не является конечным в начале координат. Таким образом, при $\rho \to 0$ решение ведет себя как

$$R \sim \rho^l .$$

Поэтому решение уравнения (10.9) будем искать в виде

$$R(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L(\rho), \tag{2.12}$$

где $L(\rho)$ – некоторая произвольная функция.

Вычислим сначала $R'$ и $R''$

$$R' = -\frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L + e^{-\frac{1}{2}\rho}l\rho^{l-1}L + e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L' = e^{-\frac{1}{2}\rho}\left[-\frac{1}{2}\rho^l L + l\rho^{l-1}L + \rho^l L'\right];$$

$$R'' = -\frac{1}{2}e^{-\frac{1}{2}\rho}\left[-\frac{1}{2}\rho^l L + l\rho^{l-1}L + \rho^l L'\right] +$$
$$+ e^{-\frac{1}{2}\rho}\left[-\frac{1}{2}l\rho^{l-1}L - \frac{1}{2}\rho^l L' + l(l-1)\rho^{l-2}L + l\rho^{l-1}L' + l\rho^{l-1}L' + \rho^l L''\right].$$

Подставляя найденные значения $R'$ и $R''$ в уравнение (2.9), получаем

$$\frac{1}{4}\rho^l L - \frac{1}{2}l\rho^{l-1}L - \frac{1}{2}\rho^l L' - \frac{1}{2}l\rho^{l-1}L - \frac{1}{2}\rho^l L' + l(l-1)\rho^{l-2}L + l\rho^{l-1}L' + l\rho^{l-1}L' + \rho^l L'' +$$
$$+ \frac{2}{\rho}\left[-\frac{1}{2}\rho^l L + l\rho^{l-1}L + \rho^l L'\right] + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l-1)}{\rho^2}\right)\rho^l L = 0$$

После надлежащих сокращений получаем

$$\rho L'' + (2l + 2 - \rho)L' + (n - l - 1)L = 0\,. \qquad (2.13)$$

Уравнение (2.13) представляет собой обобщенное уравнение Лагерра

$$x y'' + (\alpha + 1 - x)y' + n_r\, y = 0\,, \qquad (2.14)$$

у которого коэффициент $\alpha = 2l + 1$, а $n_r = n - l - 1$. Величину $n_r$ называют *радиальным квантовым числом* $n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

Опираясь на известные[1] решения уравнения (2.14) мы можем сразу сказать, что решением уравнения (2.13) являются обобщенные функции Лагерра

$$L(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = \frac{1}{(n-l-1)!} e^{\rho} \rho^{-(2l+1)} \frac{d^{\,n-l-1}}{d\rho^{\,n-l-1}} \left(e^{-\rho} \rho^{\,n+l}\right). \qquad (2.15)$$

Учитывая значения радиального квантового числа, заключаем, что главное квантовое число принимает значения:

$$n \geq l + 1, \quad \textit{и поскольку} \quad l = 0, 1, 2, 3, \ldots \quad \textit{то} \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.16)$$

Отсюда следует, что энергетический спектр в рассматриваемом случае оказывается дискретным и формулу (2.8) следует записать так

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2 n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.17)$$

Ясно также, что искомая функция $R(\rho)$ будет завистъ от двух квантовых чисел $n$ *и* $l$. Поэтому ее принято записывать следующим образом:

$$R_{nl}(\rho) = N_{nl} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^{\,l} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho). \qquad (2.18)$$

Здесь $N_{nl}$ – нормировочный множитель, который мы будем выбирать так, чтобы функция $R_{nl}$ была нормирована к единице:

$$\int_0^\infty R_{nl}^{\,2} r^2\, dr = 1\,. \qquad (2.19)$$

[1] Смотри приложение 7, формула (7.10).

Полная волновая функция $\psi = \psi(\rho, \theta\ \varphi)$ будет иметь вид

$$\psi_{nlm}(\rho,\theta,\varphi) = A_{lm} R_{nl}(\rho) Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{2.20}$$

Коэффициенты $A_{lm}$ так же как и $N_{nl}$ определяются из условия нормировки к единице функции $\psi_{nlm}$

$$\int_0^\infty |\psi_{nlm}|^2 r^2 d r \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = 1. \tag{2.21}$$

Однако, с учетом нормировки радиальной функции $R_{nl}$, условие (2.21) может быть заменено следующим:

$$A_{lm}^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_l^m Y^{*m}_l \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = 1. \tag{2.22}$$

Отсюда, учитывая формулу (1.41), сразу получаем

$$A_{lm}^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}. \tag{2.23}$$

Подсчитаем теперь, сколько различных волновых функций соответствует квантовому уровню $E_n$. Мы знаем, что магнитное квантовое число $m$ при заданном $l$ пробегает значения $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$. Поэтому при каждом заданном $l$ мы имеем $2l+1$ функций, отличающихся числом $m$. Но $l$ пробегает значения от $0$ до $n-1$. Действительно, $n_r = n - l - 1 \geq 0$, отсюда следует $l \leq n-1$. Поэтому полное число функций будет

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \tag{2.24}$$

Таким образом, *каждому квантовому уровню $E_n$ соответствует $n^2$ различных состояний.* Такое обстоятельство называется вырождением. Причина его в сферической симметрии задачи. Если эту симметрию нарушить, то вырождение снимается (частично или полностью).

## § 3. Спектр и волновые функции атома водорода

Выше мы установили, что энергетический спектр квантовомеханической системы, обладающей центральной симметрией, является дискретным (при $E < 0$) и определяется формулой

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{3.1}$$

Подставляя сюда значения универсальных постоянных $e$, $\mu$ *и* $\hbar$ мы можем вычислить квантовые уровни энергии электрона, движущегося в кулоновском поле ядра номера $Z$. Так, для атома водорода $(Z=1)$ в основном состоянии $(n=1)$, получаем

$$E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = -13{,}55 \text{ эв}. \tag{3.2}$$

В первом возбужденном энергетическом состоянии, т.е. в состоянии с главным квантовым числом $(n=2)$, атом водорода обладает энергией

$$E_2 = -\frac{\mu e^4}{8\hbar^2} = \frac{E_1}{4} = -3{,}4 \text{ эв}. \tag{3.3}$$

Дальнейшие вычисления дают: $E_3 = -1{,}5$ *эв*; $E_4 = -0{,}85$ *эв*; $E_5 = -0{,}54$ *эв*. Отсюда видно, что по мере роста главного квантового числа уровни располагаются теснее. И при $n \to \infty$ $E_\infty \to 0$. Далее идет область непрерывного спектра $E > 0$, соответствующая ионизированному атому. Ясно, что энергия ионизации атома водорода равна

$$I = -E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = 13{,}55 \text{ эв}. \tag{3.4}$$

Перепишем формулу (3.1) следующим образом

$$E_n = -Z^2 \frac{\frac{\mu e^4}{\hbar^2}}{2n^2} = -\frac{Z^2 E_0}{2n^2}\,. \tag{3.5}$$

Величину

$$E_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = 27{,}21 \text{ эв.} \tag{3.6}$$

принято называть *атомной единицей энергии,* а величину

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{3.7}$$

называют *атомной единицей длины* или боровским радиусом.

В соответствии с квантовой теорией света, имеем

$$\hbar\omega = E_n - E_m = \frac{Z^2 E_0}{2}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right). \tag{3.8}$$

Отсюда получаем формулу

$$\nu = \frac{Z^2 E_0}{4\pi\hbar}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad m < n, \tag{3.9}$$

которая при $Z = 1$ дает частоту света, излучаемого или поглощаемого атомом водорода при переходе электрона с одного уровня на другой.

Величина

$$R = \frac{E_0}{4\pi\hbar} = \frac{e^4\mu}{4\pi\hbar^3} = 3{,}27 \cdot 10^{15}\, сек^{-1} \tag{3.10}$$

называется *постоянной Ридберга,* и впервые была вычислена теоретически Бором. Иногда постоянную Ридберга указывают в волновых числах, показывающих, сколько длин волн укладывается в $1\, см$. В этом случае

$$R = \frac{e^4\mu}{4\pi\hbar^3 c} = 109737{,}30\, см^{-1}. \tag{3.11}$$

Все частоты, относящиеся к переходам на один и тот же нижний уровень, образуют *спектральную серию*.

Переходы на уровень $n = 1$ образуют *серию Лаймана*. Частоты серии Лаймана вычисляются по формуле

$$\nu = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 2, 3, \ldots \tag{3.12}$$

Среди этих спектральных линий линия $n=2$ имеет наибольшую длину волны $\lambda = 1215{,}68$ Å.. Она находится в ультрафиолетовой части спектра.

Переходы на уровень $n=2$ соответствуют излучению *видимого света.* Совокупность этих спектральных линий образует серию Бальмера. Частоты этой серии вычисляются по формуле

$$\nu = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 2, 3, \ldots \tag{3.13}$$

Другие серии, соответствующие переходам на уровни $n = 3, 4$ *и* $5$ называют сериями Ритца-Пашена, Брэкета и Пфунда соответственно. Линии этих серий лежат в инфракрасной области спектра.

Спектры водородоподобных ионов $He^{+}, Li^{++}$ и т.д. имеют такой же вид, как и рассмотренный спектр водорода, но все линии перемещаются в область более коротких длин волн, так как в этих случаях постоянную Ридберга следует увеличить в $Z^2$ раз. Частоты этих ионов будут вычисляться по формуле

$$\nu = Z^2 R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad m < n. \tag{3.14}$$

Обратимся теперь к более детальному анализу квантовых состояний и соответствующих собственных функций $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$.

Составим таблицу

| № | Оператор | Собств. знач. | Кв. число | Знач.кв. числа | Собственная функция |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | $\hat{H}$ | $E_n = -\dfrac{\mu Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2}$ | $n$ | $1, 2, 3, \ldots$ | $\psi = R_{nl}(\rho) Y_l^m(\theta, \varphi)$ |
| 2 | $\hat{M}^2$ | $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ | $l$ | $0, 1, 2, 3, \ldots, (n-1)$ | $Y_l^m(\theta, \varphi) = P_l^{\lvert m \rvert} e^{im\varphi}$ |
| 3 | $\hat{M}_z$ | $M_z = \hbar m$ | $m$ | $0, \pm 1, \pm 2, \mp 3, \ldots l$ | $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$ |

Все три оператора $\hat{H}$, $\hat{M}^2, \hat{M}_z$ имеют общую собственную функцию $e^{im\varphi}$ при фиксированных значениях переменных $r$ и $\theta$. Поэтому изображаемые ими величины одновременно измеримы. Таким образом, три квантовых числа $n, l, m$ полностью определяют состояние системы, а величины $E_n$, $M^2, M_z$ образуют полный набор.

Каждое из стационарных состояний с определенным значением $l$ является $2l+1$-кратно вырожденным $2l+1$ значениями $m$. Состояния, относящиеся к разным значениям квантового числа $l$ обозначаются малыми латинскими буквами: $l=0$ – $s$; $l=1$ – $p$; $l=2$ – $d$; $l=3$ – $f$; $l=4$ – $g$ и далее в порядке обычного латинского алфавита.

Тогда, например, состояние, при котором $n=2, l=1, m=\pm 1$ можно записать так $2p$ - здесь число равно значению главного квантового числа, а буква соответствует значению $l$. Например, $3s\ (n=3, l=0)$.

Найдем теперь вероятность обнаружения электрона, находящегося в различных квантовых состояниях, в окрестности точки с координатами $r, \theta, \varphi$. Она определяется выражением

$$dW_{nlm} = \left|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\right|^2 r^2\, dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\ . \tag{3.15}$$

Полярная ось $z$ выделяется тем, что она есть как раз то направление, на которое проектируется момент импульса $M_z = \hbar m$. Если проинтегрировать выражение (3.15) по всем углам, то мы получим вероятность найти электрон между двумя сферами радиусов $r$ и $r + dr$. Обозначим эту вероятность

$$dW_{nl} = R_{nl}^2\left(\frac{2r}{na}\right) r^2\, dr\ . \tag{3.16}$$

Перейдем в этом выражении к переменной $\rho = \dfrac{r}{\beta}$, получим

$$dW_{nl} = \beta^3 R_{nl}^2(\rho)\rho^2\, d\rho\ . \tag{3.17}$$

Отсюда, учитывая выражение (2.18) для функции $R_{nl}(\rho)$, вместо (3.17) получаем

$$dW_{nl} = \beta^3 N_{nl}^2 e^{-\rho} \rho^{2l} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \rho^2 d\rho \qquad (3.18)$$

Вычислим нормировочный множитель $N_{nl}^2$. Для этого проинтегрируем выражение (3.18) в пределах $(\textit{от}\ 0\ \textit{до}\ \infty)$ и результат приравняем единице в соответствии с условием нормировки (2.19)

$$\beta^3 N_{nl}^2 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \rho^2 d\rho = 1\,. \qquad (3.19)$$

Вычислим интеграл *(см. приложение 8)*

$$\beta^3 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \rho^2 d\rho = \beta^3 \int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{(2l+1)+1} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 d\rho =$$
$$= \beta^3 \left[(2l+1) + 2(n-l-1) + 1\right] \frac{\Gamma\left[(2l+1) + (n-l-1) + 1\right]}{(n-l-1)!} = \beta^3 (2n) \frac{\Gamma(n+l+1)}{(n-l-1)!}. \qquad (3.20)$$

Упрощая выражение (3.20) с учетом того, что:

$$\Gamma(n+l+1) = (n+l)!,$$

вместо равенства (3.19) получим

$$N_{nl}^2 (2n) \beta^3 \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} = 1\,. \qquad (3.19a)$$

Отсюда находим

$$N_{nl}^2 = \frac{1}{2n} \beta^{-3} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}\,. \qquad (3.21)$$

Напомним, что функции $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ определяются формулой

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = \frac{1}{(n-l-1)!} e^{\rho} \rho^{-(2l+1)} \frac{d^{n-l-1}}{d\rho^{n-l-1}} \left(e^{-\rho} \rho^{n+l}\right). \qquad (3.22)$$

Таким образом, формулы (3.18), (3.21) и (3.22) позволяют определить искомую вероятность $dW_{nl}$. Запишем ее в развернутом виде

$$dW_{nl} = \left(\frac{1}{2n(n+l)!(n-l-1)!}\right) e^{\rho} \rho^{-2l} \left[\frac{d^{n-l-1}}{d\rho^{n-l-1}} \left(e^{-\rho} \rho^{n+l}\right)\right]^2 d\rho$$

Введем новую переменную

$$\xi = \frac{r}{a}. \tag{3.23}$$

Учитывая, что $\rho = \frac{r}{\beta}$, и $\beta = \frac{na}{2}$, получаем

$$\rho = \frac{2}{n}\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{2}{n}\xi. \tag{3.24}$$

В результате $dW_{nl}$ принимает вид:

$$dW_{nl} = \left(\frac{2}{n}\right)^{2l+3}\left(\frac{1}{2n(n+l)!(n-l-1)!}\right)e^{\frac{2}{n}\xi}\xi^{-2l}\left[\frac{d^{n-l-1}}{d\xi^{n-l-1}}\left(e^{-\frac{2}{n}\xi}\xi^{n+l}\right)\right]^2 d\xi. \tag{3.25}$$

Пользуясь формулой (3.25) найдем вероятность $dW_{10}$

$$dW_{10} = 4 \cdot e^{-2\xi}\xi^2 d\xi. \tag{3.26}$$

Построим график плотности вероятности, т.е. график функции

$$\omega_{10}(\xi) = 4 \cdot e^{-2\xi}\xi^2. \tag{3.27}$$

$\omega(\xi) := e^{-\xi} \cdot \xi \cdot 2$

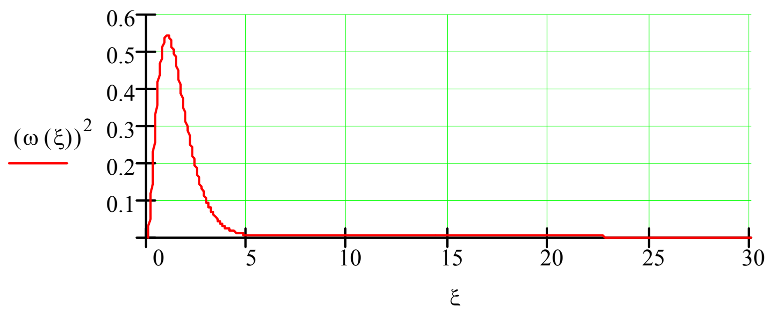



Рис. 1. График плотности вероятности функции $R_{10}$

Найдем максимум функции $\omega_{10}(\xi)$. Для этого вычислим производную $\frac{d\omega_{10}}{d\xi}$ и приравняем ее нулю

$$\frac{d\omega_{10}}{d\xi} = 4\left(2\xi e^{-2\xi} - 2\xi^2 e^{-2\xi}\right) = 0 .$$

Отсюда следует, что максимум плотности вероятности получается при $\xi = 1$. Это значит, что в состоянии $1S$, $(n = 1,\ l = 0,\ m = 0)$ наиболее вероятно найти электрон на расстоянии $r = a$ от ядра. Действительно, из равенства

$$\xi = \frac{r}{a} = 1. \tag{3.28}$$

сразу получаем, что величина $r$ – есть в точности радиус первой орбиты Бора.

Так как нижняя орбита по теории Бора круговая, то по этой теории вероятность найти электрон в состоянии $n = 1$ отлична от нуля лишь на сфере радиуса $r = a$. Согласно же новой квантовой механике эта вероятность отлична от нуля во всем пространстве, но максимум ее совпадает с классическим значением. Такое соответствие наблюдается и для других состояний. Однако оно не является полным. Это видно уже из того, что в квантовой механике в нижнем состоянии момент импульса $M_l^2 = 0\ (l = 0)$, в то время как по старой теории в этом состоянии $M_l^2 = \hbar^2$.

Обратимся теперь к распределению вероятности по углам. Если проинтегрировать выражение (3.15) по $r$ *от* $0$ *до* $\infty$, то мы получим вероятность $dW_{lm} = \omega_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega$ того, что электрон окажется где то в телесном угле $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ около луча $(\theta,\varphi)$. В силу нормировки функции $R_{nl}$ получаем

$$dW_{lm} = Y_{lm}(\theta,\varphi)Y^*_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega . \tag{3.29}$$

Из вида функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ следует, что искомая вероятность не зависит от угла $\varphi$ и равна:

$$dW_{lm} = A_{lm}^2\left[P_l^{|m|}(\cos\theta)\right]^2 d\Omega . \tag{3.30}$$

Нормировочный коэффициент, в соответствии с (1.41), вычисляется по формуле

$$A_{lm}^2=\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}. \qquad (3.31)$$

Следовательно, распределение по углам обладает осевой симметрией относительно той оси, на которую фиксирована проекция момента импульса (в нашем случае это ось OZ).

На основании формулы (3.30) заключаем, что плотность вероятности углового распределения в общем виде может быть записана следующим образом

$$w_{lm}(\theta)=\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\cdot\left[P_l^{|m|}(\cos\theta)\right]^2. \qquad (3.32)$$

Пользуясь формулой (3.32) находим плотность вероятности

$$\omega_{00}(\theta)=\frac{1}{4\pi}. \qquad (3.33)$$

Соответственно, плотность вероятности

$$\omega_{11}(\theta)=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta. \qquad (3.34)$$

Очевидно, что

$$\omega_{1-1}(\theta)=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta. \qquad (3.35)$$

Аналогичные вычисления дают

$$\omega_{10}(\theta)=\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta. \qquad (3.36)$$

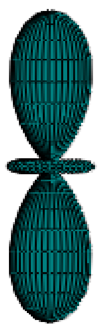
Графики этих функций легко строятся в среде Mathcad.

Состояние, в котором момент импульса равен нулю $(l=0)$ или $1S$ - *состояние,* характеризуется шаровой симметрией. Анализ состояния $2P$, т.е. состояния с $(l=1)$ и $(m=0,\pm1)$ показывает, что если по боровской теории в случае, например, $(m=\pm1)$ вероятность найти электрон отлична от нуля лишь в плоскости орбит $\left(\theta=\frac{\pi}{2}\right)$, то по квантовой механике она не равна нулю и для других значений угла $(\theta)$. Соответствие замечается в том, что максимум вероятности лежит при $\left(\theta = \frac{\pi}{2}\right)$. Подобное соответствие имеется и для $(m = 0)$.

Состояние $3d$ есть состояние, при котором $(l = 2)$ и $(m = 0, \pm 1, \pm 2)$. Для случая $(l = 2)$ и $(m = 1)$ имеем плотность вероятности

$$\omega_{21}(\theta) = \frac{15}{8\pi} \sin^2\theta \cos^2\theta \ . \tag{3.37}$$

Вид вероятностей $\omega_{lm}(\theta)$ позволяет нам составить некоторое представление о форме атома в различных состояниях. Электрон как будто размазывается в пространстве, образуя облако определенной формы. Эта форма определяется значением орбитального квантового числа $l$, а магнитное квантовое число $m$ определяет ориентацию атома в пространстве. На рисунке 2 показан вид электронного облака атома водорода в состоянии с квантовыми числами $l = 2,\ m = 0$



$F_{20}$

Рис.2. Электронное облако атома водорода, соответствующее состоянию с квантовыми числами $l = 2, m = 0$.

# П Р И Л О Ж Е Н И Я

## 1. Соотношения ортогональности полиномов Лежандра

**Определение.** Многочленами Лежандра называются функции $P_l(x)$, являющиеся решениями уравнения Лежандра

$$\frac{d}{dx}\left(1-x^2\right)\frac{dP_l}{dx}+l(l+1)P_l=0. \qquad (1.1)$$

Они могут быть вычислены по формуле (Родрига)

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l\cdot l!}\cdot\frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l. \qquad (1.2)$$

**Теорема.** Многочлены Лежандра $P_0(x), P_1(x), P_2(x), P_3(x), \ldots$ образуют ортогональную систему функций на отрезке $[-1,1]$. При этом

$$\left(P_l,P_k\right)=\int_{-1}^{1}P_l(x)P_k(x)\,dx=\frac{2}{2l+1}\delta_{lk}. \qquad (1.3)$$

*Доказательство*. Рассмотрим дифференциальный оператор

$$L=\left(1-x^2\right)\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}=\frac{d}{dx}\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}. \qquad (1.4)$$

Запишем уравнение Лежандра, используя обозначение (1.4)

$$L\,P_l(x)=-l(l+1)P_l(x). \qquad (1.5)$$

Докажем, что оператор $L$ является симметричным, то есть

$$\left(Lf,g\right)=\left(f,Lg\right)$$

Вычислим сначала левую часть этого равенства

$$\left(Lf,g\right)=\int\limits_{-1}^{1}\left(Lf(x)\right)g(x)\,dx=\int\limits_{-1}^{1}\left[\left(1-x^2\right)f'(x)\right]'g(x)\,dx=\begin{vmatrix} g(x)=u \\ \left[\left(1-x^2\right)f'(x)\right]'dx=dv \end{vmatrix}=$$

$$=\left(1-x^2\right)f'(x)g(x)\Big|_{-1}^{1}-\int\limits_{-1}^{1}\left[\left(1-x^2\right)f'(x)\right]g'(x)\,dx=-\int\limits_{-1}^{1}\left[\left(1-x^2\right)f'(x)\right]g'(x)\,dx; \qquad (1.6)$$

Аналогичным образом находим, что

$$\left(f,Lg\right)=\int\limits_{-1}^{1}\left(Lf(x)\right)g(x)\,dx=-\int\limits_{-1}^{1}\left[\left(1-x^2\right)f'(x)\right]g'(x)\,dx; \qquad (1.7)$$

Сравнение выражений (1.6) и (1.7) показывает, что оператор $L$ является симметричным.

Возьмем теперь в качестве функций $f$ и $g$ полиномы $P_l$ и $P_k$. Получим

$$\left(LP_l,P_k\right)=-l(l+1)\cdot\left(P_l,P_k\right). \qquad (1.8)$$

С другой стороны

$$\left(P_l,LP_k\right)=-k(k+1)\left(P_l,P_k\right). \qquad (1.9)$$

Тогда имеем равенство

$$-l(l+1)\left(P_l,P_k\right)=-k(k+1)\left(P_l,P_k\right)$$

или

$$\left[k(k+1)-l(l+1)\right]\left(P_l,P_k\right)=0\,. \qquad (1.10)$$

Отсюда получаем

$$\left[(k-l)(k+l+1)\right]\left(P_l,P_k\right)=0\,. \qquad (1.11)$$

Таким образом, ясно, что при $k\neq l$ $\left(P_l,P_k\right)=0$.

Найдем теперь

$$\left(P_l,P_l\right)=\int_{-1}^{1}P_l(x)P_l(x)dx=\left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2\int_{-1}^{1}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l)}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l)}dx\,. \qquad (1.12)$$

Будем интегрировать по частям

$$\left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2\int_{-1}^{1}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l)}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l)}dx=\left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2\left\{\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^l\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l-1)}\Bigg|_{-1}^{1}\right\}-$$

$$-\left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2\int_{-1}^{1}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l+1)}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(l-1)}dx.$$

Внеинтегральный член, очевидно, равен нулю. Продолжая дальше интегрировать по частям, получим

$$\left(P_l,P_l\right)=\left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2(-1)^l\int_{-1}^{1}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]^{(2l)}\left[\left(x^2-1\right)^l\right]dx=\left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2(-1)^l\,(2l)!\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^l dx\,.$$

Рассмотрим отдельно интеграл

$$J_l=\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^l dx=\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^{l-1}\left(x^2-1\right)dx=\int_{-1}^{1}x^2\left(x^2-1\right)^l dx-J_{l-1}=$$

$$=\int_{-1}^{1}x^2\left(x^2-1\right)^l dx=\begin{vmatrix}x=u,\\ x\left(x^2-1\right)^{l-1}dx=dv\end{vmatrix}=\frac{1}{2}x\frac{\left(x^2-1\right)^l}{l}\Bigg|_{-1}^{1}-\frac{1}{2\cdot l}\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^l dx-J_{l-1}=$$

$$=\frac{1}{2\cdot l}J_l-J_{l-1}.$$

Из этого равенства находим

$$J_l=-\frac{2l}{2l+1}J_{l-1}\,. \qquad (1.13)$$

Используя формулу (1.13) многократно, получаем

$$J_l = -\frac{2l}{2l+1}J_{l-1} = \frac{2l}{2l+1}\cdot\frac{2l-2}{2l-1}J_{l-2} - \ldots = (-1)^l \frac{[2l(2l-2)\ldots 2]}{(2l+1)(2l-1)\ldots}J_0 =$$

$$(-1)^l \frac{[2l(2l-2)\ldots 2]\cdot[2l(2l-2)\ldots 2]}{(2l+1)(2l-1)\ldots 3\cdot[2l(2l-2)\ldots 2]}J_0 = (-1)^l \frac{\left(2^l\cdot l!\right)^2}{(2l+1)!}\cdot 2.$$

С учетом этого, находим

$$(P_l, P_l) = \left(\frac{1}{2^l\cdot l!}\right)^2 (-1)^l (2l)!\cdot(-1)^l \frac{\left(2^l\cdot l!\right)^2}{(2l+1)!}\cdot 2 = \frac{2}{2l+1}. \tag{1.14}$$

## 2. Соотношения ортогональности обобщенных функций Лежандра

**Определение.** Обобщенными функциями Лежандра называются функции $P_l^m(x)$, являющиеся решениями обобщенного уравнения Лежандра

$$\frac{d}{dx}\left(1-x^2\right)\frac{dP_l^m}{dx} + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right)P_l^m = 0. \tag{2.1}$$

Эти функции могут быть вычислены по формуле

$$P_l^m(x) = \left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m}P_l(x), \quad m \le l. \tag{2.2}$$

**Теорема.** Обобщенные функции Лежандра, образуют ортогональную систему функций на отрезке $[-1, 1]$.

$$\left(P_l^m, P_k^m\right) = \begin{cases} 0, & l \ne k, \\ \dfrac{2}{2l+1}\cdot\dfrac{(l+m)!}{(l-m)!} & l = k. \end{cases} \tag{2.3}$$

*Доказательство*. Равенство нулю $\left(P_l^m, P_k^m\right)$ при $l \ne k$ доказывается аналогично тому, как это сделано для полиномов $P_l$ *и* $P_k$ при $l \ne k$. Только в качестве оператора $L$ нужно взять оператор

$$L = \frac{d}{dx}\left(1 - x^2\right)\frac{d}{dx} - \frac{m}{1 - x^2} \quad . \tag{2.4}$$

Докажем соотношения ортогональности для $m = 1$.

$$\left(P_l^1, P_k^1\right) = \int_{-1}^{1}\left(1 - x^2\right)\frac{dP_l}{dx}\frac{dP_l}{dx}dx = \left|\begin{array}{l} \frac{dP_l}{dx}dx = dv \\ \left(1 - x^2\right)\frac{dP_l}{dx} = u \end{array}\right| = -\int_{-1}^{1}\left[\left(1 - x^2\right)\frac{dP_l}{dx}\right]' P_l(x)dx =$$

$$= l\,(l + 1)\int_{-1}^{1}\left[P_l(x)\right]^2 dx = l\,(l + 1)\frac{2}{2l + 1} = \frac{2}{2l + 1}\cdot\frac{(l + 1)!}{(l - 1)!}. \tag{2.5}$$

Для других значений $m$ доказательство проводится аналогично.

### 3. Соотношения ортогональности сферических функций

**Определение.** Сферическими функциями $Y_l^m(\theta, \varphi)$ называются функции, являющиеся решениями дифференциального уравнения

$$\Delta_{\theta\varphi} Y_l^m = -l(l + 1)Y_l^m, \tag{3.1}$$

Здесь

$$\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{3.2}$$

Это, так называемая угловая часть оператора Лапласа. Сферические функции обычно представляют в виде

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\varphi}, \quad l \geq |m|. \tag{3.3}$$

**Теорема.** Сферические функции образуют ортогональную систему функций на сфере, причем

$$\left(Y_n^m, Y_l^k\right) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_n^m\left(Y_l^k\right)^* \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \begin{cases} 0, & \text{если} \quad k \neq m \ \text{ или } \ n \neq l, \\ \frac{4\pi}{2l + 1}\cdot\frac{(l + |m|)!}{(l - |m|)!}, & \text{если} \quad k = m \quad \text{и} \quad n = l. \end{cases} \tag{*}$$

Доказательство:

$$\left(Y_n^m, Y_l^k\right) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} P_n^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} P_l^{|k|}(\cos\theta) e^{-ik\varphi} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi =$$

$$= \int_0^{\pi} P_n^{|m|}(\cos\theta) P_l^{|k|}(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-k)\varphi} d\varphi. \tag{3.4}$$

Интеграл

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-k)\varphi} d\varphi = \begin{cases} 0, & m \neq k, \\ 2\pi, & m = k. \end{cases} \tag{3.5}$$

Поэтому при $m = k$ имеем

$$\left(Y_n^m, Y_l^k\right) = 2\pi \cdot \int_0^{\pi} P_n^{|m|}(\cos\theta) P_l^{|k|}(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta =$$

$$= 2\pi \cdot \int_{-1}^{1} P_n^{|m|}(x) P_l^{|m|}(x) \, dx = \begin{cases} 0 & \textit{при} \quad n \neq l, \\ \dfrac{4\pi}{2l+1} \cdot \dfrac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} & \textit{при} \quad n = l. \end{cases} \tag{3.6}$$

## 4. Гамма-функция

**Определение.** Гамма-функцией называется

$$\Gamma(a) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{a-1} dx. \tag{4.1}$$

Пусть $a > 0$

$$\Gamma(a+1) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^a dx = \begin{vmatrix} e^{-x} dx = dv \\ x^a = u \end{vmatrix} =$$

$$= -e^{-x} x^a \Big|_0^{\infty} + a\int_0^{\infty} e^{-x} x^{a-1} dx = a \cdot \Gamma(a). \tag{4.2}$$

Таким образом, имеем

$$\Gamma(a+1) = a \cdot \Gamma(a) \ . \tag{4.3}$$

Найдем $\Gamma(1)$

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-x} dx = -e^{-x} \Big|_0^\infty = 1 \, . \tag{4.4}$$

Поэтому очевидно

$$\Gamma(n+1) = n \cdot \Gamma(n) = n \cdot (n-1) \cdot \Gamma(n-1) \ldots 1 = n!$$

$$\Gamma(n+1) = n! \, . \tag{4.5}$$

Гамма-функция распространяет факториал с натуральных чисел на все положительные числа.

$$\Gamma(a) = \frac{\Gamma(a+1)}{a} \sim \frac{1}{a} \quad \text{при } a \to 0$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty e^{-x} x^{-\frac{1}{2}} dx = \begin{vmatrix} x = t^2 \\ dx = 2t\,dt \end{vmatrix} = 2 \cdot \int_0^\infty e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi} \ . \tag{4.6}$$

Полезная формула

$$\int_0^{\pi/2} \sin^n x \cdot \cos^m x \, dx = \frac{1}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \cdot \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n+m+2}{2}\right)} \, . \tag{4.7}$$

## 5. Полиномы Лагерра

Пусть требуется найти ограниченное на полуоси $x \geq 0$ решение уравнения (его называют уравнением Лагерра)

$$xy'' + (1-x)y' + my = 0 \, , \tag{5.1}$$

которое растет при $x \to \infty$ не быстрее некоторой степени $x$.

Будем искать решение уравнения (5.1) в виде ряда

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^k \ . \qquad (5.2)$$

Подставляя (5.2) в (5.1), находим

$$C_k k(k-1)x^{k-1} + C_k k x^{k-1} - C_k k x^k + mC_k x^k = 0 \, .$$

Приравнивая теперь коэффициенты при $x^k$, приходим к рекуррентному соотношению для коэффициентов

$$C_{k+1}(k+1)k + C_{k+1}(k+1) - C_k k + mC_k = 0 \, .$$

$$C_{k+1} = C_k \frac{k-m}{(k+1)^2} \, . \qquad (5.3)$$

Все коэффициенты $C_N$, $N = k+1, k+2, \ldots$ равны нулю, так как $C_{k+1} = 0$ при $k = m$. Поэтому искомое решение есть многочлен степени $m$.

$$y = \sum_{k=0}^{m} C_k x^k \ .$$

Положим в формуле (E.3) вместо индекса $k$ значение $k-1$

$$C_{k-1} = C_k \frac{k^2}{k-1-m}$$

При $k = m$ имеем

$$C_{m-1} = C_m \frac{m^2}{m-1-m} = -C_m m^2 \, ;$$

При $k = m-1$

$$C_{m-2} = C_{m-1} \frac{(m-1)^2}{m-1-1-m} = -C_m m^2 \frac{(m-1)^2}{-2} = C_m m^2 \frac{(m-1)^2}{2} \, ;$$

При $k = m-2$

$$C_{m-3} = -C_m m^2 \frac{(m-1)^2}{-2} = C_m m^2 \frac{(m-1)^2 (m-2)^2}{1 \cdot 2 \cdot 3} \, ;$$

При $k = m-p$

$$C_{m-p} = (-1)^p C_m \frac{[m(m-1)(m-2)\ldots(m-p+1)]^2}{p!} = (-1)^p C_m \frac{m!^2}{(m-p)!^2 \ p!} \, . \qquad (5.4)$$

Это коэффициент при $x^{m-p}$, то есть при $x^k$. Поэтому из равенства $k=m-p$ находим: $p=m-k$. С учетом этих обозначений выражение (4) принимает вид

$$C_k = (-1)^{m-k} C_m \frac{m!^2}{(k)!^2 (m-k)!}.$$

Поэтому искомое решение может быть записано в виде

$$y = \sum_{k=0}^{m} C_k x^k = (-1)^m m! C_m \sum_{k=0}^{m} (-1)^k \frac{m! \cdot x^k}{(m-k)! \cdot k! \cdot k!}. \qquad (5.5)$$

Учитывая, что

$$C_m^k = \frac{m!}{(m-k)! \cdot k!} \text{ и полагая } C_m = \frac{(-1)^m}{m!},$$

вместо (5.5) получаем

$$y = L_m(x) = \sum_{k=0}^{m} (-1)^k \cdot C_m^k \cdot \frac{x^k}{k!}. \qquad (5.6)$$

Эти многочлены называются полиномами Лагерра. Их удобно находить по формуле

$$L_m(x) = \frac{1}{m!} e^x \frac{d^m}{dx^m}\left(x^m e^{-x}\right). \qquad (5.7)$$

*Доказательство*. Пользуясь формулой Лейбница, получаем

$$\left[x^m e^{-x}\right]^{(m)} = \sum_{k=0}^{m} C_m^k \left(e^{-x}\right)^{(k)} \left(x^m\right)^{(m-k)}.$$

Вычислим отдельно производную $\left(x^m\right)^{(m-k)}$.

$$\left(x^m\right)^{(1)} = m \cdot x^{m-1},$$
$$\left(x^m\right)^{(2)} = m(m-1) \cdot x^{m-2},$$
$$\left(x^m\right)^{(3)} = m(m-1)(m-2) \cdot x^{m-3},$$
..............................................

..............................................
$$\left(x^m\right)^{(p)} = m(m-1)(m-p+1) \cdot x^{m-p},$$
*полагая теперь* $p = m - k$, *находим*
$$\left(x^m\right)^{(m-k)} = \frac{m!}{k!} x^k.$$

Учитывая, что $\left(e^{-x}\right)^{(k)} = (-1)^k e^{-x}$, получаем
$$\left[x^m e^{-x}\right]^{(m)} = e^{-x} \sum_{k=0}^{m} C_m^k (-1)^k \frac{m!}{k!} x^k .$$

Подставляя это значение в формулу (5.7), находим
$$L_m(x) = \frac{1}{m!} e^x e^{-x} \sum_{k=0}^{m} C_m^k (-1)^k \frac{m!}{k!} x^k = \sum_{k=0}^{m} (-1)^k C_m^k \frac{x^k}{k!} .$$

## 6. Соотношения ортогональности полиномов Лагерра

**Теорема.** Многочлены $e^{-\frac{x}{2}} L_n(x)$ образуют полную и ортогональную систему функций на полупрямой $[0, \infty)$. При этом
$$\int e^{-x} L_n(x) L_m(x) dx = \begin{cases} 0, & при \;\; n \neq m, \\ 1, & при \;\; n = m. \end{cases}$$

***Доказательство.*** Пусть $n > m$. Докажем, что
$$\int_0^\infty e^{-x} x^m L_n(x) dx = 0 . \qquad (6.1)$$

Будем вычислять этот интеграл методом по частям

$$\int_0^\infty e^{-x}x^m L_n(x)dx=\frac{1}{n!}\int_0^\infty x^m\left[e^{-x}x^n\right]^{(n)}dx=\left|\begin{array}{l} x^m=u, \\ \left[e^{-x}x^n\right]^{(n)}dx=dv \\ m\cdot x^{m-1}dx=du, \\ \left[e^{-x}x^n\right]^{(n-1)}=v \end{array}\right|=\frac{1}{n!}x^m\left(e^{-x}x^n\right)^{(n-1)}\Bigg|_0^\infty-$$

$$-\frac{m}{n!}\int_0^\infty x^{m-1}\cdot\left(e^{-x}x^n\right)^{(n-1)}dx=(-1)^m\frac{m!}{n!}\int_0^\infty\left(e^{-x}x^n\right)^{(n-m)}dx=(-1)^m\frac{m!}{n!}\left(e^{-x}x^n\right)^{(n-m-1)}\Bigg|_0^\infty=0.$$

Пусть $n\geq 1$. Рассмотрим интеграл

$$\int_0^\infty e^{-x}\left[L_n(x)\right]^2dx=\frac{1}{n!}\int_0^\infty L_n(x)\cdot\left(e^{-x}x^n\right)^{(n)}dx=\frac{1}{n!}L_n(x)\cdot\left(e^{-x}x^n\right)^{(n-1)}\Bigg|_0^\infty-$$

$$-\frac{1}{n!}\int_0^\infty\left[L_n(x)\right]'\cdot\left(e^{-x}x^n\right)^{(n-1)}dx=\ldots=\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\infty\left[L_n(x)\right]^{(n)}e^{-x}x^n\,dx=$$

$$=\left|\left[L_n(x)\right]^{(n)}=(-1)^n\right|=\frac{1}{n!}\int_0^\infty e^{-x}x^n\,dx=\frac{1}{n!}\Gamma(n+1)=1.$$

## 7. Обобщенные функции Лагерра

Рассмотрим уравнение (оно называется обобщенным уравнением Лагерра)

$$xy''+(\alpha+1-x)y'+my=0. \tag{7.1}$$

Требуется найти решение этого уравнения, которое ограничено в точке $x=0$ и, которое растет на бесконечности не быстрее некоторой степени $x$. Будем искать решение этого уравнения в виде ряда

$$y=\sum_{k=0}^\infty C_k x^k \tag{7.2}$$

Коэффициенты при $x^k$ связаны соотношением

$$C_{k+1}(k+1)k + C_{k+1}(\alpha+1)(k+1) - C_k k + mC_k = 0$$

$$C_{k+1} = C_k \frac{k-m}{(k+1)(k+\alpha+1)}. \tag{7.3}$$

Все коэффициенты начиная с $C_{k+1}$ равны нулю, так как $C_{k+1} = 0$ при $k = m$. Поэтому искомое решение есть многочлен степени $m$.

$$y = \sum_{k=0}^{m} C_k x^k .$$

Положив в (7.3) вместо индекса $k$ значение $k-1$, получим

$$C_{k-1} = C_k \frac{k(k+\alpha)}{k-1-m}$$

При $k = m$ имеем

$$C_{m-1} = C_m \frac{m(m+\alpha)}{m-1-m} = -C_m m(m+\alpha);$$

При $k = m-1$

$$C_{m-2} = -C_m m(m+\alpha)\frac{(m-1)(m-1+\alpha)}{m-1-m} = C_m \frac{m(m-1)(m+\alpha)(m+\alpha-1)}{2};$$

При $k = m-p$

$$\begin{aligned} C_{m-p} &= (-1)^p C_m \frac{[m(m-1)\ldots(m-p+1)(m+\alpha)\ldots(m+\alpha-p+1)]}{p!} = \\ &= (-1)^p C_m \frac{m!(m+\alpha)(m+\alpha-1)\ldots(m+\alpha-p+1)}{(m-p)!\,p!}. \end{aligned} \tag{7.4}$$

Введем обозначение

$$\binom{a}{k} = \frac{a(a-1)\ldots(a-k+1)}{k!}. \tag{7.5}$$

Формула (7.4) дает коэффициент при $x^{m-p}$, то есть при $x^k$. Поэтому из равенства $k = m-p$ находим: $p = m-k$. С учетом этих обозначений выражение (7.4) принимает вид

$$C_k = (-1)^{m-k} C_m \frac{m!(m+\alpha)(m+\alpha-1)\ldots(k+\alpha+1)}{(k)!(m-k)!},$$

или с учетом обозначений (12)

$$C_k = m!(-1)^m C_m (-1)^k \binom{m+\alpha}{m-k} \cdot \frac{1}{k!}. \tag{7.6}$$

Таким образом, искомое решение может быть представлено в виде

$$y = (-1)^m m! C_m \sum_{k=0}^{m} (-1)^k \binom{m+\alpha}{m-k} \cdot \frac{x^k}{k!}. \tag{7.7}$$

Полагая в этой формуле $C_m = \frac{(-1)^m}{m!}$, окончательно получаем

$$L_m^\alpha(x) = \sum_{k=0}^{m} (-1)^k \binom{m+\alpha}{m-k} \cdot \frac{x^k}{k!}. \tag{7.8}$$

При $\alpha = 0$

$$L_m^\alpha(x) = L_m. \tag{7.9}$$

Формула (7.8) определяет, так называемые, *обобщенные функции Лагерра*. Их удобно вычислять по формуле

$$L_m^\alpha(x) = \frac{1}{m!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^m}{dx^m}\left(e^{-x} x^{m+\alpha}\right). \tag{7.10}$$

*Доказательство*. Пользуясь формулой Лейбница, получаем

$$\left[x^{m+\alpha} e^{-x}\right]^{(m)} = \sum_{k=0}^{m} C_m^k \left(e^{-x}\right)^{(k)} \left(x^{m+\alpha}\right)^{(m-k)} =$$

$$\sum_{k=0}^{m} \frac{m!}{k!(m-k)!} (-1)^k e^{-x} \cdot (m+\alpha)(m+\alpha-1)\ldots(k+\alpha+1) x^{k+\alpha} = m! e^{-x} x^\alpha \sum_{k=0}^{m} (-1)^k \binom{m+\alpha}{m-k} \cdot \frac{x^k}{k!}$$

## 8. Соотношения ортогональности обобщенных функций Лагерра

Итак, обобщенные функции Лагерра вычисляются по формуле

$$L_m^\alpha(x) = \frac{1}{m!} e^x \cdot x^{-\alpha} \frac{d^m}{dx^m}\left(x^{m+\alpha} e^{-x}\right). \tag{8.1}$$

**Теорема.** Функции $e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{\alpha}{2}} L_n^\alpha(x)$ образуют ортогональную систему функций на полуоси $[0,\infty)$. При этом

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x)\,dx = \begin{cases} 0, & n \neq m, \\ \dfrac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!}, & n = m. \end{cases} \tag{8.2}$$

Докажем, что при $n > m$

$$\int_0^\infty e^{-x} x^\alpha x^m L_n^\alpha(x)\,dx = 0. \tag{8.3}$$

Имеем

$$\frac{1}{n!}\int_0^\infty e^{-x} x^{\alpha+m} e^x x^{-\alpha} \left(e^{-x} x^{\alpha+n}\right)^{(n)} dx = \frac{1}{n!}\int_0^\infty x^m \left(e^{-x} x^{\alpha+n}\right)^{(n)} dx\,. \tag{8.4}$$

Далее интегрируя по частям, получаем

$$\frac{1}{n!}\int_0^\infty x^m \left[e^{-x} x^{n+\alpha}\right]^{(n)} dx = \left| \begin{matrix} x^m = u, \\ \left[e^{-x} x^{n+\alpha}\right]^{(n)} dx = dv \\ m \cdot x^{m-1} dx = du, \\ \left[e^{-x} x^{n+\alpha}\right]^{(n-1)} = v \end{matrix} \right| = \frac{1}{n!} x^m \left(e^{-x} x^{n+\alpha}\right)^{(n-1)} \Big|_0^\infty -$$

$$-\frac{m}{n!}\int_0^\infty x^{m-1} \cdot \left(e^{-x} x^{n+\alpha}\right)^{(n-1)} dx = \ldots (-1)^m \frac{m!}{n!}\int_0^\infty \left(e^{-x} x^{n+\alpha}\right)^{(n-m)} dx =$$

$$
= (-1)^m \frac{m!}{n!} \left( e^{-x} x^{n+\alpha} \right)^{(n-m-1)} \Big|_0^{\infty} = 0 .
$$

Теперь вычислим интеграл

$$
\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} \left[ L_n^{\alpha}(x) \right]^2 dx = \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} L_n^{\alpha}(x) \left( e^{-x} x^{n+\alpha} \right)^{(n)} dx = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\infty} \left[ L_n^{\alpha}(x) \right]^{(n)} \left( e^{-x} x^{n+\alpha} \right) dx =
$$

$$
= \left| \left[ L_n^{\alpha}(x) \right]^{(n)} = (-1)^n \right| = \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{n+\alpha} dx = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}. \tag{8.5}
$$

Вычислим еще один интеграл

$$
\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha+1} \left[ L_n^{\alpha}(x) \right]^2 dx = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} L_n^{\alpha}(x) \left[ x L_n^{\alpha}(x) \right] dx . \tag{8.6}
$$

Для полиномов Лагерра $L_n^{\alpha}(x)$ известна рекуррентная формула (Г. Бейтмен, А. Эрдейи)

$$
x L_n^{\alpha}(x) = (\alpha + 2n + 1) L_n^{\alpha}(x) - (n+1) L_{n+1}^{\alpha}(x) - (\alpha + n) L_{n-1}^{\alpha}(x). \tag{8.7}
$$

Подставляя (8.7) в формулу (8.6) и учитывая соотношения ортогональности (8.5), находим

$$
\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha+1} \left[ L_n^{\alpha}(x) \right]^2 dx = (\alpha + 2n + 1) \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}. \tag{8.8}
$$

Покажем, что

$$
\left[ L_n^{\alpha}(x) \right]^{(n)} = (-1)^n . \tag{8.9}
$$

Для этого запишем выражение $L_n^{\alpha}(x)$ в виде

$$L_n^\alpha(x)=\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\binom{n+\alpha}{n-k}\cdot\frac{x^k}{k!}=\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(n+\alpha)(n+\alpha-1)\ldots(k+\alpha+1)}{(n-k)!}\cdot\frac{x^k}{k!}=$$

$$=\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(n+\alpha)(n+\alpha-1)\ldots(k+\alpha+1)}{(n-k)!}\cdot\frac{x^k}{k!}=\sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(n+\alpha)!}{(n-k)!(k+\alpha)!}\cdot\frac{x^k}{k!}.$$

Отсюда ясно, что коэффициент при $\frac{x^n}{n!}$ равен

$$(-1)^n\frac{(n+\alpha)!}{(n-n)!(n+\alpha)!}=(-1)^n.$$

Учитывая теперь, что производная

$$\left(\frac{x^n}{n!}\right)^{(n)}=1$$

Приходим к равенству (8.9).

## ЛИТЕРАТУРА


1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Высшая школа, 1961.
2. Бом Д. Квантовая теория. – М.: Физматгиз, 1961.
3. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1973.
4. Боум А. Квантовая механика. – М.: Мир,1990.
5. Вихман Э. Квантовая физика. – М.: Наука, 1986.
6. Грин Х. Матричная квантовая механика. М.: Мир, 1968.
7. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Физматгиз, 1968.
8. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. – М.: Наука, 1980.
9. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: Наука, 1978.
10. Ландсберг Г.С. Оптика.-М.: Наука,1976.
11. Матвеев А.Н Атомная физика. – М.: Высшая школа,1989.
12. Мессиа А. Квантовая механика. Т.1,2.-М.: Наука,1978.
13. Савельев Н.В. Основы теоретической физики. Т.2.Квантовая механика. – М.: Наука,1977.
14. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т.5. Атомная физика. – М.: Наука,1986.
15. Фейнман Р. Лейтон Р. Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т.8,9. Квантовая механика.– М.:Мир,1978.
16. Ферми Э. Ядерная физика.– М.:ИЛ,1951.
17. Фок В.А. Начала квантовой механики. – М.: Наука, 1976.
18. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. – М.: Физматгиз, 1963.
19. Шифф Л. Квантовая механика.– М.:ИЛ,1957.
20. Шпольский Э.В. Атомная физика.Т.1,2.-М.: Наука,1974.

21. Ярив А. Введение в теорию и приложения квантовой механики. – М.: Мир,1984.