

так как $H_0 = 1$. Отсюда видно, что

$$L_{mn} = (-1)^{n-m} 2^m m! \frac{d^{n-m-1}}{dx^{n-m-1}} (e^{-x^2}) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad \text{при } m < n.$$

Если $m = n$, то

$$L_{nn} = 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 2^n n! \sqrt{\pi} = \|H_n\|^2.$$

Тем самым доказано, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & m = n. \end{cases}$$

Система полиномов Чебышева — Эрмита является замкнутой (на доказательстве этого факта мы не останавливаемся), и, следовательно, мы нашли все решения задачи (10), т. е. $\lambda \neq 2n$ не может быть собственным значением.

5. Функции Чебышева — Эрмита. В приложениях (см. стр. 712) часто пользуются функциями Чебышева — Эрмита

$$\psi_n(x) = h_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad h_n(x) = \frac{H_n(x)}{\|H_n(x)\|},$$

образующими ортогональную и нормированную с весом $\rho(x) = 1$ систему на бесконечном интервале $-\infty < x < \infty$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \psi_m(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n. \end{cases}$$

Эти функции обращаются в нуль при $x \rightarrow \pm \infty$ и удовлетворяют уравнению

$$\psi_n'' + (\lambda - x^2) \psi_n = 0 \quad \text{при } \lambda = 2n + 1.$$

§ 2. Полиномы Чебышева — Лагерра

1. Дифференциальная формула. Полиномы Чебышева — Лагерра $L_n(x)$ мы определим при помощи производящей функции

$$\Psi(\rho, x) = \frac{1}{1 - \rho} e^{-\frac{x\rho}{1 - \rho}}. \quad (1)$$

Разлагая ее в степенной ряд

$$\Psi(\rho, x) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \rho^n, \quad L_n(x) = \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n \Psi}{\partial \rho^n} \right|_{\rho=0} \quad (2)$$

и пользуясь теоремой Коши, найдем:

$$L_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\Psi(\zeta, x)}{\zeta^{n+1}} d\zeta,$$

где C — контур, охватывающий точку $\zeta = 0$. Введем новую переменную интегрирования z , положив $\zeta = 1 - \frac{x}{z}$, $d\zeta = \frac{x dz}{z^2}$; тогда

$$L_n(x) = e^x \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} \frac{z^n e^{-z}}{(z-x)^{n+1}} dz, \quad (3)$$

где C_1 — контур, охватывающий точку $z = x$. Формула (3) дает

$$L_n(x) = \frac{1}{n!} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}). \quad (4)$$

Отсюда заключаем, что $L_n(x)$ есть многочлен степени n . В частности, имеем $L_0(x) = 1$, $L_1(x) = 1 - x$.

2. Рекуррентные формулы. Дифференцируя $\Psi(\rho, x)$ по ρ и x , получим два тождества:

$$(1 - \rho)^2 \Psi_\rho - (1 - \rho - x) \Psi = 0, \quad (5)$$

$$(1 - \rho) \Psi_x + \rho \Psi = 0. \quad (6)$$

Подставим в (5) и (6) ряд (2) и приравняем коэффициенты при ρ^{n+1} нулю; это дает рекуррентные формулы

$$(n+1) L_{n+1} - (2n+1-x) L_n + n L_{n-1} = 0, \quad (7)$$

$$L'_{n+1} - L'_n + L_n = 0. \quad (8)$$

Формула (7) устанавливает связь между полиномами L_{n+1} , L_n , L_{n-1} и позволяет последовательно определить все L_n , например:

$$L_2(x) = \frac{1}{2} [(3-x) L_1 - L_0] = \frac{1}{2} x^2 - 2x + 1.$$

Выведем еще одну рекуррентную формулу

$$x L'_n + (n+1-x) L_n - (n+1) L_{n+1} = 0. \quad (9)$$

Для этого заменим в (7) n на $n+1$ и продифференцируем по x :

$$(n+2) L'_{n+2} - (2n+3-x) L'_{n+1} + L_{n+1} + (n+1) L'_n = 0;$$

дважды применяя формулу (8), исключим отсюда L'_{n+2} и L'_{n+1} и в результате получим (9).

3. Уравнение Чебышева — Лагерра. Найдем уравнение, решением которого является $L_n(x)$. Дифференцируя (9) по x , получим $x L''_n + (n+2-x) L'_n - L_n - (n+1) L'_{n+1} = 0$, после чего

исключим L'_{n+1} при помощи (8). В результате приходим к уравнению для L_n :

$$xL''_n + (1-x)L'_n + nL_n = 0 \quad \text{или} \quad \frac{d}{dx} \left(xe^{-x} \frac{dL_n}{dx} \right) + ne^{-x}L_n = 0, \quad (10)$$

которое называется уравнением Чебышева — Лагерра.

Тем самым доказано, что $L_n(x)$ есть собственная функция, соответствующая собственному значению $\lambda = n$ задачи:

найти значения λ , при которых уравнение

$$(xe^{-x}y')' + \lambda e^{-x}y = 0, \quad 0 < x < \infty, \quad (11)$$

имеет в области $0 < x < \infty$ нетривиальное решение, ограниченное при $x = 0$ и возрастающее при $x \rightarrow \infty$ не быстрее, чем конечная степень x .

Заметим, что уравнение (10) для $L_n(x)$ можно получить, если продифференцировать $n+2$ раза функцию $z = x^n e^{-x}$ и воспользоваться дифференциальной формулой (4).

4. Ортогональность и норма полиномов Чебышева — Лагерра. Докажем ортогональность и нормированность с весом e^{-x} полиномов $L_n(x)$, исходя из формулы (4). Рассмотрим интеграл

$$J_{mn} = \int_0^\infty L_m(x) L_n(x) e^{-x} dx = \frac{1}{n!} \int_0^\infty L_m(x) \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) dx.$$

Пусть $m \leq n$. Интегрируя m раз по частям и учитывая, что из-за наличия множителя вида $x^k e^{-x}$ ($k > 0$) все подстановки обращаются в нуль, получим:

$$J_{mn} = (-1)^m \frac{1}{n!} \int_0^\infty \frac{d^m L_m}{dx^m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (x^n e^{-x}) dx. \quad (12)$$

Если $m < n$, то, интегрируя еще раз, найдем $J_{mn} = 0$, так как $\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} L_m = 0$. В случае $m = n$ имеем

$$\frac{d^n L_n}{dx^n} = (-1)^n$$

и

$$J_{nn} = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\infty (-1)^n x^n e^{-x} dx = \frac{\Gamma(n+1)}{n!} = 1 = \|L_n\|^2. \quad (13)$$

Итак, полиномы Чебышева — Лагерра образуют ортонормированную с весом e^{-x} систему функций:

$$\int_0^\infty L_m(x) L_n(x) e^{-x} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n. \end{cases} \quad (14)$$

5. Обобщенные полиномы Чебышева — Лагерра. При изучении движения электрона в поле кулоновых сил, а также в других задачах современной физики наряду с полиномами $L_n(x)$ встречаются обобщенные полиномы Чебышева — Лагерра $L_n^s(x)$. Теорию этих полиномов можно построить по аналогии с пп. 1 — 4, исходя из производящей функции

$$\Psi^s(\rho, x) = \frac{1}{(1-\rho)^{s+1}} e^{-\frac{x\rho}{1-\rho}}, \quad s > -1, \quad (15)$$

и разлагая ее в ряд по степеням ρ :

$$\Psi^s(\rho, x) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^s(x) \rho^n; \quad L_n^s(x) = \left. \frac{1}{n!} \frac{\partial^n \Psi^s}{\partial \rho^n} (\rho, x) \right|_{\rho=0}.$$

Повторяя рассуждения, проведенные для $s = 0$ в п. 1, находим:

$$L_n^s(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\Psi^s(\zeta, x)}{\zeta^{n+1}} d\zeta = x^{-s} e^x \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} \frac{z^{n+s} e^{-z}}{(z-x)^{n+1}} dz.$$

Отсюда следует, что

$$L_n^s(x) = \frac{1}{n!} x^{-s} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+s} e^{-x}), \quad (16)$$

т. е. $L_n^s(x)$ действительно является многочленом n -й степени.

В частности, $L_0^s(x) = 1$, $L_1^s(x) = 1 + s - x$.

Вводя функцию $z = x^{n+s} e^{-x}$ и дифференцируя ее $(n+2)$ раза по x , найдем для функции $u = \frac{d^n z}{dx^n}$ уравнение $xu'' + (x+1-s)u' + (n+1)u = 0$. Вычислим производные для $L_n^s(x) = \frac{1}{n!} x^{-s} e^x u$ и учтем при этом уравнение для u ; тогда получим уравнение

$$x(L_n^s)'' - (x-s-1)(L_n^s)' + nL_n^s = 0, \quad (17)$$

которому удовлетворяют обобщенные полиномы $L_n^s(x)$. Тем самым доказано, что обобщенные полиномы Чебышева — Лагерра являются собственными функциями, соответствующими собственным значениям

$$\lambda_n = n + \frac{s+1}{2}$$

следующей задачи:

найти значения λ , при которых уравнение

$$xy'' + (s+1-x)y' + \left(\lambda - \frac{s+1}{2}\right)y = 0$$

или

$$(x^{s+1}e^{-x}y')' + x^s e^{-x} \left(\lambda - \frac{s+1}{2}\right)y = 0 \quad (18)$$

имеет в области $0 \leq x < \infty$ нетривиальное решение, ограниченное при $x = 0$ и возрастающее при $x \rightarrow \infty$ не быстрее конечной степени x .

Исходя из дифференциальной формулы (16) и проводя рассуждения по аналогии с п. 4, нетрудно доказать, что полиномы L_n^s образуют ортогональную с весом $e^{-x}x^s$ систему функций:

$$\int_0^\infty L_n^s(x) L_m^s(x) e^{-x} x^s dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{\Gamma(n+s+1)}{n!}, & m = n. \end{cases} \quad (s > -1),$$

Полиномам Чебышева — Лагерра $L_n^s(x)$ соответствуют ортогональные и нормированные с весом $\rho(x) = 1$ функции

$$\Psi_n^s(x) = x^{\frac{s}{2}} e^{-\frac{x}{2}} l_n^s(x),$$

где

$$\|l_n^s\| = 1,$$

которые являются решениями уравнения

$$(x\Psi')' + \left(\lambda - \frac{x}{4} - \frac{s^2}{4x}\right)\Psi = 0 \quad (19)$$

при граничных условиях: ограниченность в точке $x = 0$ и обращение в нуль при $x \rightarrow \infty$, соответствующими собственным значениям

$$\lambda_n = n + \frac{s+1}{2}.$$

Из формулы (18) видно, что $L_n^0(x) = L_n(x)$ для λ_n равного $n + \frac{1}{2}$ (если в уравнении (18) λ заменить на $\lambda + \frac{1}{2}$, то при $s = 0$ оно совпадает с уравнением Чебышева — Лагерра (10)).

В заключение отметим, что ортогональные системы полиномов $\{L_n(x)\}$ и $\{L_n^s(x)\}$ являются замкнутыми (на доказательстве этого факта не останавливаемся). Тем самым мы нашли все собственные функции задач (10) и (18).

§ 3. Простейшие задачи для уравнения Шредингера¹⁾

1. Уравнение Шредингера. В квантовой механике поведение частицы, находящейся в поле потенциальных сил, описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi + U(x, y, z, t) \Psi, \quad (1)$$

¹⁾ Рассматриваемые здесь задачи для уравнения Шредингера дают примеры применения полиномов Чебышева — Эрмита и Чебышева — Лагерра. Приведенное ниже изложение не претендует на полное освещение вопросов, связанных с уравнением Шредингера. По университетской программе квантовая механика изучается после курса математической физики.