Так как $\Delta k_n \to 0$ при $l \to \infty$, то, заменяя суммирование по значениям k_n интегрированием, получим

$$f(x) = \int_0^\infty kF(k) J_\nu (kx)\, dk, \tag{34}$$

$$F(k) = \int_0^\infty xf(x) J_\nu (kx)\, dx. \tag{35}$$

Разложение (34) называется *интегралом Фурье — Бесселя.*

Теорема 4. *Пусть функция* $\sqrt{x} f(x)$ *абсолютно интегрируема на интервале* $(0, \infty)$, *и пусть* $\nu \geqslant -1/2$. *Тогда при* $x > 0$ *разложение* (34), (35) *имеет место одновременно с соответствующим разложением в интеграл Фурье.*

Заметим, что при $\nu = \pm 1/2$ разложения (30) и (34) сводятся к разложениям функции $\sqrt{x} f(x)$ по косинусам $(\nu = -1/2)$ или по синусам $(\nu = 1/2)$.

§ 26. Решение некоторых основных задач квантовой механики

В § 9 рассматривался общий метод решения квантовомеханических задач для состояний дискретного спектра энергий в случае, когда эти задачи методом разделения переменных сводятся к решению дифференциальных уравнений вида

$$u'' + \frac{\tilde{\tau}(x)}{\sigma(x)} u' + \frac{\tilde{\sigma}(x)}{\sigma^2(x)} u = 0, \tag{1}$$

где $\sigma(x)$, $\tilde{\sigma}(x)$ — полиномы не выше второй степени, $\tilde{\tau}(x)$ — полином не выше первой степени. В этом параграфе мы рассмотрим решение некоторых основных задач квантовой механики, которые можно решать методом, изложенным в § 9. Заметим, что к дифференциальным уравнениям вида (1) приводят такие важные задачи квантовой механики, как движение частицы в центрально-симметричном поле, гармонический осциллятор, решение уравнений Шредингера, Дирака и Клейна — Гордона для кулоновского потенциала, движение заряженной частицы в однородном электрическом и магнитном полях. Кроме того, к уравнению (1) приводят также многие модельные задачи атомной, молекулярной и ядерной физики, связанные с изучением процессов рассеяния, взаимодействия нейтронов с тяжелыми ядрами, анализом вращательно-колебательного спектра молекул (например решение уравнений Шредингера с потенциалами Морза, Кратцера, Вуда — Саксона, Пешля — Теллера *)).

При нахождении собственных значений энергии E и собственных функций для уравнений Шредингера, Дирака или Клей-

*) См. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. I.— М.: Мир, 1974.

на — Гордона исходное уравнение приводится методом разделения переменных к уравнению (1) на некотором интервале (a, b). Энергия E входит в коэффициенты уравнения (1) как параметр. На решения исходных уравнений для связанных состояний налагаются дополнительные требования. Они обычно эквивалентны требованиям, налагаемым на решения уравнения (1): функция $u(x)\sqrt{\tilde{\rho}(x)}$ должна быть ограниченной и квадратично интегрируемой на интервале (a, b). Здесь $\tilde{\rho}(x)$ — решение уравнения $(\sigma\tilde{\rho})' = \tilde{\tau}\tilde{\rho}$, функция $\tilde{\rho}(x)$ возникает при приведении уравнения (1) к самосопряженному виду:

$$(\sigma\tilde{\rho}u')' + \tilde{\rho}(x)\frac{\tilde{\sigma}(u)}{\sigma(x)}u = 0.$$

Как было показано в § 9, эту задачу можно решить следующим образом. Прежде всего, (1) заменой $u = \varphi(x)y$ следует привести к уравнению гипергеометрического типа

$$\sigma(x)y'' + \tau(x)y' + \lambda y = 0,$$

выбирая из возможных способов приведения такой, для которого функция $\tau(x) = \tilde{\tau}(x) + 2\pi(x)$ имеет отрицательную производную и корень на интервале (a, b). При этом предполагается, что $\sigma(x) > 0$ при $x \in (a, b)$. Собственные значения энергии определяются из уравнения

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

а собственными функциями $y_n(x)$ будут полиномы n-й степени:

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

которые ортогональны на интервале (a, b) с весом $\rho(x)$, удовлетворяющим уравнению $(\sigma\rho)' = \tau\rho$ (B_n — нормировочная постоянная).

Рассмотрим несколько характерных задач квантовой механики, которые можно решить указанным методом.

1. Решение уравнения Шредингера для центрально-симметричного поля. Основной задачей квантовой механики атома является задача о движении электрона в центральном притягивающем поле. Это связано с тем, что описание движения атомных электронов, использующее приближение центрального поля, лежит в основе расчетов различных свойств атомных структур *). Такое описание позволяет понять особенности поведения атомов и найти их энергетические состояния, не решая чрезвычайно трудную квантовомеханическую задачу многих тел.

Чтобы найти волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ частицы, движущейся в некотором центрально-симметричном поле $U(r)$, требуется решить

*) См. Хартри Д. Расчеты атомных структур.— М.: ИЛ, 1960.

уравнение Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2M}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0, \tag{2}$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, M — масса частицы, $U(r)$ — потенциальная энергия.

Будем искать частные решения уравнения (2) методом разделения переменных в сферических координатах, полагая

$$\psi(\mathbf{r}) = F(r)Y(\theta, \varphi).$$

Производя те же действия, что и при решении уравнения Лапласа (см. § 10), для функций $F(r)$, $Y(\theta, \varphi)$ получим уравнения

$$\Delta_{\theta\varphi}Y + \lambda Y = 0, \tag{3}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right) + \left[\frac{2M}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{\lambda}{r^2}\right]F(r) = 0. \tag{4}$$

Уравнение (3), как было показано выше, имеет решения, удовлетворяющие условиям ограниченности и однозначности для $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$, лишь при $\lambda = l(l+1)$, причем в этом случае $Y(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция.

Так как

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right) = \frac{1}{r}\cdot\frac{d^2}{dr^2}(rF),$$

то (4) заменой $R(r) = rF(r)$ сводится к уравнению

$$R'' + \left[\frac{2M}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0. \tag{5}$$

Для состояний дискретного спектра волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ должна удовлетворять условию нормировки

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 r^2 dr\, d\Omega = 1.$$

Так как

$$\int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1,$$

то условие нормировки для функции $R(r)$ принимает вид

$$\int_0^\infty R^2(r)\,dr = 1. \tag{6}$$

При этом предполагается, что функция $F(r) = R(r)/r$ должна быть ограничена при $r \to 0$.

2. Решение уравнения Шредингера для кулоновского поля. Единственным атомом, для которого уравнение Шредингера может быть решено точно, является самый простой из всех атомов — атом водорода. Это, однако, не уменьшает, а увеличивает значение точного решения задачи для атома водорода, поскольку аналитические решения, полученные в явном виде, часто могут быть полезны в качестве исходного пункта для проведения приближенных вычислений, относящихся к более сложным квантовомеханическим системам.

Для квантовомеханического описания атома водорода следует рассмотреть относительное движение электрона (масса m, заряд $-e$) и ядра (масса M, заряд e). Мы решим несколько более общую задачу, считая заряд ядра равным Ze. Эта задача представляет непосредственный физический интерес, так как с точностью до релятивистских эффектов вычисляемые при этом собственные значения энергии соответствуют наблюдаемым уровням энергии атома водорода ($Z=1$), однократно ионизованного атома гелия ($Z=2$) и т. д. Кроме того, модель водородоподобного атома может быть полезна, например, при изучении спектров щелочных элементов, а также рентгеновских спектров атомов с большим Z.

Рассматриваемая задача о движении электрона легко сводится к задаче о движении одного тела — частицы с приведенной массой [10]

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \approx m$$

в кулоновском поле $U(r) = -Ze^2/r$, т. е. к решению уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\psi = 0.$$

Так как потенциальная энергия $U(r)$ отрицательна и обращается в нуль на бесконечности, то из физических соображений вытекает, что связанные состояния будут лишь при $E<0$ (см. [10]).

Переходя к сферическим координатам, для радиальной функции $R(r)$ получаем уравнение

$$R'' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0. \tag{7}$$

В уравнении (7) удобно перейти к безразмерным переменным, используя атомную систему единиц, в которой в качестве единиц заряда, длины и энергии используются заряд электрона e ($e>0$) и величины $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$, $E_0 = e^2/a_0$. В результате (7) примет вид

$$R'' + \left[2\left(E + \frac{Z}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0. \tag{8}$$

Требования ограниченности и квадратичной интегрируемости волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ приводят к требованию ограниченности функции $R(r)/r$ при $r \to 0$ и к условию нормировки (6).

Уравнение (8) — обобщенное уравнение гипергеометрического типа, для которого $\sigma(r) = r$, $\tilde{\tau}(r) = 0$, $\tilde{\sigma}(r) = 2Er^2 + 2Zr - l(l+1)$.

Поставленная для уравнения (8) задача принадлежит к типу задач, рассмотренному в § 9. Действительно, в данном случае $\tilde{\rho}(r) = 1/r$. Поэтому требование квадратичной интегрируемости на интервале $(0, \infty)$ и ограниченности функции $\sqrt{\tilde{\rho}(r)}R(r)$ при $r \to 0$ вытекает из условия нормировки (6) и ограниченности функции $R(r)/r$ при $r \to 0$. Приведем (8) к уравнению гипергеометрического типа

$$\sigma(r)y'' + \tau(r)y' + \lambda y = 0,$$

полагая $R(r) = \varphi(r)y(r)$, где $\varphi(r)$ — решение уравнения $\varphi'/\varphi = \pi(r)/\sigma(r)$.

Для полинома $\pi(r)$ в данном случае получаем выражение

$$\pi(r) = 1/2 \pm \sqrt{1/4 - 2Er^2 - 2Zr + l(l+1) + kr}.$$

Постоянная k должна выбираться из условия, чтобы подкоренное выражение имело кратные корни. В результате получаем следующие возможные виды полинома $\pi(r)$:

$$\pi(r) = \frac{1}{2} \pm \begin{cases} \sqrt{-2E}\,r + l + 1/2, & k = 2Z + (2l+1)\sqrt{-2E}, \\ \sqrt{-2E}\,r - l - 1/2, & k = 2Z - (2l+1)\sqrt{-2E}. \end{cases}$$

Из четырех возможных видов $\pi(r)$ следует выбрать такой, для которого функция $\tau(r) = \tilde{\tau}(r) + 2\pi(r)$ имеет отрицательную производную и корень на интервале $(0, +\infty)$. Этим условиям удовлетворяет функция

$$\tau(r) = 2(l + 1 - \sqrt{-2E}\,r),$$

которой соответствуют

$$\pi(r) = l + 1 - \sqrt{-2E}\,r, \quad \varphi(r) = r^{l+1}\exp\{-\sqrt{-2E}\,r\},$$

$$\lambda = 2[Z - (l+1)\sqrt{-2E}], \quad \rho(r) = r^{2l+1}\exp\{-2\sqrt{-2E}\,r\}.$$

Собственные значения энергии E определяются из уравнения

$$\lambda + n\tau' + \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' = 0, \quad n = 0, 1, \ldots$$

Отсюда

$$E = -\frac{Z^2}{2(n+l+1)^2}. \tag{9}$$

Величина энергии E полностью определяется числом $n + l + 1$, которое называют *главным квантовым числом.*

Собственные функции $y(r) = y_{nl}(r)$ в данном случае имеют вид

$$y_{nl}(r) = \frac{B_{nl}}{r^{2l+1}\exp\left\{-\frac{2Zr}{n+l+1}\right\}} \cdot \frac{d^n}{dr^n}\left[r^{n+2l+1}\exp\left\{-\frac{2Zr}{n+l+1}\right\}\right]$$

и совпадают с точностью до множителя с полиномами Лагерра $L_n^{2l+1}(x)$, где $x = 2Zr/(n+l+1)$*). Для радиальной функции $R(r) = R_{nl}(r)$ окончательно получаем выражение

$$R_{nl}(r) = C_{nl} e^{-x/2} x^{l+1} L_n^{2l+1}(x). \tag{10}$$

Легко проверить, что функции $R_{nl}(r)$ удовлетворяют исходному требованию $\int\limits_0^\infty R_{nl}^2(r)\,dr < \infty$. Постоянную C_{nl} найдем из условия нормировки (6):

$$\int\limits_0^\infty R_{nl}^2(r)\,dr = 1,$$

или

$$\frac{n+l+1}{2Z} C_{nl}^2 \int\limits_0^\infty e^{-x} x^{2l+2} \left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2 dx = 1. \tag{11}$$

Входящий в это выражение интеграл можно вычислить, используя рекуррентное соотношение для полиномов Лагерра (см. § 6). Имеем

$$xL_n^{2l+1} = 2(n+l+1) L_n^{2l+1} - (n+1) L_{n+1}^{2l+1} - (n+2l+1) L_{n-1}^{2l+1}. \tag{12}$$

Отсюда на основании свойства ортогональности полиномов Лагерра получим

$$\int\limits_0^\infty e^{-x} x^{2l+2} \left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2 dx =$$

$$= \int\limits_0^\infty e^{-x} x^{2l+1} L_n^{2l+1}(x) \left[2(n+l+1) L_n^{2l+1}(x) + \ldots\right] dx =$$

$$= 2(n+l+1) \int\limits_0^\infty e^{-x} x^{2l+1} \left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2 dx = 2(n+l+1) d_n^2,$$

где d_n^2 — квадрат нормы полинома $L_n^{2l+1}(x)$. Поэтому

$$C_{nl}^2 = \frac{Z}{(n+l+1)^2 d_n^2} = \frac{Zn!}{(n+l+1)^2 (n+2l+1)!}. \tag{13}$$

Наиболее простая радиальная функция соответствует $n = 0$:

$$R_{0l}(r) = \frac{1}{l+1} \sqrt{\frac{Z}{(2l+1)!}}\, e^{-x/2} x^{l+1}.$$

*) Обычно в учебниках по квантовой механике число нулей радиальной функции $R(r)$ обозначают через n_r, а главное квантовое число через n. Если пользоваться этими обозначениями, то во всех рассматриваемых формулах следует заменить n на $n - l - 1$.

Наиболее сложный вид радиальная функция имеет при $l=0$: у нее максимально возможное при заданной энергии число нулей. Однако зависимость волновой функции от углов θ, φ в этом случае будет наиболее простой: при $l=0$ волновая функция будет сферически-симметричной, так как $Y_{00}(\theta,\varphi)=1/\sqrt{4\pi}$.

Примеры. 1. Зная радиальные функции $R_{nl}(r)$, можно вычислять различные характеристики водородоподобного атома, в частности, среднюю потенциальную энергию $\overline{U}_{nl}$ электрического взаимодействия электрона с ядром, среднее расстояние $\bar{r}_{nl}$ между электроном и ядром.

Используя (10), (13), получим

$$\overline{U}_{nl}=-\int_0^\infty \frac{Z}{r}R_{nl}^2(r)\,dr=$$
$$=ZC_{nl}^2\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+1}\left[L_n^{2l+1}(x)\right]^2dx=-ZC_{nl}^2d_n^2=-\frac{Z}{(n+l+1)^2}.$$

Таким образом, полная энергия электрона E (см. (9)) равна половине средней потенциальной энергии.

Далее,

$$\bar{r}_{nl}=\int_0^\infty rR_{nl}^2(r)\,dr=C_{nl}^2\left(\frac{n+l+1}{2Z}\right)^2\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+1}\left[xL_n^{2l+1}(x)\right]^2dx.$$

Для вычисления интеграла достаточно воспользоваться рекуррентным соотношением (12) и ортогональностью полиномов Лагерра:

$$\bar{r}_{nl}=C_{nl}^2\left(\frac{n+l+1}{2Z}\right)^2\left[(n+1)^2d_{n+1}^2+4(n+l+1)^2d_n^2+\right.$$
$$\left.+(2l+1)^2d_{n-1}^2\right]=$$
$$=C_{nl}^2\left(\frac{n+l+1}{2Z}\right)^2\frac{(2l+1)!}{n!}2\left[3(n+l+1)^2-l(l+1)\right]=$$
$$=\frac{1}{2Z}\left[3(n+l+1)^2-l(l+1)\right].$$

2. Найдем электростатический потенциал, создаваемый в фиксированной точке пространства водородоподобным атомом, используя водородоподобные волновые функции.

Пусть электрон, движущийся в кулоновском поле ядра с зарядом Ze, находится в стационарном состоянии, характеризуемом квантовыми числами n, l, m. Так как масса электрона мала по сравнению с массой ядра, то с достаточной степенью точности можно считать ядро неподвижным и находящимся в точке $r=0$. Найдем средний потенциал $V(r)$, который создается в точке $\mathbf{r}$ электроном и ядром.

Так как потенциал ядра в принятых единицах равен Z/r, то

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Z}{r} - \int \frac{|\psi_{nlm}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}(r')^2 dr' d\Omega'.$$

При вычислении интеграла удобно воспользоваться производящей функцией для полиномов Лежандра и теоремой сложения для сферических функций (см. § 10, п. 5):

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{r_<^s}{r_>^{s+1}} \left[\frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m'=-s}^{s} Y_{sm'}^*(\theta', \varphi') Y_{sm'}(\theta, \varphi) \right].$$

Так как

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}') = \frac{1}{r'} R_{nl}(r') Y_{lm}(\theta', \varphi'),$$

то

$$\int \frac{|\psi_{nlm}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}(r')^2 dr' d\Omega' =$$

$$= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m'} Y_{sm'}(\theta, \varphi) \int \frac{r_<^s}{r_>^{s+1}} R_{nl}^2(r') dr' \times$$

$$\times \int Y_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{sm'}^*(\theta', \varphi') d\Omega'. \qquad (14)$$

Если использовать явный вид для сферических функций, то интегрирование по φ' приводит к тому, что в сумме по m' остается лишь одно слагаемое, соответствующее $m' = 0$. Окончательно получим

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Z}{r} - \sum_{s=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2s+1} Y_{s0}(\theta, \varphi) \int_0^{\infty} \frac{r_<^s}{r_>^{s+1}} R_{nl}^2(r') dr' \times$$

$$\times \int Y_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{s0}^*(\theta', \varphi') d\Omega.$$

Интеграл $\int_0^{\infty} \frac{r_<^s}{r_>^{s+1}} R_{nl}^2(r') dr'$ можно представить в виде

$$\int_0^{\infty} \frac{r_<^s}{r_>^{s+1}} R_{nl}^2(r') dr' = \frac{1}{r^{s+1}} \int_0^r (r')^s R_{nl}^2(r') dr' + r^s \int_r^{\infty} \frac{R_{nl}^2(r')}{(r')^{s+1}} dr'.$$

Интеграл от произведения трех сферических функций сводится к интегралу от произведения трех функций $\Theta_{lm}(\cos\theta)$:

$$\int Y_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{s0}^*(\theta', \varphi') d\Omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{1} \Theta_{lm}^2(x) \Theta_{s0}(x) dx.$$

Последний интеграл может быть выражен через коэффициенты Клебша — Гордана или же через коэффициенты Вигнера, для которых существуют таблицы *). В силу свойств ортогональности функций $\Theta_{lm}(x)$ он отличен от нуля лишь при $s = 0, 2, \ldots, 2l$, т. е. сумма по s в (14) содержит конечное число слагаемых.

В случае, когда электрон находится в основном состоянии ($n = 0$, $l = 0$), все интегралы легко вычисляются. В результате получаем

$$V(r) = \frac{Z-1}{r} + \left(Z + \frac{1}{r}\right) e^{-2Zr}.$$

При малых r, как и следовало ожидать, $V(r) \approx Z/r$, а при $r \to \infty$ имеем $V(r) \approx (Z-1)/r$ (потенциал ядра, заэкранированного электроном).

3. Решение уравнений Клейна — Гордона и Дирака для кулоновского поля. Мы рассмотрели решение уравнения Шредингера для заряженной частицы, движущейся в кулоновском поле. Если энергия частицы сравнима с энергией покоя, равной Mc^2 (M — масса частицы, c — скорость света), то в этом случае уравнение Шредингера становится неприменимым и надо пользоваться релятивистскими обобщениями уравнения Шредингера, т. е. в зависимости от величины собственного момента количества движения частицы (спина) надо использовать либо уравнение Клейна — Гордона, либо уравнение Дирака **).

а) Рассмотрим сначала уравнение Клейна — Гордона, описывающее движение заряженной частицы с зарядом $-e$ ($e > 0$), с целочисленным спином и массой M в кулоновском поле с потенциальной энергией $U(r) = -Ze^2/r$. Эта задача возникает, например, при исследовании движения π-мезонов в поле атомных ядер. Если воспользоваться системой единиц, в которой масса частицы M, постоянная Планка $\hbar$ и скорость света c равны единице, то уравнение Клейна — Гордона будет иметь вид

$$\Delta\psi + \left[\left(E + \frac{\mu}{r}\right)^2 - 1\right]\psi = 0, \quad \mu = \frac{Ze^2}{\hbar c} \approx \frac{Z}{137}. \tag{15}$$

Для связанных состояний $0 < E < 1$.

Будем искать частные решения уравнения (15) методом разделения переменных в сферических координатах, полагая $\psi(\mathbf{r}) = F(r)Y(\theta, \varphi)$. Производя те же действия, что и при решении уравнения Лапласа (см. § 10), для функций $F(r)$, $Y(\theta, \varphi)$ получим уравнения

$$\Delta_{\theta\varphi}Y + \lambda Y = 0, \tag{16}$$

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right) + \left[\left(E + \frac{\mu}{r}\right)^2 - 1 - \frac{\lambda}{r^2}\right]F(r) = 0. \tag{17}$$

---

*) См., например, Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента.— М.: Наука, 1975; Эдмондс А. Р. Угловые моменты в квантовой механике.— В кн.: Деформация атомных ядер. М.: ИЛ, 1958.

**) См. Давыдов А. С. Квантовая механика.— М.: Наука, 1976.

Уравнение (16), как было показано выше, имеет решения, удовлетворяющие условиям ограниченности и однозначности для $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$, $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$, лишь при $\lambda = l(l+1)$, причем в этом случае $Y(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция. Уравнение (17) заменой $R(r) = rF(r)$ сводится к уравнению

$$R'' + \left[\left(E + \frac{\mu}{r}\right)^2 - 1 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0. \tag{18}$$

Уравнение (18) является обобщенным уравнением гипергеометрического типа, для которого $\sigma(r) = r$, $\tilde{\tau}(r) = 0$, $\tilde{\sigma}(r) = (Er + \mu)^2 - r^2 - l(l+1)$. Функция $R(r)$ должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_0^\infty R^2(r)\, dr = 1 \tag{19}$$

и должна быть ограниченной при $r \to 0$. Отметим, что при решении соответствующего уравнения Шредингера используется более сильное требование ограниченности функции $R(r)/r$ при $r \to 0$.

Уравнение (18) имеет особенность при $r \to 0$. Выясним поведение функции $R(r)$ при $r \sim 0$. Так как при $r \to 0$

$$\left(E + \frac{\mu}{r}\right)^2 - 1 - \frac{l(l+1)}{r^2} \approx \frac{\mu^2 - l(l+1)}{r^2},$$

то в окрестности точки $r = 0$ поведение $R(r)$ будет приближенно описываться уравнением Эйлера

$$R'' + \frac{\mu^2 - l(l+1)}{r^2} R = 0,$$

решения которого имеют вид

$$R(r) = c_1 r^{\nu+1} + c_2 r^{-\nu},$$

где $\nu = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2}$ (в дальнейшем мы будем предполагать, что $\mu < l + 1/2$). Требование ограниченности функции $R(r)$ при $r \to 0$ дает $c_2 = 0$, т. е. $R(r) \approx c_1 r^{\nu+1}$ при $r \to 0$.

Поставленная задача принадлежит к типу задач, рассмотренному в § 9. Действительно, в данном случае $\tilde{\rho}(r) = 1/r$ и требование ограниченности функции $\sqrt{\tilde{\rho}(r)}R(r)$ при $r \to 0$ и ее квадратичной интегрируемости на интервале $(0, \infty)$ вытекает из поведения $R(r)$ при $r \to 0$ и из условия нормировки (19). Поэтому при решении данной задачи мы воспользуемся методом, изложенным в § 9.

Приведем (18) к уравнению гипергеометрического типа

$$\sigma(r) y'' + \tau(r) y' + \lambda y = 0,$$

полагая $R(r) = \varphi(r) y(r)$, где $\varphi(r)$ — решение уравнения $\varphi'/\varphi = \pi(r)/\sigma(r)$. Для полинома $\pi(r)$ в данном случае получаем выражение

$$\pi(r) = 1/2 \pm \sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2 - 2\mu E r + (1-E^2)r^2 + kr}.$$

Постоянная k должна выбираться из условия, чтобы подкоренное выражение имело кратный корень. В результате получаем следующие возможные виды полинома $\pi(r)$:

$$\pi(r) = \frac{1}{2} \pm \begin{cases} \sqrt{1-E^2}\, r + \nu + 1/2, & k = 2\mu E + (2\nu+1)\sqrt{1-E^2}, \\ \sqrt{1-E^2}\, r - \nu - 1/2, & k = 2\mu E - (2\nu+1)\sqrt{1-E^2}. \end{cases}$$

Из всех возможных видов полинома $\pi(r)$ следует выбрать такой, для которого функция $\tau(r) = \tilde{\tau}(r) + 2\pi(r)$ имеет отрицательную производную и корень на интервале $(0, +\infty)$. Этим условиям удовлетворяет функция

$$\tau(r) = 2(\nu + 1 - ar), \quad a = \sqrt{1-E^2}, \quad \nu = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - \mu^2},$$

которой соответствуют

$$\pi(r) = \nu + 1 - ar, \quad \varphi(r) = r^{\nu+1}e^{-ar},$$
$$\lambda = 2[\mu E - (\nu+1)a], \quad \rho(r) = r^{2\nu+1}e^{-2ar}.$$

Собственные значения энергии E определяются из уравнения

$$\lambda + n\tau' + \frac{n(n-1)}{2}\sigma'' = 0.$$

Отсюда

$$E = E_n = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu}{n+\nu+1}\right)^2}}, \qquad n = 0, 1, \ldots \tag{20}$$

Соответствующие собственные функции $y = y_n(r)$ имеют вид

$$y_n(r) = \frac{B_{nl}}{r^{2\nu+1}e^{-2ar}} \cdot \frac{d^n}{dr^n}\left(r^{n+2\nu+1}e^{-2ar}\right)$$

и с точностью до множителя совпадают с полиномами Лагерра $L_n^{2\nu+1}(x)$, где $x = 2ar$. Для радиальных функций $R(r) = R_{nl}(r)$ получаем выражение

$$R_{nl}(r) = C_{nl}x^{\nu+1}e^{-x/2}L_n^{2\nu+1}(x).$$

Легко проверить, что функции $R_{nl}(r)$ удовлетворяют исходному требованию $\int\limits_0^\infty R_{nl}^2(r)\,dr < \infty$. Постоянная C_{nl} определяется из условия нормировки (19) точно так же, как и при решении соответствующего уравнения Шредингера.

Рассмотрим переход к нерелятивистскому пределу. В этом случае постоянная μ является малой величиной. Оценим другие величины при $\mu \to 0$:

$$\nu \approx l, \quad E \approx 1 - \frac{\mu^2}{2(n+l+1)^2}, \quad a = \sqrt{1-E^2} \approx \frac{\mu}{n+l+1},$$

$$R_{nl}(r) \approx C_{nl} x^{l+1} e^{-x/2} L_n^{2l+1}(x), \quad x = \frac{2\mu}{n+l+1} r.$$

Эти формулы совпадают с формулами, полученными в п. 2 при решении уравнения Шредингера, если учесть, что для использованной нами системы единиц величина μr переходит в Zr для атомной системы единиц, а энергия $E = 1 - \frac{\mu^2}{2(n+l+1)^2}$ содержит энергию покоя частицы $E_0 = 1$.

б) Рассмотрим теперь уравнение Дирака для заряженной частицы с полуцелым спином в поле $U(r) = -Ze^2/r$.

В данном случае волновая функция частицы имеет четыре компоненты $\psi_k(\mathbf{r})$ ($k = 1, 2, 3, 4$). Если воспользоваться системой единиц, в которой масса частицы M, постоянная Планка $\hbar$ и скорость света c равны единице, то уравнение Дирака будет иметь вид [2]

$$\begin{aligned}
&i\left(E + \frac{\mu}{r} + 1\right)\psi_1 + \frac{\partial \psi_3}{\partial z} + \frac{\partial \psi_4}{\partial x} - i\frac{\partial \psi_4}{\partial y} = 0,\\
&i\left(E + \frac{\mu}{r} + 1\right)\psi_2 - \frac{\partial \psi_4}{\partial z} + \frac{\partial \psi_3}{\partial x} + i\frac{\partial \psi_3}{\partial y} = 0,\\
&i\left(E + \frac{\mu}{r} - 1\right)\psi_3 + \frac{\partial \psi_1}{\partial z} + \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - i\frac{\partial \psi_2}{\partial y} = 0,\\
&i\left(E + \frac{\mu}{r} - 1\right)\psi_4 - \frac{\partial \psi_2}{\partial z} + \frac{\partial \psi_1}{\partial x} + i\frac{\partial \psi_1}{\partial y} = 0.
\end{aligned} \tag{21}$$

Величины E, μ здесь имеют тот же смысл, что и для уравнения Клейна — Гордона, причем $0 < E < 1$.

В сферических координатах (r, θ, φ) переменные в системе (21) можно разделить, если искать решение в виде

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix}\psi_1(r)\\ \psi_2(r)\end{pmatrix} = f(r)\,\Omega_{jlm}(\theta, \varphi);\\
&\begin{pmatrix}\psi_3(r)\\ \psi_4(r)\end{pmatrix} = (-1)^{(l-l'+1)/2} g(r)\,\Omega_{jl'm}(\theta, \varphi).
\end{aligned} \tag{22}$$

Здесь j — квантовое число, характеризующее полный момент количества движения частицы ($j = 1/2, 3/2, \ldots$); l, l' — орбитальные квантовые числа, которые при заданном j могут принимать значения $j - 1/2$, $j + 1/2$, причем $l' = 2j - l$; квантовое число m принимает полуцелые значения в пределах от $-j$ до j.

Величины $\Omega_{jlm}(\theta, \varphi)$ и $\Omega_{jl'm}(\theta, \varphi)$ содержат зависимость волновой функции от угловых переменных (их называют *шаровыми спинорами*). Они могут быть выражены через сферические гармоники и коэффициенты Клебша — Гордана, возникающие при сложении орбитального и спинового момента количества движения электрона. Шаровые спиноры связаны с функциями $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ следующим образом *):

$$\Omega_{jlm} = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{j+m}{2l+1}}\, Y_{l,m-1/2}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\dfrac{j-m}{2l+1}}\, Y_{l,m+1/2}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \qquad \text{при } l = j - 1/2,$$

$$\Omega_{jlm} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\dfrac{j-m+1}{2l+1}}\, Y_{l,m-1/2}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\dfrac{j+m+1}{2l+1}}\, Y_{l,m+1/2}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} \text{при } l = j + 1/2.$$

В результате подстановки (22) в (21) получаем систему уравнений для функций $f(r)$ и $g(r)$:

$$\begin{aligned} f' + \frac{1+\varkappa}{r} f - \left(E + 1 + \frac{\mu}{r}\right) g = 0, \\ g' + \frac{1-\varkappa}{r} g + \left(E - 1 + \frac{\mu}{r}\right) f = 0, \end{aligned} \tag{23}$$

где

$$\varkappa = \begin{cases} -(l+1), & l = j - 1/2, \\ l, & l = j + 1/2. \end{cases}$$

Заметим, что в нерелятивистском приближении $|f(r)| \gg |g(r)|$ (в дальнейшем это будет показано).

Условия, определяющие функции $f(r)$, $g(r)$ для состояний дискретного спектра, сводятся к следующим: функции $rf(r)$, $rg(r)$ должны быть ограниченными при $r \to 0$ и удовлетворять условию нормировки

$$\int_0^\infty r^2 [f^2(r) + g^2(r)]\, dr = 1. \tag{24}$$

Запишем систему (23) в матричной форме. Пусть

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix}, \quad u' = \begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$u' = Au, \tag{25}$$

*) См., например, Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика.— М.: Наука, 1981.

где (см. также § 1, замечание 4)

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1+\varkappa}{r} & 1+E+\frac{\mu}{r} \\ 1-E-\frac{\mu}{r} & -\frac{1-\varkappa}{r} \end{pmatrix}.$$

Для нахождения $u_1(r)$ исключим из (25) функцию $u_2(r)$. В результате для $u_1(r)$ получим дифференциальное уравнение второго порядка:

$$u_1'' - \left(a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}}\right) u_1' + \\ + \left(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{11}' + \frac{a_{12}'}{a_{12}} a_{11}\right) u_1 = 0. \tag{26}$$

Аналогично, исключая $u_1(r)$, получим уравнение для $u_2(r)$:

$$u_2'' - \left(a_{11} + a_{22} + \frac{a_{21}'}{a_{21}}\right) u_2' + \\ + \left(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{22}' + \frac{a_{21}'}{a_{21}} a_{22}\right) u_2 = 0. \tag{27}$$

Коэффициенты матрицы A имеют вид

$$a_{ik} = b_{ik} + c_{ik}/r,$$

где b_{ik}, c_{ik} — некоторые постоянные. Уравнения (26), (27) не являются обобщенными уравнениями гипергеометрического типа. Это связано с тем, что

$$\frac{a_{12}'}{a_{12}} = -\frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2},$$

в силу чего в (26) коэффициенты при $u_1'(r)$ и $u_1(r)$ имеют вид

$$a_{11} + a_{22} + \frac{a_{12}'}{a_{12}} = \frac{p_1(r)}{r} - \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2},$$

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} - a_{11}' + \frac{a_{12}'}{a_{12}} a_{11} = \frac{p_2(r)}{r^2} - \frac{c_{12}}{c_{12}r + b_{12}r^2} \cdot \frac{c_{11} + b_{11}r}{r}$$

($p_1(r)$, $p_2(r)$ — полиномы соответственно не выше первой и второй степени). Уравнение (26) являлось бы обобщенным уравнением гипергеометрического типа, для которого $\sigma(r) = r$, если бы коэффициенты b_{12} или c_{12} равнялись нулю. В связи с этим удобно воспользоваться следующими соображениями. При линейной замене

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

с невырожденной матрицей C, не зависящей от r, мы получаем систему уравнений относительно функций $v_1(r)$ и $v_2(r)$ того же вида, что и исходная. Действительно, вместо (25) получаем

$$v' = \tilde{A}v, \tag{28}$$

где

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{A} = CAC^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11} & \tilde{a}_{12} \\ \tilde{a}_{21} & \tilde{a}_{22} \end{pmatrix}.$$

Коэффициенты $\tilde{a}_{ik}$ являются, очевидно, линейными комбинациями коэффициентов a_{ik}. Поэтому они имеют вид

$$\tilde{a}_{ik} = \tilde{b}_{ik} + \tilde{c}_{ik}/r,$$

где $\tilde{b}_{ik}$, $\tilde{c}_{ik}$ — некоторые постоянные.

Уравнения для функций $v_1(r)$ и $v_2(r)$ будут аналогичны уравнениям (26), (27):

$$v_1'' - \left(\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} + \frac{\tilde{a}_{12}'}{\tilde{a}_{12}}\right)v_1' + \\ + \left(\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{22} - \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{21} - \tilde{a}_{11}' + \frac{\tilde{a}_{12}'}{\tilde{a}_{12}}\tilde{a}_{11}\right)v_1 = 0, \tag{29}$$

$$v_2'' - \left(\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} + \frac{\tilde{a}_{21}'}{\tilde{a}_{21}}\right)v_2' + \\ + \left(\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{22} - \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{21} - \tilde{a}_{22}' + \frac{\tilde{a}_{21}'}{\tilde{a}_{21}}\tilde{a}_{22}\right)v_2 = 0. \tag{30}$$

Заметим, что вычисление коэффициентов в (29), (30) несколько облегчается благодаря подобию матриц A и $\tilde{A}$:

$$\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{22} = a_{11} + a_{22}, \quad \tilde{a}_{11}\tilde{a}_{22} - \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{21} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

Чтобы (29) было обобщенным уравнением гипергеометрического типа, достаточно, чтобы либо $\tilde{b}_{12} = 0$, либо $\tilde{c}_{12} = 0$. Аналогично для (30) получаем условие: либо $\tilde{b}_{21} = 0$, либо $\tilde{c}_{21} = 0$. Эти условия накладывают определенные ограничения на выбор матрицы C. Пусть $C = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$. Тогда

$$C^{-1} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix}, \quad \Delta = \alpha\delta - \beta\gamma,$$

$$\tilde{A} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} a_{11}\alpha\delta - a_{12}\alpha\gamma + a_{21}\beta\delta - a_{22}\beta\gamma & a_{12}\alpha^2 - a_{21}\beta^2 + (a_{22} - a_{11})\alpha\beta \\ a_{21}\delta^2 - a_{12}\gamma^2 + (a_{11} - a_{22})\gamma\delta & -a_{11}\beta\gamma + a_{12}\alpha\gamma - a_{21}\beta\delta + a_{22}\alpha\delta \end{pmatrix}.$$

Условие $\tilde{b}_{12}=0$ дает $(1+E)\alpha^2-(1-E)\beta^2=0$,

» $\tilde{c}_{12}=0$ » $2\varkappa\alpha\beta+\mu(\alpha^2+\beta^2)=0$,

» $\tilde{b}_{21}=0$ » $(1+E)\gamma^2-(1-E)\delta^2=0$,

» $\tilde{c}_{21}=0$ » $2\varkappa\gamma\delta+\mu(\gamma^2+\delta^2)=0$.

Мы видим, что существует несколько возможностей для выбора величин α, β, γ, δ. В учебниках по квантовой механике обычно рассматривается лишь одна из возможностей, соответствующая условиям $\tilde{b}_{12}=0$, $\tilde{b}_{21}=0$. В виде примера рассмотрим случай, когда постоянные α, β, γ, δ выбираются из условий $\tilde{c}_{12}=0$, $\tilde{c}_{21}=0$ (впоследствии будет показано, что это требование предпочтительнее, чем требование $\tilde{b}_{12}=0$, $\tilde{b}_{21}=0$). Эти условия будут выполнены, если выбрать матрицу C в виде

$$C=\begin{pmatrix}\mu & \nu-\varkappa\\ \nu-\varkappa & \mu\end{pmatrix},$$

где $\nu=\sqrt{\varkappa^2-\mu^2}$. В результате приходим к следующей системе уравнений для функций $v_1(r)$, $v_2(r)$:

$$v_1'=\left(-\frac{\nu+1}{r}+\frac{E\mu}{\nu}\right)v_1+\left(1+\frac{E\varkappa}{\nu}\right)v_2, \tag{31}$$

$$v_2'=\left(1-\frac{E\varkappa}{\nu}\right)v_1+\left(\frac{\nu-1}{r}-\frac{E\mu}{\nu}\right)v_2. \tag{32}$$

Если $1+E\varkappa/\nu\neq 0$, то из системы (31), (32) можно исключить $v_2(r)$ и получить следующее дифференциальное уравнение для $v_1(r)$:

$$v_1''+\frac{2}{r}v_1'+\frac{(E^2-1)r^2+2E\mu r-\nu(\nu+1)}{r^2}v_1=0. \tag{33}$$

Пусть теперь $1+E\varkappa/\nu=0$, т. е. $E=-\nu/\varkappa$, что возможно лишь при $\varkappa<0$, так как $\nu>0$ и $E>0$. В этом случае решение уравнения (31) имеет вид

$$v_1(r)=c_1r^{-\nu-1}\exp\left\{\frac{E\mu}{\nu}r\right\}.$$

Функция $v_1(r)$ удовлетворяет условиям задачи лишь при $c_1=0$. При этом для $v_2(r)$ из (32) получаем выражение

$$v_2(r)=c_2r^{\nu-1}\exp\left\{\frac{E\mu}{\nu}r\right\}.$$

Функция $v_2(r)$ при $c_2\neq 0$, очевидно, удовлетворяет условиям задачи.

Рассмотрим теперь решение уравнения (33). Выясним поведение функции $v_1(r)$ при $r\to 0$. Так как

$$|(E^2-1)r^2+2E\mu r|\ll\nu(\nu+1)$$

при $r\to 0$, то в окрестности точки $r=0$ поведение функции $v_1(r)$

будет приближенно описываться уравнением Эйлера

$$r^2 v_1'' + 2r v_1' - \nu(\nu+1) v_1 = 0,$$

решение которого имеет вид

$$v_1(r) = c_1 r^\nu + c_2 r^{-\nu-1}.$$

Из условий, налагаемых на функцию $v_1(r)$, вытекает, что $c_2 = 0$. Поэтому при $r \sim 0$ имеем $v_1(r) \approx c_1 r^\nu$.

Уравнение (33) является обобщенным уравнением гипергеометрического типа, для которого $\sigma(r) = r$, $\tilde{\tau}(r) = 2$, $\tilde{\sigma}(r) = (E^2 - 1)r^2 + 2E\mu r - \nu(\nu+1)$. Поставленная для (33) задача принадлежит к типу задач, рассмотренному в § 9. Действительно, в данном случае $\tilde{\rho}(r) = r$. Требование квадратичной интегрируемости на интервале $(0, \infty)$ и ограниченности функции $\sqrt{\tilde{\rho}(r)}v_1(r)$ при $r \to 0$ вытекает из условия нормировки (24) и поведения функции $v_1(r)$ при $r \to 0$. Поэтому при решении данной задачи воспользуемся методом, рассмотренным в § 9. Приведем (33) к уравнению гипергеометрического типа

$$\sigma(r)y'' + \tau(r)y' + \lambda y = 0$$

заменой $v_1 = \varphi(r)y$, где $\varphi(r)$ удовлетворяет уравнению $\varphi'/\varphi = \pi(r)/\sigma(r)$ ($\pi(r)$ — некоторый полином, не выше первой степени). Из четырех возможных видов полинома $\pi(r)$ выберем тот, для которого функция $\tau(r) = \tilde{\tau}(r) + 2\pi(r)$ имеет отрицательную производную и корень на интервале $(0, +\infty)$. Этим условиям удовлетворяет функция

$$\tau(r) = 2(\nu + 1 - ar), \quad a = \sqrt{1 - E^2}, \quad \nu = \sqrt{\varkappa^2 - \mu^2},$$

которой соответствуют

$$\pi(r) = \nu - ar, \quad \varphi(r) = r^\nu e^{-ar},$$
$$\lambda = 2[\mu E - (\nu+1)a], \quad \rho(r) = r^{2\nu+1}e^{-2ar}.$$

Значения энергии $E = E_n$ определяются из уравнения

$$\lambda + n\tau' + n(n-1)\sigma''/2 = 0, \quad n = 0, 1, \ldots$$

Отсюда

$$\mu E - (n + \nu + 1)a = 0, \quad a = \sqrt{1 - E^2}. \tag{34}$$

Собственные функции определяются по формуле Родрига

$$y_n(r) = \frac{C_n}{\rho(r)} \cdot \frac{d^n}{dr^n}\left[\sigma^n(r)\rho(r)\right] = C_n r^{-2\nu-1} e^{2ar} \frac{d^n}{dr^n}\left(r^{n+2\nu+1}e^{-2ar}\right). \tag{35}$$

Функции $y_n(r)$ с точностью до коэффициента пропорциональности совпадают с полиномами Лагерра $L_n^{2\nu+1}(x)$, где $x = 2ar$.

Найденное ранее собственное значение энергии $E = -\nu/\varkappa$ удовлетворяет уравнению (34) при $n = -1$. В соответствии с этим естественно заменить в (34), (35) n на $n-1$ и определять собственные значения энергии из равенства

$$\mu E - (n+\nu)a = 0, \quad n = 0, 1, \ldots \tag{36}$$

Собственные функции $v_1(r)$ будут иметь вид

$$v_1(r) = \begin{cases} A_n x^{\nu} e^{-x/2} L_{n-1}^{2\nu+1}(x), & n = 1, 2, \ldots, \\ 0, & n = 0. \end{cases} \tag{37}$$

Легко проверить, что функции $rv_1(r)$ удовлетворяют исходному требованию квадратичной интегрируемости.

Из уравнения (31) при $E = E_n$ ($n = 1, 2, \ldots$) имеем

$$v_2(r) = \frac{1}{1 + E\varkappa/\nu}\left[v_1'(r) + \left(\frac{\nu+1}{r} - \frac{E\mu}{\nu}\right) v_1(r)\right].$$

Подставляя сюда выражение для $v_1(r)$, находим

$$v_2(r) = x^{\nu-1} e^{-x/2} y(x),$$

где $y(x)$ — полином n-й степени. Для определения $y(x)$ получим предварительно уравнение для функции $v_2(r)$, исключая из системы (31), (32) функцию $v_1(r)$:

$$v_2'' + \frac{2}{r} v_2' + \frac{(E^2-1)r^2 + 2E\mu r + \nu(1-\nu)}{r^2} v_2 = 0. \tag{38}$$

В результате придем к следующему дифференциальному уравнению для $y(x)$:

$$xy'' + (2\nu - x)y' + ny = 0. \tag{39}$$

Уравнение (39) является уравнением гипергеометрического типа. Единственным полиномиальным решением этого уравнения является полином Лагерра $y(x) = B_n L_n^{2\nu-1}(x)$, откуда

$$v_2(r) = B_n x^{\nu-1} e^{-x/2} L_n^{2\nu-1}(x). \tag{40}$$

Нетрудно убедиться, что полученное ранее решение при $E = -\nu/\varkappa$ содержится в этой формуле при $n = 0$.

Для нахождения связи между постоянными A_n и B_n в (37) и (40) сравним поведение левой и правой частей равенства (31) при $r \to 0$, используя формулу

$$L_n^{\alpha}(0) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\,\Gamma(\alpha+1)}.$$

Имеем

$$2a\nu A_n L_{n-1}^{2\nu+1}(0) = -2a(\nu+1) A_n L_{n-1}^{2\nu+1}(0) + \left(1 + \frac{E\varkappa}{\nu}\right) B_n L_n^{2\nu-1}(0),$$

откуда

$$A_n = \frac{\nu + E\varkappa}{an(n+2\nu)} B_n, \quad n = 1, 2, \ldots$$

Так как

$$n(n+2\nu) = (n+\nu)^2 - \nu^2 = \frac{E^2\mu^2}{a^2} - \nu^2 = \frac{E^2\varkappa^2 - \nu^2}{a^2},$$

то $A_n = \frac{a}{E\varkappa - \nu} B_n$. Зная функции $v_1(r)$, $v_2(r)$, можно найти $f(r)$, $g(r)$:

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = C^{-1}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, \quad C^{-1} = \frac{1}{2\nu(\varkappa-\nu)}\begin{pmatrix} \mu & \varkappa-\nu \\ \varkappa-\nu & \mu \end{pmatrix}.$$

Поэтому

$$f(r) = \frac{B_n}{2\nu(\varkappa-\nu)} x^{\nu-1} e^{-x/2}\left[f_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + f_2 L_n^{2\nu-1}(x)\right],$$

$$g(r) = \frac{B_n}{2\nu(\varkappa-\nu)} x^{\nu-1} e^{-x/2}\left[g_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + g_2 L_n^{2\nu-1}(x)\right],$$

где

$$f_1 = \frac{a\mu}{E\varkappa-\nu}, \quad f_2 = \varkappa - \nu, \quad g_1 = \frac{a(\varkappa-\nu)}{E\varkappa-\nu}, \quad g_2 = \mu;$$

$$E = E_n = \frac{1}{\sqrt{1+\mu^2/(n+\nu)^2}}.$$

Формулы для $f(r)$, $g(r)$ сохраняют свою силу и при $n=0$: в этом случае надо положить равными нулю слагаемые, содержащие $L_{n-1}^{2\nu+1}(x)$.

Вычислим нормировочную постоянную B_n с помощью условия нормировки (24). Имеем

$$\int_0^\infty r^2\left[f^2(r) + g^2(r)\right] dr =$$

$$= \frac{B_n^2}{4\nu^2(\varkappa-\nu)^2(2a)^3}\int_0^\infty e^{-x}x^{2\nu}\left\{\left[f_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + f_2 L_n^{2\nu-1}(x)\right]^2 + \right.$$

$$\left. + \left[g_1 x L_{n-1}^{2\nu+1}(x) + g_2 L_n^{2\nu-1}(x)\right]^2\right\} dx = 1.$$

При вычислениях возникают два типа интегралов:

$$J_1 = \int_0^\infty e^{-x}x^{\alpha+1}\left[L_n^\alpha(x)\right]^2 dx, \quad J_2 = \int_0^\infty e^{-x}x^\alpha L_{n-1}^\alpha(x)\, L_n^{\alpha-2}(x)\, dx.$$

Интеграл J_1 можно выразить через квадрат нормы

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

если воспользоваться рекуррентным соотношением

$$xL_n^\alpha(x) = -(n+1)\,L_{n+1}^\alpha(x) + (2n+\alpha+1)\,L_n^\alpha(x) - (n+\alpha)\,L_{n-1}^\alpha(x)$$

и свойством ортогональности

$$\int\limits_0^\infty e^{-x}x^\alpha L_n^\alpha(x)\,L_m^\alpha(x)\,dx = 0, \qquad m \neq n.$$

Отсюда

$$J_1 = (2n+\alpha+1)\int\limits_0^\infty e^{-x}x^\alpha\left[L_n^\alpha(x)\right]^2dx = \frac{1}{n!}(2n+\alpha+1)\,\Gamma(n+\alpha+1).$$

Для вычисления интеграла J_2 достаточно разложить полином $L_n^{\alpha-2}(x)$ по полиномам $L_k^\alpha(x)$:

$$L_n^{\alpha-2}(x) = c_1L_n^\alpha(x) + c_2L_{n-1}^\alpha(x) + \ldots$$

Постоянные c_1, c_2 легко найти, если сравнить коэффициенты при x^n и x^{n-1} в обеих частях этого равенства: $c_1 = 1$, $c_2 = -2$. Это дает

$$J_2 = -2\int\limits_0^\infty e^{-x}x^\alpha\left[L_{n-1}^\alpha(x)\right]^2dx = -2\,\frac{\Gamma(n+\alpha)}{(n-1)!}.$$

Поэтому

$$B_n = 2a^2\sqrt{\frac{(\varkappa-\nu)\,(E\varkappa-\nu)\,n!}{\mu\Gamma(n+2\nu)}}.$$

Заметим, что нормировочная постоянная B_n сохраняет свой вид и при $n=0$.

Окончательно получаем

$$\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = \frac{a^2}{\nu}\sqrt{\frac{(E\varkappa-\nu)\,n!}{\mu(\varkappa-\nu)\,\Gamma(n+2\nu)}}\,x^{\nu-1}e^{-x/2}\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} xL_{n-1}^{2\nu+1}(x) \\ L_n^{2\nu-1}(x) \end{pmatrix}, \qquad (41)$$

где

$$f_1 = \frac{a\mu}{E\varkappa-\nu}, \quad f_2 = \varkappa-\nu, \quad g_1 = \frac{a(\varkappa-\nu)}{E\varkappa-\nu}, \quad g_2 = \mu.$$

При $n=0$ величину $xL_{n-1}^{2\nu+1}(x)$ следует считать равной нулю.

Рассмотрим переход к нерелятивистскому пределу. В этом случае $\mu \approx Z/137$ является малой величиной. Оценим порядки других величин при $\mu \to 0$. Имеем

$$E \approx 1 - \mu^2/(2N^2), \quad N = n+\nu,$$
$$a = \sqrt{1-E^2} \approx \mu/N, \quad \nu - |\varkappa| \approx -\mu^2/(2|\varkappa|).$$

Оценим теперь порядок малости коэффициентов f_1, f_2, g_1, g_2 относительно μ.

1) Пусть $l = j - 1/2$. Тогда $\varkappa = -(l+1)$, $\varkappa - \nu \approx 2\varkappa$, $E\varkappa - \nu \approx 2\varkappa$ и, следовательно,

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \mu^2 & 1 \\ \mu & \mu \end{pmatrix}.$$

2) Пусть $l = j + 1/2$. Тогда $\varkappa = l$, $\varkappa - \nu \approx \mu^2/(2l)$, $E\varkappa - \nu = (E-1)\varkappa + (\varkappa - \nu) \approx \mu^2(N^2 - l^2)/(2lN^2)$, откуда

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ g_1 & g_2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & \mu^2 \\ \mu & \mu \end{pmatrix}.$$

Из этих рассуждений видно, что во всех случаях $|g(r)| \ll |f(r)|$, причем

$$f(r) \approx \pm 2\mu^{3/2} \sqrt{\frac{(N-l-1)!}{(N+l)!}}\, x^l e^{-x/2} L_{N-l-1}^{2l+1}(x). \tag{42}$$

Знак плюс соответствует $l = j + 1/2$, знак минус соответствует $l = j - 1/2$. Число $N = n + \nu$ в нерелятивистском случае равно $n + |\varkappa| = n + |j + 1/2|$; оно соответствует главному квантовому числу для решений уравнения Шредингера. Выражение (42) для $f(r)$ полностью совпадает с соответствующим решением уравнения Шредингера.

Интересно отметить, что представление функций $f(r)$, $g(r)$ в виде (41) удобно для перехода к нерелятивистскому пределу, так как один из коэффициентов f_1, f_2, g_1, g_2 при $\mu \to 0$ во много раз больше всех остальных. В то же время в традиционном представлении для функций $f(r)$, $g(r)$ имеется несколько одинаковых по порядку малости коэффициентов. Поэтому для установления совпадения нерелятивистского предела с решением уравнения Шредингера приходится дополнительно использовать рекуррентные соотношения для гипергеометрических функций.

Полиномы Лагерра, входящие в выражения для $f(r)$ и $g(r)$, можно выразить через вырожденные гипергеометрические функции, если воспользоваться соотношением

$$L_n^\alpha(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\,\Gamma(\alpha+1)} F(-n, \alpha+1, x).$$

Тогда (41) примет вид

$$\begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix} = D_n x^{\nu-1} e^{-x/2} \begin{pmatrix} \bar f_1 & \bar f_2 \\ \bar g_1 & \bar g_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xF(-n+1, 2\nu+2, x) \\ F(-n, 2\nu, x) \end{pmatrix},$$

где

$$D_n = \frac{1}{\nu\Gamma(2\nu+2)} \sqrt{\frac{(E\varkappa - \nu)\,\Gamma(n+2\nu)}{\mu(\varkappa - \nu)\, n!}},$$

$$\bar f_1 = a\mu(E\varkappa + \nu), \qquad \bar f_2 = 2\nu a^2(2\nu+1)(\varkappa - \nu),$$

$$\bar g_1 = a(\varkappa - \nu)(E\varkappa + \nu), \qquad \bar g_2 = 2\mu\nu a^2(2\nu + 1).$$

Полученные выражения для $f(r)$, $g(r)$ остаются справедливыми с точностью до нормировочного множителя и для состояний непрерывного спектра, если вместо целого значения n использовать постоянную $n=n(E)$, связанную с заданной величиной E соотношением (36), т. е.

$$n=\frac{\mu E}{i\sqrt{E^2-1}}-\nu, \qquad E>1.$$

Мы рассмотрели некоторые основные задачи квантовой механики. Теми же методами можно решать также многочисленные модельные задачи квантовой механики.

4. Коэффициенты Клебша — Гордана и их связь с полиномами Хана. Как известно из курса квантовой механики, в тех случаях, когда гамильтониан физической системы не меняется при поворотах системы координат, оператор квадрата момента количества движения и оператор проекции момента на определенное направление (например на ось z) коммутируют с гамильтонианом системы. Это означает, что существуют состояния, для которых волновая функция системы ψ является собственной функцией коммутирующих друг с другом операторов квадрата момента и проекции момента на ось z. В связи с этим рассмотрим более подробно свойства этих операторов.

Обозначим оператор момента количества движения и его проекции на координатные оси в единицах постоянной Планка $\hbar$ соответственно через $\mathbf{J}$ и J_x, J_y, J_z. Операторы J_x, J_y, J_z удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{aligned} J_xJ_y-J_yJ_x&=iJ_z,\\ J_yJ_z-J_zJ_y&=iJ_x,\\ J_zJ_x-J_xJ_z&=iJ_y. \end{aligned} \tag{43}$$

Из этих соотношений вытекает, что операторы $J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$ и J_z коммутируют и имеют общую систему собственных функций ψ_{jm}, которые удовлетворяют уравнениям

$$J^2\psi_{jm}=j(j+1)\psi_{jm}, \quad J_z\psi_{jm}=m\psi_{jm}, \tag{44}$$

$$J_\pm\psi_{jm}=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\psi_{j,\,m\pm1}. \tag{45}$$

Здесь $J_\pm=J_x\pm iJ_y$, система функций $\{\psi_{jm}\}$ является ортонормированной, квантовое число j может принимать только целые или полуцелые неотрицательные значения, а квантовое число m может принимать значения $-j$, $-j+1$, ..., $j-1$, j.

В квантовой механике большое значение имеет задача о сложении двух моментов количества движения. Пусть физическая система состоит из двух подсистем, для которых операторы момента количества движения $\mathbf{J}_1$ и $\mathbf{J}_2$ коммутируют, и состояния подсистем описываются волновыми функциями $\psi_{j_1m_1}$, $\psi_{j_2m_2}$. В этом случае $\mathbf{J}=\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2$ — оператор полного момента системы, и для него справедливы коммутационные соотношения (43).

Поэтому должны существовать волновые функции Φ_{jm} операторов J^2 и J_z, удовлетворяющие (44), (45). Задача состоит в том, чтобы выразить Φ_{jm} через известные функции $\psi_{j_1m_1}$ и $\psi_{j_2m_2}$.

Эта задача может быть решена с помощью следующих соображений. Собственными функциями оператора $J_z = J_{1z} + J_{2z}$, соответствующими собственному значению $m = m_1 + m_2$, являются произведения $\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}$. Для построения функций Φ_{jm} требуется составить такую линейную комбинацию произведений $\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}$ при фиксированном значении $m = m_1 + m_2$, которая была бы собственной функцией оператора J^2. Так как оператор J^2 коммутирует с операторами J_1^2 и J_2^2, то в этой линейной комбинации числа j_1, j_2 можно считать фиксированными, т. е.

$$\Phi_{jm} = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 \,|\, j m\rangle \psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}. \tag{46}$$

Величины $\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$ называются *коэффициентами Клебша — Гордана.*

Так как $m = m_1 + m_2$ и, кроме того, $-j_1 \leqslant m_1 \leqslant j_1$, $-j_2 \leqslant m_2 \leqslant j_2$, $-j \leqslant m \leqslant j$, то квантовое число j может принимать значения

$$|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2. \tag{47}$$

В связи с этим в дальнейшем будем полагать коэффициенты Клебша — Гордана равными нулю, если не выполняются указанные ограничения для m_1, m_2, m, j.

Ортонормированность собственных функций Φ_{jm}, $\psi_{j_1m_1}$, $\psi_{j_2m_2}$ приводит к условию нормировки

$$\sum_{m_1; m_2} |\langle j_1 m_1 j_2 m_2 \; j m\rangle|^2 = 1. \tag{48}$$

Коэффициенты Клебша — Гордана играют важную роль в квантовой механике. С их помощью можно, например, строить волновые функции сложных систем (ядер, атомов, молекул). Теория коэффициентов Клебша — Гордана достаточно развита. Не ставя своей целью полное изложение теории коэффициентов Клебша — Гордана, рассмотрим простой вывод явного выражения для этих коэффициентов и установим их связь с классическими ортогональными полиномами дискретной переменной *).

Рассмотрим соотношения (45) для функций Φ_{jm}, $\psi_{j_1m_1}$, $\psi_{j_2m_2}$. Применяя к обеим частям (46) оператор $J_\pm = J_{1\pm} + J_{2\pm}$, приходим к следующим рекуррентным соотношениям для коэффициентов Клебша — Гордана:

$$\alpha^{j}_{m-1} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 \,|\, j, m-1\rangle =$$
$$= \alpha^{j_1}_{m_1} \langle j_1, m_1 + 1, j_2 m_2 \,|\, j m\rangle + \alpha^{j_2}_{m_2} \langle j_1 m_1 j_2, m_2 + 1 \,|\, j m\rangle, \tag{49}$$

---

*) Более подробное изложение этих вопросов см. в книге: Никифоров А. Ф., Суслов С. К., Уваров В. Б. Классические ортогональные полиномы дискретной переменной.— М.: Наука, 1984.

$$\alpha_m^j \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j, m+1\rangle =$$
$$= \alpha_{m_1-1}^{j_1} \langle j_1, m_1 - 1, j_2 m_2 | j m\rangle + \alpha_{m_2-1}^{j_2} \langle j_1 m_1 j_2, m_2 - 1 | j m\rangle, \qquad (50)$$

где $\alpha_m^j = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$.

Приведем рекуррентные соотношения (49), (50) к более простому виду. Для этого достаточно заметить, что в (49) изменение любого из индексов m_1, m_2, m в коэффициенте $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle$ сопровождается появлением множителя с тем же индексом. Поэтому при фиксированных значениях j_1, j_2, j преобразование

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = A(m_1)B(m_2)C(m)u_m(m_1, m_2) \qquad (51)$$

позволяет с помощью подбора множителей A, B, C получить уравнение для функции $u_m(m_1, m_2)$ с произвольными постоянными коэффициентами:

$$cu_{m-1}(m_1, m_2) = au_m(m_1+1, m_2) + bu_m(m_1, m_2+1). \qquad (52)$$

Для этого должны быть выполнены условия

$$\alpha_{m_1}^{j_1} \frac{A(m_1+1)}{A(m_1)} = a, \quad \alpha_{m_2}^{j_2} \frac{B(m_2+1)}{B(m_2)} = b, \quad \alpha_{m-1}^{j} \frac{C(m+1)}{C(m)} = c. \qquad (53)$$

Если ввести обозначение

$$\beta_m^j = \prod_{s=-j}^{m-1} \alpha_s^j, \quad \beta_{-j}^j = 1,$$

то частные решения уравнений (53) можно представить в виде

$$A(m_1) = \frac{a^{j_1+m_1}}{\beta_{m_1}^{j_1}}, \quad B(m_2) = \frac{b^{j_2+m_2}}{\beta_{m_2}^{j_2}}, \quad C(m) = \frac{\beta_m^j}{c^{j+m}}. \qquad (54)$$

Так как для коэффициента $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle$ значения m_1 и m_2 связаны условием $m_1 + m_2 = m$, то в дальнейшем величину $u_m(m_1, m_2) = u_m(m_1, m - m_1)$ будем обозначать $u_m(m_1)$. В этих обозначениях (52) можно переписать в виде

$$cu_{m-1}(m_1) = au_m(m_1+1) + bu_m(m_1). \qquad (55)$$

Удобно выбрать $a = 1$, $b = -1$, $c = 1$. Тогда (55) примет вид

$$u_{m-1}(m_1) = \Delta u_m(m_1), \qquad (56)$$

где

$$\Delta f(x) = f(x+1) - f(x),$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = (-1)^{j_2+m_2} \frac{\beta_m^j}{\beta_{m_1}^{j_1}\beta_{m_2}^{j_2}} u_m(m_1), \quad m_2 = m - m_1. \qquad (57)$$

Аналогично, рекуррентное соотношение (50) можно привести к виду

$$v_{m+1}(m_1) = \nabla v_m(m_1), \qquad (58)$$

где

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-1),$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = (-1)^{j_1+m_1} \frac{\beta^{j_1}_{m_1}\beta^{j_2}_{m_2}}{\beta^{j}_{m}} v_m(m_1), \quad m_2 = m - m_1. \tag{59}$$

Из уравнения (56) последовательно получаем

$$u_m(m_1) = \Delta u_{m+1}(m_1) = \Delta^2 u_{m+2}(m_1) = \ldots = \Delta^{j-m} u_j(m_1). \tag{60}$$

Для определения $u_j(m_1)$ воспользуемся уравнением (58) при $m = j$. Так как $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j, \, j+1\rangle = 0$, то $v_{j+1}(m_1) = 0$. Поэтому в силу (58) величина $v_j(m_1)$ не зависит от m_1, т. е. $v_j(m_1) = C$, где постоянная C может зависеть лишь от j_1, j_2, j. Отсюда в силу (57), (59) имеем

$$u_j(m_1) = (-1)^{j_2+j-m_1} \frac{\beta^{j_1}_{m_1}\beta^{j_2}_{j-m_1}}{\beta^{j}_{j}} \langle j_1 m_1 j_2, j-m_1 | j j\rangle =$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j} C \left(\frac{\beta^{j_1}_{m_1}\beta^{j_2}_{j-m_1}}{\beta^{j}_{j}} \right)^2. \tag{61}$$

Таким образом, с помощью (57), (60) получаем

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle =$$

$$= (-1)^{j_1+j_2+j+j_2+m_2} C \frac{\beta^{j}_{m}}{(\beta^{j}_{j})^2 \beta^{j_1}_{m_1}\beta^{j_2}_{m_2}} \Delta^{j-m} \left[\left(\beta^{j_1}_{m_1}\beta^{j_2}_{j-m_1}\right)^2 \right]. \tag{62}$$

Так как

$$\beta^{j}_{m} = \left[\frac{(2j)!\,(j+m)!}{(j-m)!} \right]^{1/2},$$

то выражение (62) для коэффициентов Клебша — Гордана можно переписать в виде

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle =$$

$$= (-1)^{j_2+m_2} D \left[\frac{(j_1-m_1)!\,(j_2-m_2)!\,(j+m)!}{(j_1+m_1)!\,(j_2+m_2)!\,(j-m)!} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \Delta^{j-m} \left[\frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+j-m_1)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-j+m_1)!} \right], \tag{63}$$

где D — некоторая постоянная, зависящая от j_1, j_2, j. Величину $|D|$ можно найти из условия нормировки (48) при $m = j$:

$$|D|^2 (2j)! \sum_{m_1} \frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+j-m_1)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-j+m_1)!} = 1. \tag{64}$$

Из (63), (64) видно, что коэффициент Клебша — Гордана можно определить с точностью до фазового множителя $e^{i\delta}$, который обычно выбирается из дополнительного условия

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle |_{m_1=j_1, m=j} \geqslant 0,$$

эквивалентного требованию $D = (-1)^{j-j_1+j_2} |D|$.

Сумма в (64) может быть вычислена с помощью соотношения

$$\Gamma(x)\Gamma(y) = \Gamma(x+y)\int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}dt.$$

Поскольку

$$(j_1+m_1)!\,(j_2+j-m_1)! = (j_1+j_2+j+1)\int_0^1 t^{j_1+m_1}(1-t)^{j_2+j-m_1}dt,$$

то получаем

$$\sum_{m_1}\frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+j-m_1)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-j+m_1)!} =$$

$$= \frac{(j_1+j_2+j+1)!}{(j_1+j_2-j)!}\sum_{m_1} C_{j_1+j_2-j}^{j_1-m_1}\int_0^1 t^{j_1+m_1}(1-t)^{j_2+j-m}dt.$$

С другой стороны,

$$\sum_{m_1} C_{j_1+j_2-j}^{j_1-m_1} t^{j_1+m_1}(1-t)^{j_2+j-m_1} =$$

$$= t^{j_1+j-j_2}(1-t)^{j_2+j-j_1}\sum_{m_1} C_{j_1+j_2-j}^{j_1-m_1}(1-t)^{j_1-m_1}t^{j_2-j+m_1} =$$

$$= t^{j_1+j-j_2}(1-t)^{j_2+j-j_1}.$$

Поэтому

$$\sum_{m_1}\frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+j-m_1)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-j+m_1)!} =$$

$$= \frac{(j_1+j_2+j+1)!\,(j_1+j-j_2)!\,(j_2+j-j_1)!}{(j_1+j_2-j)!\,(2j+1)!},$$

$$D = (-1)^{j-j_1+j_2}\left[\frac{(2j+1)\,(j_1+j_2-j)!}{(j_1+j_2+j+1)!\,(j+j_1-j_2)!\,(j-j_1+j_2)!}\right]^{1/2}. \quad (65)$$

Раскрывая в (63) степень оператора конечной разности по формуле

$$\Delta^n f(m_1) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^{n+k}\frac{n!}{k!\,(n-k)!}f(m_1+k),$$

приходим к выражению для коэффициентов Клебша — Гордана в виде суммы конечного числа слагаемых:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle =$$
$$= (-1)^{j_1-m_1}\left[\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!}{(j_1+j_2+j+1)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}\times\right.$$
$$\left.\times\frac{(j-m)!(j+m)!(j_1-m_1)!(j_2-m_2)!}{(j_1+m_1)!(j_2+m_2)!}\right]^{1/2}\times$$
$$\times\sum_k\frac{(-1)^k(j_1+m_1+k)!(j_2+j-m_1-k)!}{k!(j-m-k)!(j_1-m_1-k)!(j_2-j+m_1+k)!} \qquad (66)$$

(при выводе формулы мы воспользовались тем, что $2(j+j_2-j_1)$ — четное число).

Из (66) можно получить следующие соотношения симметрии для коэффициентов Клебша — Гордана:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_1, -m_1, j_2, -m_2 | j, -m\rangle, \qquad (67)$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_2 m_2 j_1 m_1 | j m\rangle, \qquad (68)$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = \left\langle \frac{j_1+j_2+m}{2}\,\frac{j_1-j_2+m_1-m_2}{2}\right.$$
$$\left.\frac{j_1+j_2-m}{2}\,\frac{j_1-j_2-m_1+m_2}{2}\,\right| j, j_1-j_2\Big\rangle. \qquad (69)$$

С помощью (63) можно получить связь коэффициентов Клебша — Гордана с полиномами Хана $h_n^{(\alpha,\beta)}(x)$, если воспользоваться формулой Родрига (12.22) для этих полиномов:

$$h_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{B_n}{\rho(x)}\nabla^n\rho_n(x),$$

где

$$B_n = \frac{(-1)^n}{n!},\quad \rho(x) = \frac{(N+\alpha-1-x)!(\beta+x)!}{x!(N-1-x)!}, \qquad (70)$$
$$\rho_n(x) = \frac{(N+\alpha-1-x)!(\beta+n+x)!}{x!(N-n-1-x)!}.$$

Для установления этой связи положим в (63) $x = j_1 - m_1$. Так как

$$\Delta_{m_1} f(m_1) = f(m_1+1) - f(m_1) = f(j_1-x+1) - f(j_1-x) =$$
$$= -\nabla_x f(j_1-x),$$

то

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = (-1)^x |D| \left[\frac{(j+m)!}{(j-m)!}\right]^{1/2} \times$$
$$\times \left[\frac{x!\,(j_1+j_2-m-x)!}{(2j_1-x)!\,(j_2-j_1+m+x)!}\right] \nabla^{j-m} \left[\frac{(2j_1-x)!\,(j-j_1+j_2+x)!}{x!\,(j_1+j_2-j-x)!}\right]. \tag{71}$$

Из сопоставления (70) и (71) видно, что коэффициенты Клебша — Гордана можно выразить через полиномы Хана при $n=j-m$, $N=j_1+j_2-m+1$, $\alpha=j_1-j_2+m$, $\beta=j_2-j_1+m$, $x=j_1-m_1$:

$$\sqrt{\rho(x)}\, h_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(-1)^{j_1-m_1+j-m}}{|D|\sqrt{(j-m)!\,(j+m)!}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle.$$

Как нетрудно проверить,

$$|D|\sqrt{(j-m)!\ (j+m)!} = 1/d_n,$$

где d_n^2 — квадрат нормы полиномов Хана.

В результате мы получаем простую связь коэффициентов Клебша — Гордана и полиномов Хана:

$$(-1)^{j_1-m_1+j-m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = \frac{1}{d_n} \sqrt{\rho(x)}\, h_n^{(\alpha,\beta)}(x), \tag{72}$$

при

$$x=j_1-m_1,\quad n=j-m,\quad N=j_1+j_2-m+1,$$
$$\alpha=m+m',\quad \beta=m-m',\quad m'=j_1-j_2,$$
$$\rho(x) = \frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+m_2)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-m_2)!}.$$

Соотношение (72) установлено при ограничениях $\alpha > -1$, $\beta > -1$, для выполнения которых достаточно потребовать, чтобы

$$j_1 \geqslant j_2,\quad m \geqslant j_1-j_2. \tag{73}$$

Этого всегда можно добиться для произвольного коэффициента Клебша — Гордана, если воспользоваться соотношениями симметрии (67)—(69).

Коэффициенты Клебша — Гордана $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle$ отличны от нуля при

$$|j_1-j_2| \leqslant j \leqslant j_1+j_2,\quad m=m_1+m_2. \tag{74}$$

Условия (74) являются необходимыми. Если они не выполнены, то коэффициенты Клебша — Гордана равны нулю. Кроме того, известны случаи обращения коэффициентов в нуль при частных значениях моментов и проекций, когда условия (74) выполнены. Существование таких корней приводит к дополнительным правилам отбора, запрещающим квантовые переходы, амплитуды которых пропорциональны нулевым коэффициентам Клебша — Гордана.

Связь коэффициентов Клебша — Гордана с полиномами Хана дает интерпретацию корней этих коэффициентов. Как было отмечено выше, произвольный коэффициент Клебша — Гордана соотношениями симметрии можно свести к коэффициенту, который выражается через полином Хана по формуле (72). Поэтому все корни коэффициента Клебша — Гордана являются корнями полинома Хана, находящимися в одной из точек $x = x_i = 0, 1, \ldots \ldots, N-1$.

Пример. Рассмотрим корни коэффициента $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j, j-1\rangle$, которому соответствует полином Хана первой степени

$$h_1^{(\alpha,\beta)}(x) = -\tau(x) = (\alpha+\beta+2)x - (\beta+1)(N-1) = \\ = 2jx - (j_2 - j_1 + j)(j_1 + j_2 - j + 1).$$

При выполнении правил отбора (74) коэффициент Клебша — Гордана $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j, j-1\rangle$ обращается в нуль, когда корень полинома $h_1(x)$ находится в точке $x = j_1 - m_1$. Это приводит к условию

$$j(m_1 - m_2) = (j_1 - j_2)(j_1 + j_2 + 1).$$

Такой корень имеют, например, коэффициенты $\langle 1\,0\,1\,0|1\,0\rangle$ и $\langle 3\,2\,2\,0|3\,2\rangle$.

С помощью соотношения (72), связывающего коэффициенты Клебша — Гордана с полиномами Хана, можно получить целый ряд свойств этих коэффициентов, вытекающих из соответствующих свойств полиномов Хана. В виде примера получим удобное для исследования асимптотическое представление коэффициентов Клебша — Гордана $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j\, m\rangle$ при $j_1 \to \infty$, $j_2 \to \infty$ и фиксированных значениях $m' = j_1 - j_2$, j, m, считая, что $m' \geqslant 0$, $m \geqslant m'$. Для полиномов Хана это соответствует $N \to \infty$ и фиксированным значениям α, β, n. Так как при $z \to \infty$ $(z+a)! \approx \approx z^a z!$, то можно получить следующее асимптотическое представление веса $\rho(x)$ для полиномов Хана при $N \to \infty$:

$$\rho(x) \approx (N/2)^{\alpha+\beta}(1-s)^{\alpha}(1+s)^{\beta}, \quad x = N(1+s)/2.$$

Кроме того, как показано в § 12, п. 6, при $N \to \infty$

$$h_n^{(\alpha,\beta)}(x) \approx N^n P_n^{(\alpha,\beta)}(s).$$

Поэтому при $j_1 \to \infty$ и фиксированных значениях j, m, $j_1 - j_2$ имеем

$$(-1)^{j_1 - m_1 + j - m}\sqrt{j_1 + j_2 - m + 1}\,\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j\, m\rangle \approx \\ \approx \frac{1}{2^m}\sqrt{\frac{(2j+1)(j-m)!\,(j+m)!}{(j-m')!\,(j+m')!}} \times \\ \times (1-s)^{(m+m')/2}(1+s)^{(m-m')/2} P_{j-m}^{(m+m',m-m')}(s),$$

где

$$s = \frac{(j_1 - m_1) - (j_2 - m_2) - 1}{(j_1 - m_1) + (j_2 - m_2) + 1}, \quad m \geqslant m' \geqslant 0, \quad m' = j_1 - j_2.$$

Если при этом величина $n=j-m$ достаточно велика, то для полиномов Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ можно воспользоваться асимптотическим представлением (19.18) при $n\to\infty$, что дает

$$(-1)^{j_1-m_1+j-m}\sqrt{j_1+j_2-m+1}\,\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle \approx$$
$$\approx\sqrt{\frac{2(2j+1)(j-m-1)!\,(j+m)!}{\pi(j-m')!\,(j+m')!}}\cdot\frac{\cos[(j+1/2)\theta-(m+m'+1/2)\pi/2]}{\sqrt{\sin\theta}},$$

где

$$\cos\theta=\frac{(j_1-m_1)-(j_2-m_2)-1}{(j_1-m_1)+(j_2-m_2)+1},\quad m\geqslant m'\geqslant 0,\quad m'=j_1-j_2,$$
$$0<\delta\leqslant\theta\leqslant\pi-\delta.$$

Свойства коэффициентов Клебша— Гордана $\langle j_1 m_1 j_2 m_2|j m\rangle$, связанные с изменением j, можно получить, используя связь полиномов Хана с дуальными полиномами Хана. В результате приходим к следующему соотношению между коэффициентами Клебша — Гордана и дуальными полиномами Хана:

$$\langle j_1 m_1 j_1 m_2 | j m\rangle=\left[\frac{(2j+1)\rho(j)}{d_n^2}\right]^{1/2} w_n^{(c)}(x,a,b).$$

Здесь $x=j(j+1)$, $a=m$, $b=j_1+j_2+1$, $c=j_2-j_1$, $n=j_1-m_1$, $m\geqslant j_1-j_2\geqslant 0$, $\rho(j)$ и d_n^2 — вес и квадрат нормы дуального полинома Хана $w_n^{(c)}(x,a,b)$.

С помощью свойств симметрии

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle=\langle j_2,-m_2,j_1,-m_1|j,-m\rangle=$$
$$=\left\langle \frac{j_1+j_2-m}{2}\,\frac{j_2-j_1-m_2+m_1}{2}\,\frac{j_1+j_2+m}{2}\,\frac{j_2-j_1+m_2-m_1}{2}\right| j, j_2-j_1\Big\rangle$$

можно получить аналогичное соотношение

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle=\left[\frac{(2j+1)\rho(j)}{d_n^2}\right]^{1/2} w_n^{(c)}(x,a,b).$$

Здесь $x=j(j+1)$, $a=j_2-j_1$, $b=j_1+j_2+1$, $c=m$, $n=j_1-m_1$, $j_2-j_1\geqslant m\geqslant 0$.

5. $6j$-символы Вигнера и полиномы Рака. В квантовой механике при сложении трех угловых моментов $\mathbf{J}_1$, $\mathbf{J}_2$, $\mathbf{J}_3$ возможны различные схемы связи. Например,

$$\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2=\mathbf{J}_{12},\quad \mathbf{J}_{12}+\mathbf{J}_3=\mathbf{J}\tag{75}$$

или

$$\mathbf{J}_2+\mathbf{J}_3=\mathbf{J}_{23},\quad \mathbf{J}_1+\mathbf{J}_{23}=\mathbf{J}.\tag{76}$$

Обозначим собственные функции для полного момента $\mathbf{J}$, соответствующие схемам сложения моментов (75), (76), соответственно через $|j_{12}jm\rangle$ и $|j_{23}jm\rangle$. Преобразование, связывающее собственные функции $|j_{12}jm\rangle$ и $|j_{23}jm\rangle$, имеет вид

$$|j_{23}j\,m\rangle = \sum_{j_{12}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_{12} & j & j_{23} \end{pmatrix} |j_{12}\,j\,m\rangle. \tag{77}$$

Матрица преобразования $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_{12} & j & j_{23} \end{pmatrix}$ связана с так называемыми $6j$-*символами Вигнера*

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}$$

соотношением

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_{12} & j & j_{23} \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3+j} [(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}. \tag{78}$$

Матрица преобразования между двумя ортонормированными системами функций $|j_{12}\,j\,m\rangle$ и $|j_{23}\,j\,m\rangle$ должна быть унитарной, что приводит к следующему соотношению ортогональности для $6j$-символов:

$$\sum_{j_{23}} (2j_{12}+1)(2j_{23}+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j'_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} = \delta_{j_{12},j'_{12}}. \tag{79}$$

Покажем, что $6j$-символы можно выразить через полиномы Рака. Из (77) следует, что $6j$-символы можно выразить через коэффициенты Клебша — Гордана

$$\langle j_1\,m_1\,j_{23}\,m_{23}\,|\,j\,m\rangle \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_{12} & j & j_{23} \end{pmatrix} =$$
$$= \sum_{m_2} \langle j_{12}\,m_{12}\,j_3\,m - m_{12}\,|\,j\,m\rangle \langle j_1\,m_1\,j_2\,m_2\,|\,j_{12}\,m_{12}\rangle \times$$
$$\times \langle j_2\;m_2\;j_3, m_{23} - m_2\,|\,j_{23}\;m_{23}\rangle. \tag{80}$$

Выясним характер зависимости правой части данного равенства от переменной j_{23}. С этой целью воспользуемся соотношением между коэффициентами Клебша — Гордана и дуальными полиномами Хана $w_n^{(c)}(x, a, b)$ $(x = x(s) = s(s+1))$, приведенным в п. 4:

$$\langle j_2\,m_2\,j_3\,m_3\,|\,j_{23}\,m_{23}\rangle = \left[\frac{\bar{\rho}(j_{23})(2j_{23}+1)}{\bar{d}^2_{j_2-m_2}}\right]^{1/2} \times$$
$$\times w^{(m_{23})}_{j_2-m_2}[j_{23}(j_{23}+1),\ j_3 - j_2,\ j_2 + j_3 + 1], \tag{81}$$
$$j_3 - j_2 \geqslant m_{23} \geqslant 0,$$

где $\overline{\rho}(s)$ и $\overline{d}_n^2$ — вес и квадрат нормы полиномов $w_n^{(c)}(x, a, b)$:

$$\overline{\rho}(s) = \frac{\Gamma(a+s+1)\,\Gamma(c+s+1)}{\Gamma(s-a+1)\,\Gamma(b-s)\,\Gamma(b+s+1)\,\Gamma(s-c+1)},$$

$$\overline{d}_n^2 = \frac{\Gamma(a+c+n+1)}{n!\,(b-a-n-1)!\,\Gamma(b-c-n)}.$$

При подстановке (81) в (80) нетрудно видеть, что правая часть (80) с точностью до известного множителя $[\overline{\rho}(j_{23})(2j_{23}+1)]^{1/2}$ является полиномом по переменной $x=j_{23}(j_{23}+1)$. Степень такого полинома равна $\max(j_2-m_2)=j_{12}+m_1+j_2$. Выберем ее минимальной, т. е. положим $m_1=-j_1$. Тогда, подставляя в (80) значения коэффициентов Клебша — Гордана частного вида, для указанного полинома можно вычислить вес и коэффициент при старшей степени, полагая $j_{12}=j_1-j_2$. В результате, используя свойства ортогональности (79), находим

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} = (-1)^{j_1+j+j_{23}} \left[\frac{\rho(j_{23})}{(2j_{12}+1)\,d^2_{j_{12}-j_1+j_2}}\right]^{1/2} \times$$

$$\times u^{(m-m',\,m+m')}_{j_{12}-j_1+j_2}[j_{23}(j_{23}+1);\ j_3-j_2,\ j_3+j_2+1], \qquad (82)$$

где $m=j_1-j_2$, $m'=j_3-j$, $j_1\geqslant j$, $j_3\geqslant j_2$, $j_1+j\geqslant j_2+j_3$, $j_3+j\geqslant \geqslant j_1+j_2$, $\rho(s)$ и d_n^2 — вес и квадрат нормы полиномов Рака $v_n^{(\alpha,\beta)}(x, a, b)$, $x=s(s+1)$.

§ 27. Применение специальных функций в некоторых задачах вычислительной математики

1. Квадратурные формулы типа Гаусса. *Квадратурными формулами типа Гаусса* называют формулы вида

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx \approx \sum_{j=1}^n \lambda_j f(x_j), \qquad (1)$$

в которых коэффициенты λ_j и узлы x_j $(j=1, 2, \ldots, n)$ подбираются таким образом, чтобы формула (1) была точной для произвольного полинома степени $2n-1$.

Если известны моменты весовой функции

$$C_k = \int_a^b x^k \rho(x)\,dx,$$

то λ_j, x_j можно найти из системы уравнений

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j x_j^k = C_k, \qquad k=0, 1, \ldots, 2n-1.$$

Однако обычно для построения квадратурных формул вида (1) поступают иначе. Оказывается, что узлы x_j $(j=1, 2, \ldots, n)$ являются нулями полинома $p_n(x)$, ортогонального на интервале