ДОПОЛНЕНИЕ Б
СПЕЦИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ И СВЯЗАННЫЕ С НИМИ ФОРМУЛЫ

Раздел I. УРАВНЕНИЕ ЛАПЛАСА, ПОЛИНОМЫ ЛАГЕРРА, КУЛОНОВСКИЕ ФУНКЦИИ

§ 1. Уравнение Лапласа и вырожденная гипергеометрическая функция

Уравнением Лапласа называется уравнение типа

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(\beta-z)\frac{d}{dz}-\alpha\right]f(z)=0 \tag{1}$$

(здесь α и β — произвольные комплексные постоянные). Решение уравнения (1) можно искать в виде степенного ряда. Обычно *вырожденной гипергеометрической функцией* называется ряд вида

$$F(\alpha,\beta;\ z)=1+\frac{\alpha}{\beta}\cdot\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{z^2}{2!}+\ldots=$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\alpha+n)\,\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(\beta+n)}\cdot\frac{z^n}{n!}. \tag{2}$$

Этот ряд:

1) вполне определен для произвольных α и β при $\beta\neq-p$ (p целое $\geqslant 0$);

2) сходится во всей комплексной плоскости z;

3) является полиномом степени p (p целое $\geqslant 0$), если $\alpha=-p$, имеет существенно особую точку на бесконечности, если $\alpha\neq-p$;

4) удовлетворяет *соотношению Куммера*:

$$F(\alpha,\beta;\ z)=e^zF(\beta-\alpha,\ \beta;\ -z). \tag{3}$$

Нетрудно видеть, что если функции

$$F(\alpha,\beta;\ z)\quad \text{и}\quad z^{1-\beta}F(\alpha-\beta+1,\ 2-\beta;\ z)$$

существуют [1]), то они являются двумя линейно независимыми решениями уравнения (1),

По методу Лапласа решения уравнения (1) могут быть также представлены в виде контурных интегралов. Если Γ некоторый контур в комплексной

[1]) Если β не целое, то эти две функции существуют и различны. Если $\beta=1$, то они тождественны друг другу. Если $\beta=0,\ -1,\ -2,\ \ldots$, то существует только функция $z^{1-\beta}F(\alpha-\beta+1,\ 2-\beta;\ z)$. Если $\beta=2,\ 3,\ \ldots$, то существует только функция $F(\alpha,\beta;z)$.

плоскости t, такой, что функция $t^{\alpha}(1-t)^{\beta-\alpha}e^{zt}$ принимает одинаковые значения на его концах, то интеграл

$$\int_{\Gamma} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{\beta-\alpha-1}\,dt \tag{4}$$

является частным решением уравнения (1).

Предположим, что α не целое, $\beta=b$ (b целое >0). Замкнутому контуру Γ_0, охватывающему точки $t=0$ и $t=1$ (рис. 38)[2]), соответствует решение типа (4). По соглашению $\arg t - \arg(1-t) = 0$ на той части контура, где t изменяется вдоль действительной оси между 0 и 1 в направлении возрастающих t. Это решение, будучи целой функцией z, пропорционально $F(\alpha,\ \beta;\ z)$.

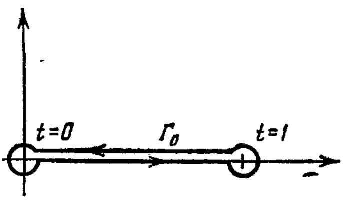

Рис. 38.

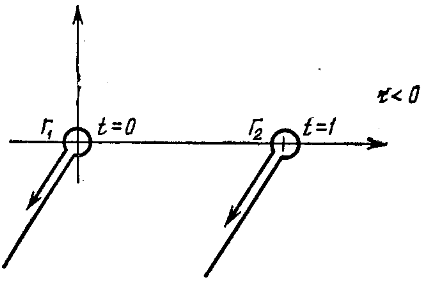

Рис. 39.

Коэффициент пропорциональности получается при разложении e^{zt} под знаком интеграла и применении формулы

$$B(x,\ y) \equiv \frac{\Gamma(x)\,\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} = \left(1-e^{2\pi iy}\right)^{-1}\int_{\Gamma_0} t^{x-1}(1-t)^{y-1}\,dt \tag{5}$$

($x+y=$ целое, y не целое).

Находим

$$F(\alpha,\ b;\ z) = \left(1-e^{-2\pi i\alpha}\right)^{-1}\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(b-\alpha)}\int_{\Gamma_0} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{b-\alpha-1}\,dt. \tag{6}$$

Двум петлям Γ_1 и Γ_2, обходящим точки $t=0$ и $t=1$ соответственно (рис. 39)[3]), отвечают два решения типа (4), нерегулярные в начале, именно

$$W_r(\alpha,\ b;\ z) = \left(1-e^{-2\pi i\alpha}\right)^{-1}\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(b-\alpha)}\int_{\Gamma_r} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{b-\alpha-1}\,dt \tag{7}$$

$$(r=1,\ 2).$$

Условие сходимости интеграла есть

$$\pi/2 < \arg z + \tau + 2n\pi < 3\pi/2$$

(τ — аргумент бесконечной точки на петлях Γ_1 и Γ_2).

---

[2]) Контур Γ_0 обходится в положительном направлении.

[3]) Γ_1 и Γ_2 проходятся в положительном направлении.

По соглашению [4]:

$$-\pi < \arg z < \pi, \quad -\pi < \tau < +\pi \text{ (знак } \tau = \text{знаку } \arg z).$$

В конце петли Γ_1 и в начале петли Γ_2:

$$\arg t = \tau,$$

$$\arg(1-t) = \begin{cases} \tau - \pi, & \text{если } \quad 0 < \tau < \pi, \\ \tau + \pi, & \text{если } \quad -\pi < \tau < 0. \end{cases}$$

При этих условиях

$$W_1(b-\alpha, b; -z) = e^{-z} W_2(\alpha, b; z), \tag{8а}$$

$$W_2(b-\alpha, b; -z) = e^{-z} W_1(\alpha, b; z) \tag{8б}$$

$$(-\pi < \arg z < +\pi; \quad -\pi < \arg(-z) < +\pi);$$

$$F(\alpha, b; z) = W_1(\alpha, b; z) + W_2(\alpha, b; z). \tag{9}$$

Асимптотические разложения решений W_1 и W_2 (они получаются методом скорейшего спуска):

$$W_1(\alpha, b; z) \underset{|z| \to \infty}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-\alpha)} (-z)^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \times \frac{\Gamma(n+\alpha-b+1)}{\Gamma(\alpha-b+1)} \frac{(-z)^n}{n!}, \tag{10}$$

$$(-\pi < \arg(-z) < +\pi)$$

$$W_2(\alpha, b; z) \underset{|z| \to \infty}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1-\alpha)}{\Gamma(1-\alpha)} \times \frac{\Gamma(n+b-\alpha)}{\Gamma(b-\alpha)} \cdot \frac{z^{-n}}{n!} \tag{11}$$

$$(-\pi < \arg z < +\pi).$$

§ 2. Полиномы Лагерра

Определение [5]:

$$L_p^0 = e^z \frac{d^p}{dz^p} (e^{-z} z^p), \quad L_p^k = (-1)^k \frac{d^k}{dz^k} L_{p+k}^0 \tag{12}$$

$$(k, p = 0, 1, 2, \ldots, \infty).$$

---

[4]) Это соглашение предполагает $\operatorname{Im} z \neq 0$. Чтобы определить W_1 и W_2 на действительной оси, необходимо осуществить аналитическое продолжение. При этом результаты будут различными в случаях $\operatorname{Im} z \to 0^+$ и $\operatorname{Im} z \to 0^-$.

[5]) Некоторые авторы символом L_p^k обозначают полином $(-1)^k L_{p-k}^k$ в наших обозначениях.

L_p^k есть полином степени p, обладающий p нулями между 0 и $+\infty$:

$$L_p^k(z) = \frac{[(p+k)!]^2}{p!k!} F(-p,\ k+1;\ z) = \\ = \sum_{s=0}^{p} (-1)^s \frac{[(p+k)!]^2}{(p-s)!(k+s)!s!} z^s. \tag{13}$$

В частности, $L_0^k = k!$

Дифференциальное уравнение (Лапласа):

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2} + (k+1-z)\frac{d}{dz} + p\right] L_p^k = 0. \tag{14}$$

Производящая функция:

$$\frac{e^{-\frac{zt}{1-t}}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{t^p}{(p+k)!} L_p^k(z) \qquad (|t| < 1). \tag{15}$$

Соотношения ортонормированности:

$$\int_0^{\infty} e^{-z} z^k L_p^k L_q^k \, dz = \frac{[(p+k)!]^3}{p!} \delta_{pq}. \tag{16}$$

§ 3. Собственные функции водородоподобных атомов (теория Шредингера)

Введем обозначения

$$a = \frac{a_0}{Z} = \frac{\hbar^2}{Zm'e^2},$$

a_0 — радиус орбиты Бора, Ze — заряд ядра, m' — приведенная масса электрона.

Собственные значения энергии:

$$E_n = -\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{m'c^2}{2n^2} = -\frac{1}{n^2}\frac{Ze^2}{2a}.$$

Нормированные на единицу собственные функции в сферических координатах выражаются формулами:

$$\Psi_{nlm}(r,\ \theta,\ \varphi) = a^{-3/2} N_{nl} F_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta,\ \varphi), \tag{17}$$

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}, \tag{17а}$$

$$F_{nl}(x) = x^l e^{-x/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \tag{17б}$$

$$(n = 1,\ 2,\ \ldots,\ \infty;\ l = 0,\ 1,\ \ldots,\ n-1;\ m = -l,\ -l+1,\ \ldots,\ l).$$

Приведем также *рекуррентное соотношение* между средними значениями степеней r, относящимися к одному собственному состоянию (nlm):

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle-(2s+1)\,a\langle r^{s-1}\rangle+\frac{s}{4}\left[(2l+1)^2-s^2\right]a^2\langle r^{s-2}\rangle=0$$

$$(s>-2l-1);$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=\frac{1}{n^2a};\quad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle=\frac{2}{(2l+1)\,n^3a^2};$$

$$\langle r\rangle=\frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]a;\quad \langle r^2\rangle=\frac{1}{2}\left[5n^2+1-3l(l+1)\right]n^2a^2.$$

Таблица первых радиальных функций:

$$\left(\rho=\frac{r}{a},\ g_{nl}(\rho)=N_{nl}F_{nl}\left(\frac{2}{n}\rho\right)\right);$$

$$n=1\qquad g_{1s}=2e^{-\rho},$$

$$n=2\qquad g_{2s}=\frac{\sqrt{2}}{2}\left(1-\frac{\rho}{2}\right)e^{-\rho/2},\qquad g_{2p}=\frac{\sqrt{6}}{12}\rho e^{-\rho/2},$$

$$n=3\qquad g_{3s}=\frac{2\sqrt{3}}{9}\left(1-\frac{2}{3}\rho+\frac{2}{27}\rho^2\right)e^{-\rho/3},$$

$$g_{3p}=\frac{8\sqrt{6}}{27}\left(\rho-\frac{\rho^2}{6}\right)e^{-\rho/2},\quad g_{3d}=\frac{2\sqrt{30}}{955}\rho^3e^{-\rho/3}.$$

§ 4. Чисто кулоновская волна

Пусть $\psi_C(\mathbf{r})$ есть стационарная волновая функция рассеяния частицы чисто кулоновским потенциалом $ZZ'e^2/r$, $k=mv/\hbar$ = волновое число, v = начальная скорость.

Пусть также

$$\gamma=\frac{ZZ'e^2}{\hbar v}. \tag{18}$$

Тогда:

$$\psi_c=e^{-\frac{\pi}{2}\gamma}\Gamma(1+i\gamma)\,e^{ikz}F(-i\gamma,\ 1;\ ik(r-z))= \tag{19}$$

$$=\psi_i+\psi_d, \tag{20}$$

$$\psi_i=e^{-\frac{\pi}{2}\gamma}\Gamma(1+i\gamma)\,e^{ikz}W_1(-i\gamma,\ 1;\ ik(r-z)), \tag{21}$$

$$\psi_d=e^{-\frac{\pi}{2}\gamma}\Gamma(1+i\gamma)\,e^{ikz}W_2(-i\gamma,\ 1;\ ik(r-z)). \tag{22}$$

Асимптотическая форма:

$$\psi_{i}\underset{k(r-z)\to\infty}{\sim}e^{ikz+i\gamma\ln k(r-z)}\left\{1+\frac{\gamma^2}{ik(r-z)}+\dots\right\}, \tag{23}$$

$$\psi_{d}\underset{k(r-z)\to\infty}{\sim}f_c(\theta)\,\frac{e^{i(kr-\gamma\ln 2kr)}}{r}\left\{1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ik(r-z)}+\dots\right\}, \tag{24}$$

где

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}} e^{-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)+2i\sigma_0}, \tag{25}$$

$$e^{2i\sigma_0} = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}. \tag{26}$$

Поведение вблизи начала координат:

$$\psi_c(0) = e^{-\frac{\pi}{2}\gamma}\Gamma(1+i\gamma), \quad |\psi_c(0)|^2 = \frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma}-1}. \tag{27}$$

§ 5. Сферические кулоновские функции

Дифференциальное уравнение.

В сферических координатах проблема рассеяния из § 4 приводит для каждого значения l момента импульса к *радиальному уравнению*

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\gamma k}{r}\right)\right] y_l = 0. \tag{28}$$

Сферические кулоновские функции являются частными решениями этого уравнения. Это функции аргумента $\rho = kr$. Они зависят от энергии частицы через k и γ. Определяют регулярное ($\sim r^{l+1}$) в начале решение $Fy(\gamma, kr)$ и нерегулярные решения G_l, $u_l^{(+)}$ и $u_l^{(-)}$ (сингулярность типа $1/r^l$).

При помощи замены

$$z = -2i\rho, \qquad y_l = e^{i\rho}\rho^{l+1}v_l$$

уравнение (28) сводится к уравнению Лапласа:

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2} + (2l+2-z)\frac{d}{dz} - (l+1+i\gamma)\right]v_l = 0,$$

регулярное в начале решение $F(l+1+i\gamma, 2l+2; z)$ и два нерегулярных решения $W_{1,2}(l+1+i\gamma, 2l+2; z)$ которого нам известны.

Определения и соотношения между функциями:

$$F_l(\gamma;\rho) = c_l e^{i\rho}\rho^{l+1}F(l+1+i\gamma, 2l+2; -2i\rho) =$$

$$= c_l e^{-i\rho}\rho^{l+1}F(l+1-i\gamma, 2l+2; 2i\rho), \tag{29б}$$

$$u_l^{(\pm)}(\gamma;\rho) = \pm 2ie^{\mp i\sigma_l}c_l e^{\pm i\rho}\rho^{l+1}W_1(l+1\pm i\gamma, 2l+2; \mp 2i\rho) = \tag{30а}$$

$$= \pm 2ie^{\mp i\sigma_l}c_l e^{\mp i\rho}\rho^{l+1}W_2(l+1\mp i\gamma, 2l+2; \pm 2i\rho), \tag{30б}$$

$$G_l(\gamma;\rho) = \frac{1}{2}\left(u_l^{(+)}e^{i\sigma_l} + u_l^{(-)}e^{-i\sigma_l}\right). \tag{31}$$

Величины c_l и σ_l (кулоновский фазовый сдвиг) являются следующими функциями γ:

$$c_l = 2^l e^{-\frac{\pi}{2}\gamma}\frac{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!}, \qquad \sigma_l = \arg\Gamma(l+1+i\gamma) \tag{32}$$

или:

для $l=0$

$$c_0=\left(\frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma}-1}\right)^{1/2},\qquad \sigma_0=\arg\Gamma(1+i\gamma), \tag{32а}$$

для $l\neq 0$

$$c_l=\frac{c_0}{(2l+1)!!}\cdot\prod_{s=1}^{l}\left(1+\frac{\gamma^2}{s^2}\right)^{1/2},\qquad \sigma_l=\sigma_0+\sum_{s=1}^{l}\operatorname{arctg}\frac{\gamma}{s}. \tag{32б}$$

F_l и G_l вещественны,

$$u_l^{(-)}=u_l^{(+)*},$$

$$F_l=\frac{1}{2i}\left(u_l^{(+)}e^{i\sigma_l}-u_l^{(-)}e^{-i\sigma_l}\right), \tag{33}$$

$$u_l^{(\pm)}=e^{\mp i\sigma_l}(G_l\pm iF_l). \tag{34}$$

Асимптотические формы ($r\to\infty$, $\rho\gg l(l+1)+\gamma^2$):

$$F_l\underset{\rho\to\infty}{\sim}\sin\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{l\pi}{2}+\sigma_l\right), \tag{35}$$

$$G_l\underset{\rho\to\infty}{\sim}\cos\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{l\pi}{2}+\sigma_l\right), \tag{36}$$

$$u_l^{(+)}\underset{\rho\to\infty}{\sim}\exp\left[i\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{l\pi}{2}\right)\right]\quad\text{(расходящаяся волна)}, \tag{37}$$

$$u_l^{(-)}\underset{\rho\to\infty}{\sim}\exp\left[-i\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{l\pi}{2}\right)\right]\quad\text{(сходящаяся волна)}. \tag{38}$$

Поведение вблизи начала координат ($r\to 0$):

$$F_l\underset{\rho\to 0}{\sim}c_l\rho^{l+1}\left[1+\frac{\gamma}{l+1}\rho+\ldots\right], \tag{39}$$

$$G_l\underset{\rho\to 0}{\sim}\frac{1}{(2l+1)c_l}\rho^{-l}\left[1+\begin{cases}O(\gamma\rho\ln\rho), & \text{если } l=0;\\ O\left(\frac{\gamma}{l}\rho\right), & \text{если } l\neq 0.\end{cases}\right] \tag{40}$$

Общее поведение функции F_l.

Когда ρ растет от 0 до ∞, функция F_l растет сначала как ρ^{l+1}, затем все быстрее (экспоненциально) до точки $\rho=\gamma+\sqrt{\gamma^2+l(l+1)}$, затем функция бесконечно осциллирует между двумя экстремальными значениями, которые асимптотически стремятся к $+1$ и -1; период осцилляций асимптотически стремится к 2π.

Рекуррентные формулы:

$$(2l+1)\left[\gamma+\frac{l(l+1)}{\rho}\right]F_l=$$
$$=l\sqrt{\gamma^2+(l+1)^2}\,F_{l+1}+(l+1)\sqrt{\gamma^2+l^2}\,F_{l-1}\qquad(l\neq 0), \tag{41}$$

$$\left(1+\frac{\gamma^2}{l^2}\right)^{1/2}F_{l-1}=\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{l}{\rho}+\frac{\gamma}{l}\right)F_l\qquad(l\neq 0), \tag{42}$$

$$\left(1+\frac{\gamma^2}{l^2}\right)^{1/2}F_l=\left(-\frac{d}{d\rho}+\frac{l}{\rho}+\frac{\gamma}{l}\right)F_{l-1}\qquad(l\neq 0). \tag{43}$$

Эти соотношения остаются справедливыми, если заменить F_l на $U_l = aF_l + bG_l$ (a, b — произвольно выбранные коэффициенты, не зависящие от l).

Определитель Вронского для функций G_l и F_l равен

$$G_l \frac{dF_l}{d\rho} - F_l \frac{dG_l}{d\rho} = 1, \tag{44}$$

откуда ($l \neq 0$)

$$G_l F_{l-1} - F_l G_{l-1} = \frac{l}{\sqrt{l^2+\gamma^2}}. \tag{45}$$

Если $\gamma = 0$, то с точностью до множителя ρ получаем сферические функции Бесселя:

$$\begin{aligned} F_l(0;\ \rho) &= \rho j_l(\rho), & G_l(0;\ \rho) &= \rho n_l(\rho), \\ u_l^{(+)}(0;\ \rho) &= \rho h_l^{(+)}(\rho), & u_l^{(-)}(0;\ \rho) &= \rho h_l^{(-)}(\rho) \end{aligned} \tag{46}$$

(определение j_l, n_l, $h_l^{(\pm)}$ см. в следующем разделе).

Раздел II. СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ БЕССЕЛЯ

§ 6. Сферические функции Бесселя

Дифференциальное уравнение.

В сферических координатах уравнение Шредингера для свободной частицы для каждого значения l момента импульса приводит к *радиальному уравнению* [6])

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f_l \equiv \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f_l = 0. \tag{47}$$

В комплексной плоскости f_l имеет существенно особую точку в бесконечности и, в общем случае, полюс порядка $l+1$ в начале $\rho = 0$.

Сферические функции Бесселя являются частными решениями этого уравнения; они определяют регулярную ($\sim r^l$) в начале функцию j_l (собственно сферическую функцию Бесселя) и нерегулярные решения n_l (функция Неймана), $h_l^{(+)}$ (функция Ганкеля первого рода) и $h_l^{(-)}$ (функция Ганкеля второго рода).

Определение [7]):

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho), \quad n_l(\rho) = (-1)^l \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho),$$

$$h_l^{(\pm)}(\rho) = n_l(\rho) \pm i j_l(\rho)$$

(J_ν обозначает обычную функцию Бесселя порядка ν); j_l и n_l вещественны,

$$h_l^{(-)} = h_l^{(+)*}. \tag{48}$$

---

[6]) Уравнение (28) для частного случая $\gamma = 0$ получается при $\rho = kr$, $y_l = kr f_l(kr)$.

[7]) Большинство авторов символом n_l обозначают ту же самую функцию, но с противоположным знаком, а в качестве сферических функций Ганкеля первого и второго рода принимают соответственно функции

$$h_l^{(1)} = -i h_l^{(+)} \text{ и } h_l^{(2)} = i h_l^{(-)}.$$

В явном виде:

$$j_l = R_l \frac{\sin\rho}{\rho} + S_l \frac{\cos\rho}{\rho}, \quad n_l = R_l \frac{\cos\rho}{\rho} - S_l \frac{\sin\rho}{\rho},$$
$$h_l^{(\pm)} = (R_l \pm iS_l) \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}. \tag{49}$$

Здесь R_l — полином по $1/\rho$ степени l с вещественными коэффициентами и четностью $(-1)^l$; S_l — полином по $1/\rho$ степени $l-1$ с вещественными коэффициентами и четностью $(-1)^{l-1}$,

$$R_l + iS_l = \sum_{s=0}^{l} \frac{i^{s-l}}{2^s s!} \cdot \frac{(l+s)!}{(l-s)!} \rho^{-s}, \tag{50}$$

$$j_0 = \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0 = \frac{\cos\rho}{\rho}, \qquad h_0^{(\pm)} = \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho},$$

$$j_1 = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}, \qquad n_1 = \frac{\cos\rho}{\rho^2} + \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad h_1^{(\pm)} = \left(\frac{1}{\rho^2} \mp \frac{i}{\rho}\right) e^{\pm i\rho}.$$

Асимптотические формы ($\rho \to \infty$, $\rho \gg l(l+1)$):

$$j_l \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right), \qquad n_l \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right),$$
$$h_l^{(\pm)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \exp\left[\pm i\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)\right]\left[1 \pm i\frac{l(l+1)}{2\rho} - \ldots\right]. \tag{51}$$

Поведение вблизи начала координат ($\rho \to 0$):

$$j_l \underset{\rho\to 0}{\sim} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}\left[1 - \frac{\rho^2}{2(2l+3)} + \ldots\right],$$
$$n_l \underset{\rho\to 0}{\sim} \frac{(2l+1)!!}{2l+1}\left(\frac{1}{\rho}\right)^{l+1}\left[1 + \frac{\rho^2}{2(2l-1)} + \ldots\right]. \tag{52}$$

Общее поведение j_l.

При возрастании ρ_{l+1} от 0 до $+\infty$ функция ρj_l сначала растет как ρ^{l+1}, затем все быстрее (экспоненциально) до точки $\rho = \sqrt{l(l+1)}$, затем она бесконечно осциллирует между двумя экстремальными значениями, которые асимптотически стремятся к $+1$ и -1 соответственно. Асимптотическая формула (51) является хорошим приближением, когда $\rho \gg l(l+1)/2$, однако амплитуда осцилляций практически достигает своего асимптотического значения (с точностью до 10%) уже при $\rho \gtrsim 2l$.

Рекуррентные формулы.

Ниже будем считать, что $f_l \equiv aj_l + bn_l$, где a и b — произвольно выбранные коэффициенты, не зависящие от l. Имеем ($l \neq 0$):

$$(2l+1) f_l = \rho\left[f_{l+1} + f_{l-1}\right], \tag{53}$$

$$f_{l-1} = \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho}\right] f_l = \frac{1}{\rho^{l+1}} \frac{d}{d\rho}\left(\rho^{l+1} f_l\right), \tag{54}$$

$$f_l = \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l-1}{\rho}\right] f_{l-1} = -\rho^{l-1} \frac{d}{d\rho}\left(\frac{f_{l-1}}{\rho^{l-1}}\right), \tag{55}$$

так что

$$f_l = \left[\rho^l \left(-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\right] f_0. \tag{56}$$

Определитель Вронского:

$$\rho^2 \left[n_l \left(\frac{d}{d\rho} j_l\right) - j_l \left(\frac{d}{d\rho} n_l\right)\right] = 1, \tag{57}$$

откуда ($l \neq 0$)

$$\rho^2 [n_l j_{l-1} - j_l n_{l-1}] = 1. \tag{58}$$

Раздел III. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР И ПОЛИНОМЫ ЭРМИТА

§ 7. Полиномы Эрмита

Определение:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \left(\frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}\right) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots, \infty); \tag{59}$$

H_n есть полином степени n четности $(-1)^n$, обладающий n нулями:

$$H_n(z) = \begin{cases} (-1)^p \dfrac{(2p)!}{p!} F\left(-p, \dfrac{1}{2}; z^2\right), & \text{если} \quad n = 2p; \\ (-1)^p \, 2 \dfrac{(2p+1)!}{p!} zF\left(-p \, \dfrac{3}{2}; \quad z^2\right), & \text{если} \quad n = 2p+1. \end{cases} \tag{60}$$

Дифференциальное уравнение:

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz} + 2n\right] H_n(z) = 0. \tag{61}$$

Производящая функция:

$$e^{-s^2+2sz} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(z) \tag{62}$$

Рекуррентные соотношения:

$$\frac{d}{dz} H_n = 2nH_{n-1}, \tag{63}$$

$$\left(2z - \frac{d}{dz}\right) H_n = H_{n-1}, \tag{64}$$

$$2zH_n = H_{n+1} + 2nH_{n-1}. \tag{65}$$

Явные выражения шести первых полиномов Эрмита:

$$H_0 = 1, \qquad H_1 = 2z,$$
$$H_2 = 4z^2 - 1, \qquad H_3 = 8z^3 - 12z,$$
$$H_4 = 16z^4 - 48z^2 + 12, \qquad H_5 = 32z^5 - 160z^3 + 120z.$$

§ 8. Собственные функции гармонического осциллятора

$u_n(Q)$ есть собственная функция, нормированная на единицу и принадлежащая собственному значению $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ $(n = 0, 1, \ldots, \infty)$; фаза выбирается так, чтобы выполнялось соотношение (68), и чтобы $u_0(0)$ была вещественной и положительной.

Уравнение на собственные значения $\left(Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, q\right)$:

$$\frac{1}{2}\left(Q^2 - \frac{d^2}{dQ^2}\right) u_n(Q) = \left(n + \frac{1}{2}\right) u_n(Q).$$

Производящая функция:

$$\pi^{-1/4} e^{-Q^2/2} e^{-t^2/2 + \sqrt{2}\, Qt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\sqrt{n!}} u_n(Q). \tag{66}$$

Соотношения ортонормированности и замкнутости:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_n u_p \, dQ = \delta_{np},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n^*(Q)\, u_n(Q') = \delta(Q - Q').$$

Рекуррентные соотношения:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + \frac{d}{dQ}\right) u_n = \sqrt{n}\, u_{n-1}, \tag{67}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q - \frac{d}{dQ}\right) u_n = \sqrt{n+1}\, u_{n+1}, \tag{68}$$

$$Q u_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, u_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\, u_{n-1}. \tag{69}$$

Четность:

$$u_n(-Q) = (-1)^n u_n(Q).$$

Выражение через полиномы Эрмита:

$$u_n = \left(\sqrt{\pi}\, 2^n n!\right)^{-1/2} e^{-Q^2/2} H_n(Q). \tag{70}$$

Раздел IV. ПОЛИНОМЫ И ФУНКЦИИ ЛЕЖАНДРА, СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

§ 9. Полиномы и функции Лежандра

Определения:
Полином Лежандра

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots, \infty) \tag{71}$$

есть полином степени l, четности $(-1)^l$, обладающий l нулями в интервале $(-1, +1)$.

Функция Лежандра

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) = \frac{(1-u^2)^{m/2}}{2^l \cdot l!} \frac{d^{l+m}}{du^{l+m}} (u^2-1)^l \tag{72}$$

$$(-1 \leqslant u \leqslant +1; \quad l = 0, 1, 2, \ldots, \infty; \quad m = 0, 1, \ldots, l)$$

есть произведение $(1-u^2)^{m/2}$ на полином степени $l-m$ и четности $(-1)^{l-m}$, обладающий $l-m$ нулями в интервале $(-1, +1)$ В частности,

$$\begin{aligned} m = l \quad & P_l^l = (2l-1)!!\,(1-u^2)^{l/2}, \\ m = 0 \quad & P_l^0 = P_l(u); \end{aligned} \tag{73}$$

$P_l(u)$ есть частный случай функции Лежандра

Дифференциальное уравнение:

$$\left[(1-u^2)\frac{d^2}{du^2} - 2u\frac{d}{du} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-u^2}\right] P_l^m = 0. \tag{74}$$

Производящие функции:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(u), \tag{75}$$

$$(2m-1)!!\,(1-u^2)^{m/2} \frac{t^m}{[1-2tu+t^2]^{m+1/2}} = \sum_{l=m}^{\infty} t^l P_l^m(u) \quad (|t| < 1) \tag{76}$$

Соотношения ортонормированности:

$$\int_{-1}^{+1} P_k^m P_l^m \, du = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{kl}. \tag{77}$$

Рекуррентные соотношения:

$$(2l+1)\,uP_l^m = (l+1-m)\,P_{l+1}^m + (l+m)\,P_{l-1}^m, \tag{78}$$

$$(1-u^2)\frac{d}{du} P_l^m = -\,luP_l^m + (l+m)\,P_{l-1}^m = \tag{79}$$

$$= (l+1)\,uP_l^m - (l+1-m)\,P_{l+1}^m \tag{80}$$

(соотношения верны и при $l = 0$, если принять $P_{-1} = 0$).

Частные значения

$$P_l(1) = 1, \quad P_l(-1) = (-1)^l,$$

$$P_l^m(1) = P_l^m(-1) = 0 \qquad (m \neq 0),$$

$$P_l^m(0) = \begin{cases} (-1)^p \dfrac{(2p+2m)!}{2^l p!\,(p+m)!}, & \text{если } l-m = 2p; \\ 0, & \text{если } l-m = 2p+1. \end{cases} \tag{81}$$

Первые пять полиномов Лежандра:

$$P_0 = 1, \quad P_1 = u, \quad P_2 = \frac{1}{2}(3u^2 - 1),$$

$$P_3 = \frac{1}{2}(5u^3 - 3u), \quad P_4 = \frac{1}{8}(35u^4 - 30u^2 + 3),$$

§ 10. Сферические функции

Операторы L_x, L_y, L_z в сферических координатах. Операторы L_x, L_y, L_z являются дифференциальными эрмитовыми операторами, определенными (в системе единиц, где $\hbar = 1$) формулой

$$\boldsymbol{L} = -i\,[\boldsymbol{r}\nabla].$$

В качестве полярной оси выбираем Oz; (r, θ, φ) — сферические координаты точки $\boldsymbol{r}$; $\Omega = (\theta, \varphi)$ обозначает совокупность двух угловых координат ($\varphi = 0$ есть плоскость zOx, $\varphi = \pi/2$ — плоскость zOy). Элемент телесного угла есть $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$.

В сферических координатах имеем:

$$L_z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{82}$$

$$L_\pm = L_x \pm iL_y = e^{\pm i\varphi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \tag{83}$$

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{84}$$

Определение сферических функций $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

Общие собственные функции операторов L^2 и L_z:

$$L^2 Y_l^m = l(l+1)\,Y_l^m, \tag{85}$$

$$L_z Y_l^m = mY_l^m \tag{86}$$

$$(l = 0,\ 1,\ 2, \ldots,\ \infty; \quad m = -l,\ -l+1, \ldots,\ +l).$$

Завершают определения условия:

а) Y_l^m нормированы на единицу на сфере радиуса 1;

б) фазы выбраны так, чтобы удовлетворялись рекуррентные соотношения (89) и чтобы $Y_l^0(0, 0)$ была действительной и положительной величиной.

Соотношения ортонормированности и замкнутости:

$$\int Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'}\, d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, Y_l^{m*}(\theta, \varphi)\, Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{mm'}\delta_{ll'}, \tag{87}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta, \varphi)\, Y_l^m(\theta', \varphi') = \frac{\delta(\theta - \theta')\,\delta(\varphi - \varphi')}{\sin\theta} = \delta(\Omega - \Omega'). \tag{88}$$

Функции Y_l^m образуют полную ортонормированную систему квадратично интегрируемых функций на сфере радиуса 1.

Рекуррентные соотношения:

$$L_{\pm}Y_l^m = [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_l^{m\pm 1} = [(l \mp m)](l+1 \pm m)]^{1/2} Y_l^{m\pm 1}, \tag{89}$$

$$\cos\theta Y_l^m = \left[\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{1/2} Y_{l+1}^m + \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]^{1/2} Y_{l-1}^m. \tag{90}$$

Четность при пространственном отражении $(\theta, \varphi) \to (\pi - \theta, \varphi + \pi)$:

$$Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi). \tag{91}$$

Комплексное сопряжение:

$$Y_l^{m*}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi). \tag{92}$$

Связь с функциями Лежандра $(m \geqslant 0)$:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}. \tag{93}$$

Таким образом, Y_l^m есть произведение $e^{im\varphi}\sin^{|m|}\theta$ на полином степени $l - |m|$ и четности $(-1)^{l-m}$ от $\cos\theta$. В частности,

$$m = 0 \qquad Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta), \tag{94}$$

$$m = l \qquad Y_l^l = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \cdot \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}\right]^{1/2} \sin^l\theta e^{il\varphi}. \tag{95}$$

Гармонические полиномы и сферические функции.

Однородные полиномы степени l от x, y, z

$$\mathcal{Y}_l^m(\boldsymbol{r}) \equiv r^l Y_l^m(\theta, \varphi) \qquad (m = -l, -l+1, \ldots, +l) \tag{96}$$

образуют последовательность $2l+1$ линейно независимых гармонических полиномов степени l[8]:

$$\Delta \mathcal{Y}_l^m(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{97}$$

---

[8]) Формула (97) следует из операторного соотношения, верного для всякой функции, ограниченной при $r = 0$:

$$\Delta \equiv \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}.$$

По определению полином $h(x, y, z)$ есть гармонический полином, если он однороден по x, y, z и удовлетворяет уравнению $\Delta h = 0$; существует $2l+1$ линейно независимых полиномов.

Несколько первых сферических функций:

$$Y_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\quad Y_1^0=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_2^0=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta-1),$$

$$Y_3^0=\sqrt{\frac{7}{16\pi}}\,(5\cos^3\theta-3\cos\theta),$$

$$Y_1^1=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi},\quad Y_2^1=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi},$$

$$Y_3^1=-\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta\,(5\cos^2\theta-1)\,e^{i\varphi},$$

$$Y_2^2=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi},\quad Y_3^2=\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{2i\varphi},$$

$$Y_3^3=-\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta e^{3i\varphi}.$$

Раздел V РАЗЛОЖЕНИЯ И РАЗЛИЧНЫЕ ФОРМУЛЫ

Теорема сложения:

$$\frac{2l+1}{4\pi}\cdot P_l(\cos\alpha)=\sum_{m=-l}^{+l}Y_l^{m*}(\theta_1,\varphi_1)\,Y_l^m(\theta_2,\varphi_2) \tag{98}$$

(α — угол между направлениями (θ_1, φ_1) и (θ_2, φ_2)).

Функции Грина операторов Δ и $\Delta+k^2$ [9]):

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\alpha), \tag{99}$$

$$\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,j_l(kr_<)\,h_l^{(+)}(kr_>)P_l(\cos\alpha), \tag{100}$$

$$\frac{\cos(k|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,j_l(kr_<)\,n_l(kr_>)\,P_l(\cos\alpha) \tag{101}$$

(α — угол между направлениями $\boldsymbol{r}_1$ и $\boldsymbol{r}_2$; $r_<$ — меньшая из длин r_1 и r_2, $r_>$ — большая из длин r_1 и r_2).

Формулы (100) и (101) верны при любых k, в том числе и при комплексных k.

---

[9])
$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}),\quad (\Delta+k^2)\frac{e^{ikr}}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}),$$

$$(\Delta+k^2)\frac{\cos kr}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}).$$

Разложение плоской волны и чисто кулоновской волновой функции рассеяния.

Полярная ось направлена по оси z, совпадающей с направлением начального волнового вектора $\boldsymbol{k}$:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)\, i^l l_l(kr)\, P_l(\cos\theta), \tag{102}$$

$$\psi_c = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)\, i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma;\, kr)\, P_l(\cos\theta), \tag{103}$$

$$f_c(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)\, e^{i\sigma_l} \sin\sigma_l P_l(\cos\theta). \tag{104}$$

Определения γ, ψ_c, $f_c(\theta)$, F_l, σ_l даны в § 4 и 5 (уравнения (18), (19), (25), (29) и (32)).

При другом выборе полярной оси разложения (102), (103) и (104) остаются верными, если под θ подразумевать угол между направлениями $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{r}$.

Пользуясь теоремой сложения, можно получить разложения по сферическим функциям от аргументов (θ_k, φ_k) и (θ_r, φ_r). Например,

$$e^{i\boldsymbol{kr}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr)\, Y_l^{m*}(\theta_k,\ \varphi_k)\, Y_l^m(\theta_r,\ \varphi_r). \tag{105}$$