А.Ф. Никифоров, С.К. Суслов

ИАЭ-4150/1

# СПЕЦИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Москва 1985

УДК 517.5

Ключевые слова: классические ортогональные полиномы, сферические, цилиндрические и гипергеометрические функции, классические ортогональные полиномы дискретной переменной, обобщенные сферические функции, коэффициенты Клебша – Гордана, коэффициенты Рака.

При решении многих задач теоретической и математической физики, при разработке математических моделей реальных физических явлений и в разнообразных приложениях широко используются различные специальные функции. Теории этих функций посвящен ряд фундаментальных трудов, в которых их свойства детально изучены. Возрастающая специализация научных исследований и широкое распространение математических методов усиливают потребность в доступном изложении теории специальных функций, основанном на общей и достаточно простой идее.

В настоящей работе с единой точки зрения рассмотрены специальные функции математической физики – классические ортогональные полиномы, сферические, цилиндрические и гипергеометрические функции. Проведено обобщение, которое позволяет включить в излагаемую схему классические ортогональные полиномы дискретной переменной. Обсуждаются приложения специальных функций в квантовой механике. Препринт написан по материалам [14, 16, 13] в соответствии с лекцией, прочитанной на зимней Школе ИАЭ им. И.В. Курчатова "Физика нелинейных явлений" в 1984 г.

## 1. ОСНОВЫ ТЕОРИИ СПЕЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

При разработке математической модели реального физического явления исходную задачу, как правило, приходится упрощать с целью предварительного выяснения основных закономерностей процесса и понимания относительной роли различных эффектов. При этом часто удается получить решение упрощенной задачи в удобной для исследования аналитической форме, что позволяет представить качественную картину явления. Такое предварительное упрощение необходимо также для построения надежных и экономичных вычислительных алгоритмов, предназначенных для решения полной задачи. При этом на практике редко удается ограничиться задачами, приводящими к элементарным функциям.

Многие модельные задачи атомной, молекулярной и ядерной физики, электродинамики и акустики, в частности, связанные с изучением процессов теплопроводности и взаимодействия излучения с веществом, распространения электромагнитных и звуковых волн, с разработкой теории ядерных реакторов и внутреннего строения звезд, приводят к дифференциальным уравнениям вида

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

где $\sigma(z)$ и $\tilde{\sigma}(z)$ — полиномы не выше второй степени; $\tilde{\tau}(z)$ — полином не выше первой степени. Уравнения такого вида возникают, например, при решении уравнений Лапласа и Гемгольца в различных криволинейных системах координат методом разделения переменных.

При изучении решений уравнения (1) удобно предполагать, что переменная $z$ и коэффициенты полиномов $\sigma(z)$, $\tilde{\sigma}(z)$ и $\tilde{\tau}(z)$ могут принимать любые комплексные значения.

Частными решениями уравнения вида (1) являются *классические ортогональные полиномы (полиномы Якоби, Лагерра и Эрмита), сферические, цилиндрические и гипергеометрические функции.* Эти функции часто называют *специальными функциями математической физики.*

Знакомство с их теорией необходимо при изучении теоретической и математической физики. Поэтому изложение основ теории специальных функций, связанных с решением уравнения (1), занимает большое место в книгах по математической и теоретической физике.

Ниже рассматривается общий и достаточно простой метод получения решений уравнения (1), предложенный в [14, 16]. Для решений этого уравнения найдено интегральное представление, из которого можно легко получить основные свойства перечисленных выше специальных функций: разложения в степенные ряды, асимптотические представления, рекуррентные и функциональные соотношения и т.д.

**1.1. Приведение дифференциального уравнения для специальных функций к простейшему виду.** Попытаемся с помощью замены переменных $u = \varphi(z)\,y$ привести уравнение (1) к более простому виду путем специального выбора функции $\varphi(z)$. Имеем

$$y'' + \left(2\frac{\varphi'}{\varphi} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma}\right) y' + \left(\frac{\varphi''}{\varphi} + \frac{\varphi'}{\varphi}\frac{\tilde{\tau}}{\sigma} + \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2}\right) y = 0, \qquad (2)$$

Для того чтобы уравнение (2) не было более сложным, чем (1), естественно потребовать для начала, чтобы коэффициент при $y'$ имел вид $\tau(z)/\sigma(z)$, где $\tau(z)$ — некоторый полином не выше первой степени. Тогда для функции $\varphi(z)$ получим уравнение

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}, \qquad (3)$$

где

$$\pi(z) = \frac{1}{2}\left[\tau(z) - \tilde{\tau}(z)\right] \qquad (4)$$

— полином не выше первой степени. В результате уравнение (2) принимает вид

$$y'' + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} y' + \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} y = 0, \qquad (5)$$

где

$$\bar{\sigma}(z) = \tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi(z)\left[\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)\right] + \pi'(z)\sigma(z).$$

Так как функции $\tau(z)$ и $\bar{\sigma}(z)$ являются полиномами не выше первой и второй степени соответственно, то уравнение (5) оказывается уравнением того же типа, что и уравнение (1).

Среди всех возможных видов уравнения (5) путем специального выбора полинома $\pi(z)$ можно выбрать наиболее простой, если потребовать, чтобы

$$\tilde{\sigma}(z) = \lambda\,\sigma(z) \tag{6}$$

($\lambda$ — некоторая постоянная). Тогда уравнение (5) приведется к виду

$$\sigma(z)\,y'' + \tau(z)\,y' + \lambda y = 0. \tag{7}$$

Будем называть уравнение (7) *уравнением гипергеометрического типа*, а его решения — *функциями гипергеометрического типа*. В соответствии с этим уравнение (1) естественно называть *обобщенным уравнением гипергеометрического типа**).

Условия (6) можно переписать в виде

$$\pi^2 + (\tilde{\tau} - \sigma')\pi + \tilde{\sigma} - k\sigma = 0,$$

где

$$k = \lambda - \pi'(z). \tag{8}$$

Если считать постоянную $k$ известной, то в результате решения квадратного уравнения для $\pi(z)$ получим

$$\pi(z) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma}\,. \tag{9}$$

Так как $\pi(z)$ — полином, то дискриминант полинома второй степени $p(z) = [(\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z))/2]^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)$, стоящего под корнем, равен нулю. Из этого условия получаем уравнение для постоянной $k$, вообще говоря, квадратное. После определения $k$ находим

---

*) Если $\sigma(z)$ — полином второй степени, то уравнение (1) является частным случаем уравнения Римана с тремя различными особыми точками, одна из которых помещена на бесконечности.

$\pi(z)$ по формуле (9), а также $\tau(z)$ и $\lambda$ – по формулам (4) и (8). Затем из уравнения (3) находим функцию $\varphi(z)$. Очевидно, что сведение уравнения (1) к уравнению (7) может быть осуществлено несколькими способами в соответствии с выбором различных значений k и выбором различных знаков в формуле (9) для $\pi(z)$ *).

Рассмотренное преобразование позволяет ограничиться изучением свойств решений уравнения (7).

**1.2. Полиномы гипергеометрического типа.** Приступим к изучению свойств решений уравнения гипергеометрического типа (7). Покажем, что *производные любого порядка от функций гипергеометрического типа также являются функциями гипергеометрического типа.*

Для доказательства продифференцируем уравнение (7). В результате получим, что функция $v_1(z) = y'(z)$ будет удовлетворять уравнению

$$\sigma(z) v_1'' + \tau_1(z) v_1' + \mu_1 v_1 = 0, \qquad (10)$$

где

$$\tau_1(z) = \tau(z) + \sigma'(z), \quad \mu_1 = \lambda + \tau'(z).$$

Так как $\tau_1(z)$ – полином не выше первой степени, а $\mu_1$ не зависит от z, то уравнение (10) является уравнением гипергеометрического типа.

Справедливо и обратное утверждение: *любое решение уравнения* (10) *при* $\lambda \neq 0$ *является производной от некоторого решения уравнения* (7).

Действительно, пусть $v_1(z)$ – решение уравнения (10). Если бы функция $v_1(z)$ являлась производной от некоторого решения $y(z)$ уравнения (7), то эти функции были бы связаны следующим образом [см. (7)]:

$$y(z) = -\frac{1}{\lambda}\left[\sigma(z) v_1' + \tau(z) v_1\right].$$

Покажем, что функция $y(z)$, полученная по этой формуле, удовлетворяет уравнению (7), а производная этой функции совпадает с $v_1(z)$. Имеем

*) Об особых случаях приведения уравнения (1) к виду (7) см. [16]

$$\lambda y' = -\left[\sigma(z) v_1'' + \tau_1(z) v_1' + \tau'(z) v_1\right] = \lambda v_1,$$

т.е. действительно $y' = v_1(z)$. Подставляя $v_1 = y'$ в исходное выражение $y(z)$, приходим к уравнению (7) для $y(z)$.

Подобным же образом для функции $v_n(z) = y^{(n)}(z)$ можно получить уравнение гипергеометрического типа

$$\sigma(z) v_n'' + \tau_n(z) v_n' + \mu_n v_n = 0, \tag{11}$$

где
$$\tau_n(z) = \tau(z) + n\sigma'(z),$$
$$\mu_n = \lambda + n\tau' + \frac{1}{2} n(n-1)\sigma''.$$

При этом любое решение уравнения (11) при $\mu_k \neq 0$ ($k = 0, 1, \ldots, n-1$) можно представить в виде $v_n(z) = y^{(n)}(z)$, где $y(z)$ – некоторое решение уравнения (7).

Рассмотренное свойство позволяет построить семейство частных решений уравнения (7), соответствующих определенным значениям $\lambda$. Действительно, уравнение (11) при $\mu_n = 0$ имеет очевидное частное решение $v_n(z) = \mathrm{const}$. Так как $v_n(z) = y^{(n)}(z)$, то это означает, что при

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

существует частное решение уравнения гипергеометрического типа $y(z) = y_n(z)$, являющееся полиномом степени $n$. Такие решения мы будем называть *полиномами гипергеометрического типа.* Полиномы $y_n(z)$ являются в известном смысле простейшими решениями уравнения (7).

Чтобы получить явное выражение для полинома $y_n(z)$, умножим уравнения (7) и (11) на такие функции $\rho(z)$ и $\rho_n(z)$, которые позволяют записать эти уравнения в самосопряженном виде

$$(\sigma\rho y')' + \lambda\rho y = 0, \tag{12}$$

$$(\sigma\rho_n v_n')' + \mu_n\rho_n v_n = 0. \tag{13}$$

Здесь функции $\rho(z)$ и $\rho_n(z)$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho, \tag{14}$$

$$(\sigma\rho_n)' = \tau_n\rho_n. \tag{15}$$

Используя явное выражение для $\tau_n(z)$, нетрудно установить связь между функциями $\rho_n(z)$ и $\rho_0(z) \equiv \rho(z)$. Имеем

$$\frac{\rho_n'}{\rho_n} = \frac{\tau_n - \sigma'}{\sigma} = \frac{\tau - \sigma'}{\sigma} + n\frac{\sigma'}{\sigma},$$

Откуда

$$\frac{\rho_n'}{\rho_n} = \frac{\rho'}{\rho} + n\frac{\sigma'}{\sigma}$$

и, следовательно,

$$\rho_n(z) = \sigma^n(z)\rho(z) \quad (n=0,1,\ldots). \tag{16}$$

Перейдем теперь к непосредственному получению явного выражения для полиномов гипергеометрического типа $y_n(z)$. Так как $\sigma\rho_n = \rho_{n+1}$ и $v_n(z) = y^{(n)}(z)$, то уравнение (13) можно переписать в виде рекуррентного соотношения

$$\rho_n v_n = -\frac{1}{\mu_n}(\rho_{n+1}v_{n+1})'.$$

Отсюда при $m < n$ последовательно получаем

$$\rho_m v_m = -\frac{1}{\mu_m}(\rho_{m+1}v_{m+1})' =$$

$$= \left(-\frac{1}{\mu_m}\right)\left(-\frac{1}{\mu_{m+1}}\right)(\rho_{m+2}v_{m+2})'' = \ldots = \frac{A_m}{A_n}(\rho_n v_n)^{(n-m)},$$

где

$$A_n = A_n(\lambda) = (-1)^n \prod_{k=0}^{n-1}\mu_k, \quad A_0 = 1. \tag{17}$$

Если функция $y(z)$ является полиномом степени $n$, т.е. $y = y_n(z)$, $\lambda = \lambda_n$, то $v_n(z) = y^{(n)}(z) = \mathrm{const}$, и мы получаем следующее выражение для $y_n^{(m)}(z)$:

$$y_n^{(m)}(z) = \frac{A_m B_n}{\rho_m(z)}\left[\rho_n(z)\right]^{(n-m)}, \tag{18}$$

где

$$B_n = \frac{1}{A_n} y_n^{(n)}(z). \qquad (19)$$

Отсюда, в частности, при $m = 0$ вытекает явное выражение для полиномов гипергеометрического типа $y_n(z)$:

$$y_n(z) = \frac{B_n}{\rho(z)} [\sigma^n(z)\rho(z)]^{(n)} \quad (n = 0, 1, \ldots). \qquad (20a)$$

Таким образом, полиномиальные решения уравнения (7) определяются формулой (20а) однозначно с точностью до нормировочного множителя $B_n$. Эти решения соответствуют значениям

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{1}{2} n(n-1)\sigma'' \quad (n = 0, 1, \ldots). \qquad (21)$$

Состношение (20а) называют *формулой Родрига*, так как оно было выведено в 1814 г. французским математиком Родригом для частного случая полиномов гипергеометрического типа — полиномов Лежандре, для которых $\sigma(z) = 1 - z^2$, $\rho(z) = 1$.

**1.3. Интегральные представления для функций гипергеометрического типа.** Чтобы найти вид частных решений уравнения (7) при произвольных значениях $\lambda$, перепишем формулу Родрига (20а) с помощью интегральной формулы Коши для производных аналитической функции:

$$y_n(z) = \frac{C_n}{\rho(z)} \int_C \frac{\sigma^n(s)\rho(s)}{(s-z)^{n+1}} ds. \qquad (20б)$$

Здесь $C_n = B_n n!/2\pi i$, $C$ — замкнутый контур, охватывающий точку $s = z$.

Представление решения уравнения гипергеометрического типа при $\lambda = \lambda_n$ в виде формулы (20б) дает возможность предположить, что при произвольном значении $\lambda$ частное решение уравнения (7) можно искать в виде

$$y = y_\nu(z) = \frac{C_\nu}{\rho(z)} \int_C \frac{\sigma^\nu(s)\rho(s)}{(s-z)^{\nu+1}} ds, \qquad (22)$$

где $C_\nu$ — нормировочная постоянная, а величина $\nu$ связана с $\lambda$ соотношением, аналогичным равенству (21):

$$\lambda + \nu \tau' + \frac{1}{2}\nu(\nu-1)\sigma'' = 0. \tag{23}$$

Покажем, что при определенном выборе контура C, который будем считать, вообще говоря, незамкнутым, наше предположение справедливо.

Теорема 1. *Пусть функция $\rho(z)$ удовлетворяет уравнению (14), $\nu$ — корень уравнения (23). Тогда уравнение гипергеометрического типа (7) имеет частные решения вида (22), если выполнены условия:*

1) *при вычислении производных $u'(z)$ и $u''(z)$ от интеграла*

$$u(z) = \int_C \frac{\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+1}}\,ds, \quad \rho_\nu(s) = \sigma^\nu(s)\rho(s),$$

*входящего в формулу (22), можно менять местами дифференцирование по z и интегрирование по s, т.е.*

$$u'(z) = (\nu+1)\int_C \frac{\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+2}}\,ds, \quad u''(z) = (\nu+1)(\nu+2)\int_C \frac{\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+3}}\,ds;$$

2) *контур C выбран так, что справедливо равенство*

$$\left.\frac{\sigma(s)\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+2}}\right|_{s_1}^{s_2} = 0, \tag{24}$$

*где $s_1$ и $s_2$ — концы контура.*

Доказательство. Получим дифференциальное уравнение для функции $u(z)$. Для функции $\rho_\nu(s) = \sigma^\nu(s)\rho(s)$ имеем

$$[\sigma(s)\rho_\nu(s)]' = \tau_\nu(s)\rho_\nu(s),$$

где $\tau_\nu(s) = \tau(s) + \nu\sigma'(s)$. Умножим обе части этого уравнения на $(s-z)^{-\nu-2}$ и проинтегрируем по контуру C. После интегрирования по частям получим

$$\left.\frac{\sigma(s)\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+2}}\right|_{s_1}^{s_2} + (\nu+2)\int_C \frac{\sigma(s)\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+3}}\,ds = \int_C \frac{\tau_\nu(s)\rho_\nu(s)}{(s-z)^{\nu+2}}\,ds.$$

По условию подстановка равна нулю. Разложим полиномы $\sigma(s)$ и $\tau_\nu(s)$ по степеням $s - z$:

$$\sigma(s) = \sigma(z) + \sigma'(z)(s-z) + \frac{1}{2}\sigma''(z)(s-z)^2;$$

$$\tau_\nu(s) = \tau_\nu(z) + \tau'_\nu(z)(s-z).$$

Если принять во внимание интегральные формулы Коши для функций $u(z)$, $u'(z)$ и $u''(z)$, то в результате приходим к уравнению

$$\frac{1}{\nu+1}\sigma(z)u'' + \frac{\nu+2}{\nu+1}\sigma'(z)u' + \frac{\nu+2}{2}\sigma'' u = \frac{1}{\nu+1}\tau_\nu(z)u' + \tau'_\nu u.$$

После подстановки явного выражения для $\tau_\nu(z)$ это уравнение можно переписать в виде

$$\sigma(z)u'' + [2\sigma'(z) - \tau(z)]u' - (\nu+1)\left(\tau' + \frac{\nu-2}{2}\sigma''\right)u = 0. \tag{25}$$

Получим теперь с помощью (25) уравнение для функции $y(z) = (C_\nu/\rho(z))u(z)$. Уравнение (25) является обобщенным уравнением гипергеометрического типа (1) при

$$\tilde{\tau}(z) = 2\sigma'(z) - \tau(z),$$

$$\tilde{\sigma}(z) = -(\nu+1)\left(\tau' + \frac{\nu-2}{2}\sigma''\right)\sigma(z).$$

Так как

$$u(z) = \frac{1}{C_\nu}\rho(z)y(z), \quad \frac{\rho'}{\rho} = \frac{\tau - \sigma'}{\sigma},$$

то для получения дифференциального уравнения для $y(z)$ можно воспользоваться преобразованием, рассмотренным в подразд. 1.1, полагая

$$\varphi(z) = \frac{1}{C_\nu}\rho(z), \quad \pi(z) = \tau(z) - \sigma'(z).$$

В результате приходим к уравнению

$$y'' + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)}y' + \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}y = 0,$$

где

$$\bar{\sigma}(z) = \tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z)[\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z) =$$

$$= \left[-\nu\tau' - \frac{1}{2}\nu(\nu-1)\sigma''\right]\sigma(z) = \lambda\sigma(z)$$

(мы воспользовались формулой (23) для постоянной $\lambda$).

Полученное уравнение, очевидно, совпадает с уравнением (7), что и требовалось доказать.

Рассмотрим некоторые возможные виды контура С. Условие (24), очевидно, будет выполнено, если $\sigma^{\nu+1}(s)\rho(s)(s-z)^{-(\nu+2)}|_{s_1,s_2} = 0$. В связи с этим возможны следующие случаи:

а) пусть $s_0$ — корень уравнения $\sigma(s) = 0$. Если выполняется условие $\sigma^{\nu+1}(s)\rho(s)|_{s=s_0} = 0$, то в качестве одного из концов контура можно выбрать точку $s = s_0$;

б) если $\mathrm{Re}(\nu + 2) < 0$, то в качестве одного из концов можно взять $s = z$;

в) иногда в качестве конца контура можно выбрать значение $s = \infty$, если

$$\lim_{s\to\infty} \frac{\sigma^{\nu+1}(s)\rho(s)}{(s-z)^{\nu+2}} = 0.$$

Опираясь на доказанную теорему, мы можем построить несколько частных решений уравнения (7), соответствующих различным видам контура С и различным значениям $\nu$. Кроме того, число частных решений можно увеличить, если воспользоваться преобразованием уравнения, рассмотренным в подразд. 1.1. Действительно, уравнение гипергеометрического типа (7) можно рассматривать как обобщенное уравнение гипергеометрического типа (1), для которого $\tilde{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$, $\tilde{\tau}(z) = \tau(z)$. В результате преобразования исходное уравнение переходит в другие уравнения гипергеометрического типа. Построив для последних частные решения, мы получим новые частные решения для исходного уравнения. Так как уравнение гипергеометрического типа имеет лишь два линейно независимых решения, то должны существовать линейные соотношения между построенными частными решениями. Таким способом можно получать, в частности, функциональные соотношения для функций гипергеометрического типа (см. [16]).

При построении решений уравнения (7) проще всего ограничиваться контурами простого вида — прямыми линиями или отрезками прямых линий. Контуры такого вида можно выбрать, вообще говоря, лишь при некоторых ограничениях, наложенных на коэффициенты дифференциального уравнения. Распространение результатов, полученных при таких ограничениях, на более общие случаи может быть произведено с помощью аналитического продолжения решений.

**1.4. Примеры.** Применим полученные результаты для вывода основных свойств наиболее употребительных специальных функций гипергеометрического типа.

Классические ортогональные полиномы. Линейной заменой независимой переменной, не меняющей тип уравнения (7), полиномы гипергеометрического типа $y_n(z)$, заданные формулой Родрига (20а), можно свести к следующим каноническим видам в зависимости от степени полинома $\sigma(z)$:

а) $\sigma(z) = 1 - z^2$. Решая уравнение $(\sigma\rho)' = \tau\rho$ при $\tau(z) = -(\alpha + \beta + 2)z + \beta - \alpha$, для функции $\rho(z)$ получим $\rho(z) = (1-z)^{\alpha} \times (1+z)^{\beta}$, где $\alpha$ и $\beta$ — некоторые постоянные. Полиномы $y_n(z)$ при $B_n = (-1)^n/2^n n!$ являются *полиномами Якоби* $P_n^{(\alpha,\beta)}(z)$;

б) $\sigma(z) = z$, $\tau(z) = -z + \alpha + 1$. В этом случае $\rho(z) = z^{\alpha}e^{-z}$. Полиномы $y_n(z)$ при $B_n = 1/n!$ являются *полиномами Лагерра* $L_n^{\alpha}(z)$;

в) $\sigma(z) = 1$, $\tau(z) = -2z$, $\rho(z) = -e^{-z^2}$. Полиномы $y_n(z)$ при $B_n = (-1)^n$ являются *полиномами Эрмита* $H_n(z)$.

*Полиномы гипергеометрического типа $y_n(z)$ ортогональны с весом $\rho(z)$ на некотором интервале $(a, b)$, если выполняется условие*

$$\sigma(z)\rho(z)z^k\Big|_{z=a,b} = 0 \quad (k=0,1,\ldots). \tag{26}$$

Действительно, из уравнений (12) для полиномов $y_n(z)$ и $y_m(z)$ и условия (26) вытекает, что

$$(\lambda_m - \lambda_n)\int_a^b y_m(z)y_n(z)\rho(z)dz =$$

$$= \sigma(z)\rho(z)\left[y_m(z)y_n'(z) - y_m'(z)y_n(z)\right]\Big|_a^b = 0.$$

Отсюда при $\lambda_m \neq \lambda_n$ (что эквивалентно $m \neq n$) имеем

$$\int_a^b y_m(z)y_n(z)\rho(z)dz = 0.$$

Условию (26) полиномы Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(z)$ удовлетворяют при $a = -1$, $b = 1$, $\alpha > -1$, $\beta > -1$; полиномы Лагерра $L_n^{\alpha}(z)$ — при $a = 0$, $b = +\infty$, $\alpha > -1$; полиномы Эрмита $H_n(z)$ — при $a = -\infty$, $b = +\infty$. Эти полиномы называются *классическими ортогональными полиномами*.

Из результатов, полученных в подразд. 1.2, вытекает, что производные $y_n^{(m)}(z)$ от классических ортогональных полиномов будут в свою очередь ортогональны на интервале $(a, b)$ с весом $\rho_m(z) = \sigma^m(z)\rho(z)$. Более подробное изложение свойств классических ортогональных полиномов можно найти в [1, 3, 14, 16, 19].

Цилиндрические функции. *Уравнение Бесселя*

$$z^2u'' + zu' + (z^2-\nu^2)u = 0 \tag{27а}$$

является частным случаем обобщенного уравнения гипергеометрического типа (1), для которого $\sigma(z) = z$, $\tilde{\tau}(z) = 1$, $\tilde{\sigma}(z) = z^2 - \nu^2$. При приведении уравнения (27) к уравнению гипергеометрического типа в соответствии с выбором различных значений k и выбором различных знаков в формуле (9) для $\pi(z)$ возможны следующие виды функций $\varphi(z)$: $\varphi(z) = z^{\pm\nu}e^{\pm iz}$. Рассмотрим, например, $\varphi(z) = z^{\nu}e^{iz}$. Полагая $u(z) = \varphi(z)y$, с помощью теоремы 1 получим следующее частное решение уравнения (27а):

$$u_\nu(z) = a_\nu z^{-\nu}e^{-iz}\int_C [s(z-s)]^{\nu-1/2}e^{2is}\,ds,$$

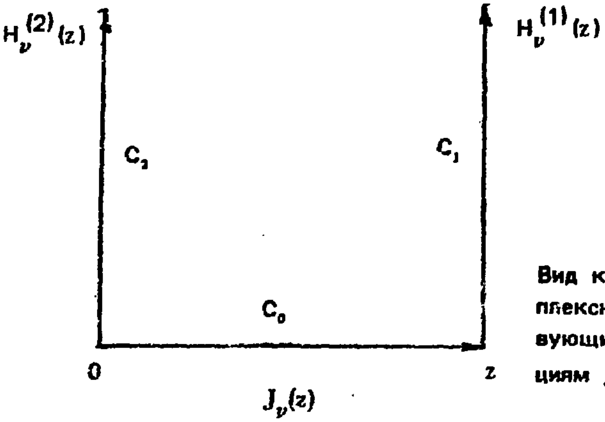
где $a_\nu$ — нормировочная постоянная, контур C выбирается из условия

$$s^{\nu+1/2}(z-s)^{\nu-3/2}e^{2is}\Big|_{s_1, s_2} = 0.$$

В качестве контуров C на плоскости комплексной переменной s при $z > 0$, $\operatorname{Re}\nu > 3/2$ можно выбрать контуры $C_0$, $C_1$, $C_2$, изображенные на рисунке. Для них справедливы параметрические представления: $s = z/2\,(1 + t)$, $-1 \leqslant t \leqslant 1$ для $C_0$; $s = z + i\,(t/2)$, $0 \leqslant t < \infty$ для $C_1$; $s = i\,(t/2)$, $0 \leqslant t < \infty$ для $C_2$. В результате приходим к следующим трем решениям уравнения (27а):

$$u_\nu^{(0)}(z) = \frac{a_\nu^{(0)}}{2^{2\nu}}z^\nu\int_{-1}^{1}(1-t^2)^{\nu-1/2}e^{izt}\,dt =$$

$$= \frac{a_\nu^{(0)}}{2^{2\nu}}z^\nu\int_{-1}^{1}(1-t^2)^{\nu-1/2}\cos zt\,dt, \tag{27б}$$




Вид контуров $C_0$, $C_1$, $C_2$ в комплексной s-плоскости, соответствующих цилиндрическим функциям $J_\nu(z)$, $H_\nu^{(1)}(z)$, $H_\nu^{(2)}(z)$

$$u_\nu^{(1)}(z)=-\frac{a_\nu^{(1)}}{2^\nu}\, e^{-\frac{i\pi}{2}(\nu+\frac{1}{2})}\,\frac{e^{iz}}{\sqrt{2z}}\int^{\infty} e^{-t}\, t^{\nu-\frac{1}{2}}\left(1+\frac{it}{2z}\right)^{\nu-\frac{1}{2}} dt, \tag{27в}$$

$$u_\nu^{(2)}(z)=\frac{a_\nu^{(2)}}{2^\nu}\, e^{\frac{i\pi}{2}(\nu+\frac{1}{2})}\,\frac{e^{-iz}}{\sqrt{2z}}\int_0^{\infty} e^{-t}\, t^{\nu-\frac{1}{2}}\left(1-\frac{it}{2z}\right)^{\nu-\frac{1}{2}} dt. \tag{27г}$$

Функция $u_\nu^{(0)}(z)$ при $a_\nu^{(0)} = 2^\nu/\sqrt{\pi}\Gamma(\nu+1/2)$ называется *функцией Бесселя первого рода* и обозначается $J_\nu(z)$. Функции $u_\nu^{(1)}(z)$ и $u_\nu^{(2)}(z)$ при $a_\nu^{(2)} = -a_\nu^{(1)} = 2a_\nu^{(0)}$ являются *функциями Ханкеля первого и второго рода* $H_\nu^{(1)}(z)$ и $H_\nu^{(2)}(z)$. Интегральные представления (27б), (27в), (27г) называются *представлениями Пуассона.* Интегральное представление (27б) позволяет получить разложение функции $J_\nu(z)$ в ряд по степеням z. Интегральные представления (27в) и (27г) удобны для изучения асимптотического поведения функций Ханкеля $H_\nu^{(1,2)}(z)$ при $z \to \infty$.

Поскольку уравнение (27а) может иметь только два линейно независимых решения, то функции $J_\nu(z)$, $H_\nu^{(1)}(z)$ и $H_\nu^{(2)}(z)$ должны быть связаны линейным соотношением. Для доказательства достаточно применить теорему Коши к контуру C, состоящему из контуров $C_0$, $C_1$, $C_2$ и замкнутому на бесконечности (см. рисунок).

В результате получим

$$J_\nu(z) = \frac{1}{2}\left[H_\nu^{(1)}(z) + H_\nu^{(2)}(z)\right].$$

В качестве второго линейно независимого решения уравнения (27а) в ряде случаев удобно выбрать *функцию Бесселя второго рода*

$$Y_\nu(z) = \frac{1}{2i}\left[H_\nu^{(1)}(z) - H_\nu^{(2)}(z)\right].$$

При вещественных значениях z и вещественных $\nu$ справедливы соотношения $H_\nu^{(2)}(z) = \overline{H_\nu^{(1)}}(z)$, $J_\nu(z) = \mathrm{Re}H_\nu^{(1)}(z)$, $Y_\nu(z) = \mathrm{Im}H_\nu^{(1)}(z)$.

Дальнейшие свойства цилиндрических функций рассмотрены в [1, 3, 6, 7, 16, 28].

Гипергеометрические функции. Уравнение (7) в зависимости от степени полинома $\sigma(z)$ линейной заменой независимой переменной можно свести к *гипергеометрическому уравнению*

$$z(1-z)y'' + [\gamma-(\alpha+\beta+1)z]y' - \alpha\beta y = 0, \tag{28}$$

*вырожденному гипергеометрическому уравнению*

$$zy'' + (\gamma - z)y' - \alpha y = 0 \tag{29}$$

или к *уравнению Эрмита*

$$y'' - 2zy' + 2\nu y = 0. \tag{30}$$

Частные решения этих уравнений можно построить с помощью теоремы 1. Для уравнения (28) имеем $\sigma(z) = z(1-z)$, $\rho(z) = z^{\gamma-1}\times$ $\times(1-z)^{\alpha+\beta-\gamma}$, $\nu = -\alpha$ (или $\nu = -\beta$); для уравнения (29): $\sigma(z) = z$, $\rho(z) = z^{\gamma-1}e^{-z}$, $\nu = -\alpha$; для (30): $\sigma(z) = 1$, $\rho(z) = e^{-z^2}$. В случаях (28) и (29) условиям теоремы 1 можно удовлетворить при определенных ограничениях на параметры $\alpha$, $\beta$, $\gamma$ и переменную z, если выбрать в качестве контура C отрезок, соединяющий точки $s_1 = 0$ и $s_2 = z$, т.е. полагая $s = zt$, $0 \leqslant t < 1$. Такой выбор контура приводит к следующим частным решениям для уравнений (28) и (29) [16]

$$y(z) = F(\alpha, \beta, \gamma, z) = \tag{31a}$$

$$= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}(1-zt)^{-\beta} dt, \quad (31a)$$

$$y(z) = F(\alpha, \gamma, z) =$$

$$= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1} e^{zt} dt. \quad (31б)$$

Функции $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ и $F(\alpha, \gamma, z)$ называют *гипергеометрической* и *вырожденной геометрической функцией* соответственно. Эти функции были определены при некоторых ограничениях на переменную и параметры, чтобы выполнялись условия теоремы 1. Интегральные представления (31а) и (31б) позволяют аналитически продолжить функции $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ и $F(\alpha, \gamma, z)$ в более широкую область.

Использование контура $s = z + t$, $0 \leqslant t < \infty$ для уравнений (29) и (30) приводит к *вырожденной гипергеометрической функции второго рода* $G(\alpha, \gamma, z)$ и к *функции Эрмита* $H_\nu(z)$:

$$G(\alpha, \gamma, z) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty e^{-zt} t^{\alpha-1}(1+t)^{\gamma-\alpha-1} dt,$$

$$H_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(-\nu)} \int_0^\infty e^{-t^2-2zt} t^{-\nu-1} dt.$$

Перечисленные интегральные представления дают возможность получить разложения в степенные ряды, асимптотические представления, рекуррентные и функциональные соотношения для рассмотренных функций гипергеометрического типа [16]. Более специальную информацию о свойствах этих функций можно найти в [1, 3, 7, 28].

Аналогичным образом, опираясь на теорему 1, можно изучить другие специальные функции гипергеометрического типа, например функции второго рода, функцию Эйри, функции Уитткера и т.д.

## 2. КЛАССИЧЕСКИЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПОЛИНОМЫ ДИСКРЕТНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Специальные функции математической физики изучались выше как решение дифференциального уравнения (1). На практике для численного интегрирования дифференциальных уравнений с помощью ЭВМ широко используется метод конечных разностей [18]. В связи с этим можно аппроксимировать исходное дифференциальное уравнение для специальных функций некоторым разностным уравнением и попытаться построить его точные решения. Этот путь приводит к новым специальным функциям, которые естественно назвать *разностными аналогами специальных функций математической физики*. Данные функции играют важную роль в тех случаях, когда при построении математической модели реального физического явления с необходимостью возникают разностные уравнения и требуется получить их точные решения.

Самыми простыми среди отмеченных обобщений специальных функций математической физики являются *классические ортогональные полиномы дискретной переменной* — разностные аналоги классических ортогональных полиномов на равномерных и неравномерных сетках. Этот класс специальных функций нашел применение в теоретической и математической физике, теории представлений групп, комбинаторике, теории кодирования, вычислительной математике и технике. Достаточно упомянуть, например, что через полиномы такого рода можно выразить коэффициенты Клебша — Гордана и коэффициенты Рака, которые широко используются в квантово-механических расчетах.

Хотя изучение классических ортогональных полиномов дискретной переменной началось еще в середине прошлого века [29], в литературе до последнего времени отсутствовало систематическое изложение их теории. Ниже, следуя [13], в компактной форме рассмотрены основные свойства названных полиномов.

**2.1. Разностные аналоги полиномов гипергеометрического типа.** Аппроксимируя производные $y'$ и $y''$ разностными отношениями второго порядка точности, перейдем от дифференциального уравнения (7) к разностному уравнению*)

---

*) Так как в дальнейшем независимая переменная принимает вещественные значения, обозначим ее через x. Кроме того, в этом подразделе удобно обозначить коэффициенты уравнения (7) через $\tilde{\sigma}(x)$ и $\tilde{\tau}(x)$.

$$\frac{\tilde{\sigma}(x)}{h}\left[\frac{y(x+h)-y(x)}{h}-\frac{y(x)-y(x-h)}{h}\right]+$$
$$+\frac{\tilde{\tau}(x)}{2}\left[\frac{y(x+h)-y(x)}{h}+\frac{y(x)-y(x-h)}{h}\right]+\lambda y(x)=0. \quad (32)$$

Линейной заменой независимой переменной $x \to hx$ уравнение (32) можно привести к виду

$$\tilde{\sigma}(x)\Delta\nabla y+\frac{1}{2}\tilde{\tau}(x)(\Delta+\nabla)y+\lambda y=0, \quad (33)$$

где

$$\Delta y(x)=y(x+1)-y(x), \quad \nabla y(x)=y(x)-y(x-1).$$

Так как $\Delta+\nabla=2\Delta-\Delta\nabla$, то (33) эквивалентно уравнению

$$\sigma(x)\Delta\nabla y+\tau(x)\Delta y+\lambda y=0, \quad (34)$$

где

$$\sigma(x)=\tilde{\sigma}(x)-\frac{1}{2}\tilde{\tau}(x), \quad \tau(x)=\tilde{\tau}(x)$$

– полиномы не выше второй и первой степени соответственно. Уравнение (34) будем называть *разностным уравнением гипергеометрического типа.*

Полиномиальные решения уравнения (34) можно построить по той же логической схеме, что и для классических ортогональных полиномов (см. подразд. 1.2). Для решений $y=y(x)$ разностного уравнения гипергеометрического типа (34) справедливо простое свойство: *функции* $v_n(x)=\Delta^n y(x)$ *удовлетворяют уравнению того же типа.*

Действительно, последовательное разностное дифференцирование (34) приводит к уравнению

$$\sigma(x)\Delta\nabla v_n+\tau_n(x)\Delta v_n+\mu_n v_n=0, \quad (35)$$

где $\tau_n(x)=\tau_{n-1}(x)+\Delta\sigma(x), \quad \tau_0(x)=\tau(x), \quad (36)$

$$\mu_n = \mu_{n-1} + \Delta\tau'_{n-1}(x), \quad \mu_0 = \lambda. \tag{36}$$

Отсюда видно, что коэффициенты данного уравнения $\sigma(x)$, $\tau_n(x)$ и $\mu_n$ — полиномы не выше второй, первой и нулевой степени соответственно.

Справедливо и обратное утверждение: *любое решение уравнения* (35) *при* $\mu_k \neq 0$ $(k = 0, 1, \ldots, n-1)$ *можно представить в виде* $v_n(x) = \Delta^n y(x)$, *где* $y(x)$ *— некоторое решение уравнения* (34).

Рассмотренное свойство позволяет построить полиномиальные решения уравнения (34). При $\mu_n = 0$, что отвечает собственному значению

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

в уравнении (34), уравнение (35) имеет частное решение $v_n(x) = \text{const}$. Так как $v_n(x) = \Delta^n y(x)$, то это означает, что при $\lambda = \lambda_n$ частным решением уравнения (34) будет полином $y = y_n(x)$ степени n относительно переменной x.

Чтобы получить явное выражение для полинома $y = y_n(x)$, запишем уравнения (34) и (35) в самосопряженном виде

$$\Delta(\sigma\rho\nabla y) + \lambda\rho y = 0, \tag{37}$$

$$\Delta(\sigma\rho_k\nabla v_k) + \mu_k\rho_k v_k = 0 \quad (k = 1, 2, \ldots, n), \tag{38}$$

где $\rho(x)$ и $\rho_k(x)$ — функции, которые удовлетворяют разностным уравнениям

$$\Delta(\sigma\rho) = \tau\rho, \quad \Delta(\sigma\rho_k) = \tau_k\rho_k. \tag{39}$$

Из формул (36) и (39) нетрудно установить связь между $\rho_k(x)$ и $\rho(x)$:

$$\rho_k(x) = \rho(x+k)\prod_{i=1}^{k}\sigma(x+i). \tag{40}$$

В результате уравнение (35) можно переписать в виде простого соотношения между функциями $v_k(x)$ и $v_{k+1}(x)$:

$$\rho_k(x) v_k(x) = -\frac{1}{\mu_k} \nabla \left[\rho_{k+1}(x) v_{k+1}(x)\right].$$

Используя данное соотношение при $k = 0, 1, \ldots, n-1$, получим

$$\rho y = -\frac{1}{\mu_0} \nabla(\rho_1 v_1) = \left(-\frac{1}{\mu_0}\right)\left(-\frac{1}{\mu_1}\right) \nabla^2(\rho_2 v_2) = $$

$$= \frac{1}{A_n} \nabla^n(\rho_n v_n),$$

где

$$A_n = A_n(\lambda) = (-1)^n \prod_{k=0}^{n-1} \mu_k, \quad A_0 = 1.$$

Полагая $v_n(x) = \text{const}$, при $\lambda = \lambda_n$ находим

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)} \nabla^n \left[\rho_n(x)\right], \tag{41}$$

где $B_n = (1/A_n)\Delta^n y_n(x)$ — постоянная.

Итак, полиномиальные решения уравнения (34), соответствующие собственным значениям (21), можно найти по формуле (41), которая является *разностным аналогом формулы Родрига* (20) для классических ортогональных полиномов.

Для полиномиальных решений (41) имеет место *свойство ортогональности*. Для доказательства запишем уравнения для полиномов $y_m(x)$ и $y_n(x)$ в самосопряженном виде

$$\Delta(\sigma\rho \nabla y_m) + \lambda_m \rho y_m = 0,$$

$$\Delta(\sigma\rho \nabla y_n) + \lambda_n \rho y_n = 0.$$

Умножим первое уравнение на $y_n$, второе на $y_m$ и вычтем из первого равенства второе. В результате получим

$$(\lambda_m - \lambda_n)\rho y_m y_n = \Delta\left[\sigma\rho(y_m \nabla y_n - y_n \nabla y_m)\right].$$

Если положить здесь $x = x_i$, $x_{i+1} = x_i + 1$ и просуммировать по тем значениям индекса $i$, для которых $a \leqslant x_i \leqslant b - 1$, то придем к равенству

$$(\lambda_m - \lambda_n)\sum_i y_m(x_i) y_n(x_i) \rho(x_i) = \left\{\sigma(x)\rho(x)\left[y_m(x)\nabla y_n(x) - y_n(x)\nabla y_m(x)\right]\right\}\Big|_a^b$$

Отсюда следует, что *при выполнении граничного условия* (26) *полиномиальные решения уравнения* (34) *будут ортогональны на отрезке* $[a, b-1]$ *с весом* $\rho(x)$*:*

$$\sum_{x_i=a}^{b-1} y_m(x_i)\, y_n(x_i)\, \rho(x_i) = d_n^2\, \delta_{mn}\,. \qquad (42)$$

Чтобы найти явные выражения для веса $\rho(x)$, с которым ортогональны полиномы (41), перепишем первое из уравнений (39) в виде

$$\frac{\rho(x+1)}{\rho(x)} = \frac{\sigma(x)+\tau(x)}{\sigma(x+1)}\,.$$

В зависимости от степеней полиномов $\sigma(x)$ и $\sigma(x)+\tau(x)$ решение этого уравнения приводит к *полиномам Хана* $h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$, *Мейкснера* $m_n^{(\gamma,\mu)}(x)$, *Кравчука* $k_n^{(p)}(x, N)$ и *Шарлье* $c_n^{(\mu)}(x)$ (табл. 1), которые называют *классическими ортогональными полиномами дискретной переменной*. Более подробные сведения об их свойствах можно найти в [3, 13, 16, 19, 33].

В излагаемую схему можно включить еще некоторые семейства ортогональных полиномов. Если при помощи теоремы Коши сумму в соотношении ортогональности (42) записать в виде контурного интеграла, а затем распрямить контур в комплексной плоскости, то в некоторых случаях после аналитического продолжения по параметру на прямой, параллельной мнимой оси, возникает вещественная система полиномов, ортогональных относительно непрерывной меры. Эти полиномы естественно назвать *классическими ортогональными полиномами дискретной переменной от мнимого аргумента*. Например, в результате аналитического продолжения полиномов Мейкснера можно получить *полиномы Поллачека* [2, 26]. В случае полиномов Хана приходим к непрерывному свойству ортогональности для *полиномов Хана от мнимого аргумента* [26].

Замечание. В подразд. 1.3 была доказана теорема 1, с помощью которой строились семейства частных решений для дифференциального уравнения гипергеометрического типа (7) при произвольных значениях $\lambda$. Оказывается, что аналогичная теорема имеет место и для разностного уравнения гипергеометрического типа (34).

Таблица 1. **Основные характеристики полиномов Хана, Мейкснера, Кравчука и Шарлье**

| $y_n(x)$ | $h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$ | $m_n^{(\gamma,\mu)}(x)$ | $k_n^{(p)}(x, N)$ | $c_n^{(\mu)}(x)$ |
|---|---|---|---|---|
| $(a, b)$ | $(0, N)$ | $(0, \infty)$ | $(0, N+1)$ | $(0, \infty)$ |
| $\rho(x)$ | $\dfrac{\Gamma(\alpha+N-x)\Gamma(\beta+x+1)}{\Gamma(N-x)\Gamma(x+1)}$ $(\alpha, \beta > -1)$ | $\dfrac{\mu^x\Gamma(\gamma+x)}{\Gamma(x+1)\Gamma(\gamma)}$ $(\gamma > 0, 0 < \mu < 1)$ | $\dfrac{N!p^xq^{N-x}}{\Gamma(x+1)\Gamma(N-x+1)}$ $(p > 0, q > 0, p+q=1)$ | $\dfrac{e^{-\mu}\mu^x}{\Gamma(x+1)}$ $(\mu > 0)$ |
| $\sigma(x)$ | $x(\alpha+N-x)$ | $x$ | $x$ | $x$ |
| $\tau(x)$ | $(\beta+1)(N-1)-(\alpha+\beta+2)x$ | $\gamma\mu-(1-\mu)x$ | $\dfrac{1}{q}(pN-x)$ | $\mu-x$ |
| $\lambda_n$ | $n(\alpha+\beta+n+1)$ | $n(1-\mu)$ | $n/q$ | $n$ |
| $B_n$ | $(-1)^n/n!$ | $\mu^{-n}$ | $\dfrac{(-1)^n}{n!}q^n$ | $\mu^{-n}$ |
| $d_n^2$ | $\dfrac{\Gamma(\alpha+n+1)\Gamma(\beta+n+1)\Gamma(\alpha+\beta+n+N+1)}{(\alpha+\beta+2n+1)n!\Gamma(\alpha+\beta+n+1)(N-n-1)!}$ | $\dfrac{n!(\gamma)_n}{\mu^n(1-\mu)^\gamma}$ | $\dfrac{N!(pq)^n}{n!(N-n)!}$ | $n!/\mu^n$ |

**Теорема 2.** *Разностное уравнение гипергеометрического типа (34) имеет частные решения вида*

$$y = y_\nu(x) = \frac{C_\nu}{\rho(x)} \sum_{s=a}^{b-1} \frac{\rho_\nu(s)}{(s-x)_{\nu+1}}, \tag{34а}$$

*а также вида*

$$y = y_\nu(x) = \frac{C_\nu}{\rho(x)} \int_C \frac{\rho_\nu(s)}{(s-x)_{\nu+1}} ds, \tag{34б}$$

*где* $(w)_a = \Gamma(w+a)/\Gamma(w)$; $C$ – *контур в комплексной s-плоскости;* $C_\nu$ – *постоянная, если:*

1) *функции* $\rho(z)$ *и* $\rho_\nu(z)$ *удовлетворяют уравнениям*

$$\Delta(\sigma\rho) = \tau\rho, \quad \Delta(\sigma\rho_\nu) = \tau_\nu\rho_\nu,$$

*где*

$$\tau_\nu = \tau_\nu(x) = \sigma(x+\nu) - \sigma(x) + \tau(x+\nu),$$

$\nu$ – *корень уравнения*

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

2) *справедливы равенства*

$$\left. \frac{\sigma(s)\rho_\nu(s)}{(s-x-1)_{\nu+2}} \right|_a^b = 0$$

*в случае* (34а),

$$\int_C \frac{\sigma(s+1)\rho_\nu(s+1)}{(s-x)_{\nu+2}} ds = \int_C \frac{\sigma(s)\rho_\nu(s)}{(s-x-1)_{\nu+2}} ds$$

*в случае* (34б).

С помощью теоремы 2 можно построить, например, при $\lambda = \lambda_n$ функции второго рода дискретной переменной, а при произвольных $\lambda$ – разностные функции гипергеометрического типа.

**2.2. Разностные аналоги полиномов гипергеометрического типа на неравномерных сетках.** Разностное уравнение (32) аппроксимирует дифференциальное уравнение гипергеометрического типа (7) на сетке с постоянным шагом. Перейдем к неравномерным сеткам. Рассмотрим следующее обобщение уравнения (32) на случай сетки $x = x(s)$ с переменным шагом $\Delta x(s) = x(s+h) - x(s)$:

$$\frac{\tilde{\sigma}[x(s)]}{x(s+h/2)-x(s-h/2)}\left[\frac{y(s+h)-y(s)}{x(s+h)-x(s)}-\frac{y(s)-y(s-h)}{x(s)-x(s-h)}\right]+$$
$$+\frac{\tilde{\tau}[x(s)]}{2}\left[\frac{y(s+h)-y(s)}{x(s+h)-x(s)}+\frac{y(s)-y(s-h)}{x(s)-x(s-h)}\right]+\lambda y(s)=0. \tag{43}$$

Здесь $\tilde{\sigma}(x)$ и $\tilde{\tau}(x)$ — некоторые полиномы не выше второй и первой степени относительно переменной $x$; $\lambda$ — постоянная. Линейной заменой независимой переменной $s \to hs$ в (43) всегда можно добиться, чтобы $\Delta s = h = 1$:

$$\tilde{\sigma}[x(s)]\frac{\Delta}{\Delta x(s-1/2)}\left[\frac{\nabla y(s)}{\nabla x(s)}\right]+$$
$$+\frac{\tilde{\tau}[x(s)]}{2}\left[\frac{\Delta y(s)}{\Delta x(s)}+\frac{\nabla y(s)}{\nabla x(s)}\right]+\lambda y(s)=0. \tag{44}$$

Последнее уравнение перепишем в виде

$$\sigma(s)\frac{\Delta}{\Delta x(s-1/2)}\left[\frac{\nabla y(s)}{\nabla x(s)}\right]+\tau(s)\frac{\Delta y(s)}{\Delta x(s)}+\lambda y(s)=0, \tag{45}$$

где

$$\sigma(s)=\tilde{\sigma}[x(s)]-\frac{1}{2}\tilde{\tau}[x(s)]\,\Delta x(s-1/2),$$
$$\tau(s)=\tilde{\tau}[x(s)].$$

Оказывается, что если $x = x(s)$ — полином второй степени относительно переменной $s$, то решения уравнения (44) обладают следующим простым свойством, аналогичным свойству решений уравнения (33): *пусть* $y(s)$ *— решение уравнения* (44), *тогда функция* $v_1(s) = \Delta y(s)/\Delta x(s)$ *удовлетворяет уравнению вида* (44) *по переменной* $x_1(s) = x(s+1/2)$:

$$\tilde{\sigma}_1[x_1(s)]\frac{\Delta}{\Delta x_1(s-1/2)}\left[\frac{\nabla v_1(s)}{\nabla x_1(s)}\right]+$$

$$+\frac{\tilde{\tau}_1[x_1(s)]}{2}\left[\frac{\Delta v_1(s)}{\Delta x_1(s)}+\frac{\nabla v_1(s)}{\nabla x_1(s)}\right]+\mu_1 v_1(s)=0.$$

Здесь

$$\tilde{\sigma}_1[x_1(s)]=\frac{\tilde{\sigma}[x(s+1)]+\tilde{\sigma}[x(s)]}{2}+\frac{\tilde{\tau}[x(s+1)]+\tilde{\tau}[x(s)]}{8}x''+$$

$$+\frac{1}{4}\frac{\Delta\tilde{\tau}[x(s)]}{\Delta x(s)}[\Delta x(s)]^2,$$

$$\tilde{\tau}_1[x_1(s)]=\frac{\Delta\tilde{\sigma}[x(s)]}{\Delta x(s)}+\frac{\tilde{\tau}[x(s+1)]+\tilde{\tau}[x(s)]}{2}+\frac{x''}{4}\frac{\Delta\tilde{\tau}[x(s)]}{\Delta x(s)};$$

$\tilde{\sigma}_1(x_1)$ и $\tilde{\tau}_1(x_1)$ – полиномы не выше второй и первой степени относительно переменной $x_1$: $\mu_1 = \lambda + d\tilde{\tau}(x)/dx$ – постоянная.

Далее по индукции можно получить, что функции

$$v_k(s)=\frac{\Delta v_{k-1}(s)}{\Delta x_{k-1}(s)}\qquad (k=1,2,\ldots),$$

где $x_k(s) = x(s + k/2)$, $v_0(s) = y(s)$ удовлетворяют уравнению

$$\tilde{\sigma}_k[x_k(s)]\frac{\Delta}{\Delta x_k(s-1/2)}\left[\frac{\nabla v_k(s)}{\nabla x_k(s)}\right]+$$

$$+\frac{\tilde{\tau}_k[x_k(s)]}{2}\left[\frac{\Delta v_k(s)}{\Delta x_k(s)}+\frac{\nabla v_k(s)}{\nabla x_k(s)}\right]+\mu_k v_k(s)=0,$$

где $\tilde{\sigma}_k(x_k)$ и $\tilde{\tau}_k(x_k)$ – некоторые полиномы не выше второй и первой степени от аргумента $x_k$ соответственно; $\mu_k$ – постоянная.

С помощью рассмотренного свойства нетрудно показать, что при $\mu_n = 0$, т.е. когда

$$\lambda=\lambda_n=-n\frac{d\tilde{\tau}(x)}{dx}-\frac{n(n-1)}{2}\frac{d^2\tilde{\sigma}(x)}{dx^2}\quad (n=0,1,\ldots),$$

частным решением уравнения (44) будет полином $y(s) = y_n[x(s)]$ степени $n$ от аргумента $x(s)$, который можно записать в виде следующего *аналога формулы Родрига* [11, 23]:

$$y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(s)} D^{(n)}[\rho_n(s)], \quad x = x(s). \tag{46}$$

Здесь $B_n$ — постоянная; функция $\rho(s)$ — решение уравнения

$$\frac{\Delta}{\Delta x(s-1/2)}[\sigma(s)\rho(s)] = \tau(s)\rho(s); \tag{47}$$

функция $\rho_n(s)$ определена равенством (40); символом $D^{(n)}$ обозначен разностный оператор:

$$D^{(n)} = \left(\frac{\nabla}{\nabla x_1}\right)\left(\frac{\nabla}{\nabla x_2}\right)\cdots\left(\frac{\nabla}{\nabla x_n}\right), \quad x_k = x(s+k/2), \quad k = 1, \ldots, n.$$

При выполнении граничного условия (26) *полиномы* $y_n(x)$, когда $x = x(s)$ — квадратный трехчлен, будут *ортогональны с весом* $\rho(s)$ *на сетке с переменным шагом* $\Delta x(s)$ в следующем смысле:

$$\sum_{s_i=a}^{b-1} y_m(x_i) y_n(x_i) \rho_i \Delta x_{i-1/2} = d_n^2 \delta_{mn}, \tag{48}$$

где

$$x_i = x(s_i), \quad \rho_i = \rho(x_i), \quad \Delta x_{i-1/2} = \Delta x(s_i - 1/2).$$

Линейные преобразования $x(s) \to \alpha x(s) + \beta$, $s \to s + \gamma$ переводят уравнение (45) в уравнение того же типа. Так как при помощи таких преобразований любой полином второй степени можно привести к виду $x(s) = s(s+1)$, то достаточно ограничиться только этим случаем. Среди полиномиальных решений уравнения (45) отметим *полиномы Рака* $u_n^{(\alpha,\beta)}[x(s), a, b]$ и *дуальные полиномы Хана* $w_n^{(c)}[x(s), a, b]$, где $x(s) = s(s+1)$. Вес $\rho(s)$ и другие характеристики этих полиномов приведены в табл. 2.

Отметим, что полиномы Хана $h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$ и Рака $u_n^{(\alpha,\beta)}(x, a, b)$ являются разностными аналогами полиномов Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(s)$ на линейной и квадратичной сетках соответственно.

Таблица 2. Основные характеристики полиномов Рака и дуальных полиномов Хана

| $y_n(x)$ | $u_n^{(\alpha,\beta)}(x, a, b),\ x = x(s) = s(s+1)$ | $w_n^{(c)}(x, a, b),\ x = x(s) = s(s+1)$ |
|---|---|---|
| $(a, b)$ | $(a, b)$ | $(a, b)$ |
| $\rho(s)$ | $\dfrac{\Gamma(a+s+1)\Gamma(s-a+\beta+1)\Gamma(b+\alpha-s)\Gamma(b+\alpha+s+1)}{\Gamma(a-\beta+s+1)\Gamma(s-a+1)\Gamma(b-s)\Gamma(b+s+1)}$ <br> $(-1/2 < a \leqslant b-1,\ \alpha > -1,\ -1 < \beta < 2a+1)$ | $\dfrac{\Gamma(a+s+1)\Gamma(c+s+1)}{\Gamma(s-a+1)\Gamma(b-s)\Gamma(b+s+1)\Gamma(s-c+1)}$ <br> $(-1/2 < a \leqslant b-1,\ \lvert c\rvert < a+1)$ |
| $\sigma(s)$ | $(s-a)(s+b)(s+a-\beta)(b+\alpha-s)$ | $(s-a)(s+b)(s-c)$ |
| $\tau(s)$ | $(\alpha+1)a(a-\beta)+(\beta+1)b(b+\alpha)-(\alpha+1)(\beta+1)-(\alpha+\beta+2)s(s+1)$ | $ab-ac+bc-a+b-c-1-s(s+1)$ |
| $\lambda_n$ | $n(\alpha+\beta+n+1)$ | $n$ |
| $B_n$ | $(-1)^n/n!$ | $(-1)^n/n!$ |
| $d_n^2$ | $\dfrac{\Gamma(\alpha+n+1)\Gamma(\beta+n+1)\Gamma(b-a+\alpha+\beta+n+1)\Gamma(a+b+\alpha+n+1)}{(\alpha+\beta+2n+1)n!\,\Gamma(\alpha+\beta+n+1)(b-a-n-1)!\,\Gamma(a+b-\beta-n)}$ | $\dfrac{\Gamma(a+c+n+1)}{n!\,(b-a-n-1)!\,\Gamma(b-c-n)}$ |

Можно показать, что *разностное дифференцирование уравнения* (44) *на неравномерной сетке будет приводить к уравнению того же типа для следующих классов сеток* [15]:

$$x(s) = \begin{cases} s, \\ s(s+1), \\ e^{\pm 2\gamma s}, \\ \operatorname{ch} 2\gamma s, \\ \operatorname{sh} 2\gamma s, \\ \cos 2\gamma s. \end{cases}$$

Во всех этих случаях полиномиальные решения уравнения (44) можно изучить с единой точки зрения, сохраняя неизменными все ключевые моменты проведенных выше рассуждений. При этом выводится аналог формулы Родрига (46), доказывается свойство ортогональности (48) и т.д.

Уравнение (44) будем называть *разностным уравнением гипергеометрического типа на неравномерных сетках*, а его полиномиальные решения — *классическими ортогональными полиномами дискретной переменной на неравномерных сетках*. Частными случаями этих полиномов, кроме перечисленных в табл. 1 и 2, оказываются также полиномы, введенные в работах [31, 32, 37] при помощи различных специальных соображений.

Более подробно классические ортогональные полиномы дискретной переменной на неравномерных сетках изучены в [13].

## 3. КЛАССИЧЕСКИЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПОЛИНОМЫ ДИСКРЕТНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ

Представления трехмерной группы вращений тесно связаны со многими математическими дисциплинами и имеют широкую область физических приложений. Достаточно назвать теорию момента количества движения в квантовой механике, задачи атомной и ядерной спектроскопии, теорию излучения, расчеты различных распадов, химических и ядерных реакций и т.д. Поэтому основные величины теории представлений группы вращений — *обобщенные сферические функции, коэффициенты Клебша — Гордана, 6j-символы Вигнера* и пропорциональные им *коэффициенты Рака* рассмотрены во многих обзорах и монографиях (см., например, [4, 5, 7, 8, 22, 30]). Однако оказалось пропущенным то важное обстоятельство, что все указанные величины можно отождествить с классическими ортогональными полиномами дискретной переменной.

Прежде всего здесь необходимо отметить связь обобщенных сферических функций — матричных элементов неприводимого представления трехмерной группы вращений SO(3) — *с полиномами Кравчука*. Следующие из названных нами функций — коэффициенты Клебша — Гордана, которые осуществляют разложение тензорного произведения двух неприводимых представлений группы SO(3) на неприводимые компоненты, — можно выразить через *полиномы Хана*. В свою очередь, 6j-символы Вигнера, возникающие при разложении тензорного произведения трех неприводимых представлений группы SO(3), с точностью до нормировки совпадают с *полиномами Рака*. Таким образом, коэффициенты Клебша — Гордана и 6j-символы Вигнера нашли свое место в теории специальных функций в качестве дискретных аналогов полиномов Якоби на линейной и квадратичной сетках соответственно.

**3.1. Обобщенные сферические функции. Их связь с полиномами Якоби и Кравчука.** Пусть $\Psi_{jm}$ — базис унитарного неприводимого представления $D^j$ группы вращений SO(3), например, волновая функция квантовой системы с моментом $j$ и его проекцией $m$ на ось $z$. При повороте системы координат, заданном углами Эйлера $\alpha$, $\beta$, $\gamma$, базис $\Psi_{jm}$ переходит в новый базис $\Psi'_{jm'}$:

$$\Psi'_{jm'} = \sum_{m} D^{j}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)\, \Psi_{jm},$$

где

$$D^{j}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-im\alpha}\, d^{j}_{mm'}(\beta)\, e^{-im'\gamma} \tag{49}$$

— *обобщенные сферические функции* [5].

Функции $d^j_{mm'}(\beta)$ — матричные элементы поворота на угол $\beta$ в плоскости (x, z) — можно выразить через *полиномы Якоби* [5, 8]:

$$(-1)^{m-m'}\sqrt{\frac{2j+1}{2}}\, d^j_{mm'}(\beta) = \frac{\sqrt{\rho(s)}}{d_{j-m}}\, P^{(m-m', m+m')}_{j-m}(s), \quad s = \cos\beta, \tag{50}$$

где $\rho(s)$ и $d_n$ — вес и норма полиномов Якоби. Поэтому ортогональность d-функций на группе вращений

$$\int d^j_{mm'}(\beta)\, d^{j'}_{mm'}(\beta)\, d\cos\beta = \frac{2}{2j+1}\,\delta_{jj'}$$

эквивалентна свойству ортогональности полиномов Якоби.

Кроме того, в силу унитарности неприводимых представлений группы вращений для функций $d^j_{mm'}(\beta)$ справедливо свойство ортогональности по дискретной переменной $m'$:

$$\sum_{m'} d^j_{mm'}(\beta)\, d^j_{m''m'}(\beta) = \delta_{mm''}.$$

Это равенство приводит к выражению d-функций через *полиномы Кравчука* [34]:

$$(-1)^{m-m'} d^j_{mm'}(\beta) = \frac{\sqrt{\rho(x)}}{d_n}\, k^{(p)}_n(x, N), \tag{51}$$

где $n = j - m$, $x = j - m'$, $N = 2j$, $p = \sin^2(\beta/2)$; $\rho(x)$ и $d_n$ — вес и норма полиномов Кравчука $k^{(p)}_n(x, N)$ (см. табл. 1).

Формулы (49) — (51) дают возможность в компактной форме изложить основные свойства обобщенных сферических функций [13].

**3.2. Коэффициенты Клебша — Гордана и полиномы Хана.** В квантовой теории момента количества движения центральное место занимает задача о сложении двух моментов $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, которая с математической точки зрения состоит в разложении тензорного произведения двух неприводимых представлений группы вращений $D^{j_1} \otimes D^{j_2}$ на неприводимые компоненты $D^j$. Собственную функцию $\Psi_{jm}$ полного момента $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ строят при помощи *коэффициентов Клебша — Гордана* (ККГ):

$$\Psi_{jm} = \sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}.$$

Эти коэффициенты широко используются в квантово-механических расчетах.

Коэффициенты Клебша – Гордана можно выразить через *полиномы Хана* $h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$ [10, 20, 35]*):

$$(-1)^{j_1-m_1} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle = \frac{\sqrt{\rho(x)}}{d_n} h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N). \quad (52)$$

Здесь $\rho(x)$ и $d_n$ – вес и норма полиномов $h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$ (см. табл. 1); $n = j - m$, $x = j_2 - m_2$, $N = j_1 + j_2 - m + 1$, $\alpha = m - m'$, $\beta = m + m'$, $m' = j_1 - j_2$.

Согласно формуле (52), соотношение ортогональности ККГ

$$\sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j' m \rangle = \delta_{jj'}$$

соответствует свойству ортогональности полиномов Хана (42). Так как ККГ образуют ортогональную матрицу, то для них справедливо второе свойство ортогональности:

$$\sum_{j} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}.$$

Это равенство приводит к связи ККГ с *дуальными полиномами Хана* $w_k^{(c)}(x, a, b)$:

$$(-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle = \frac{\sqrt{\rho(s)(2s+1)}}{d_k} w_k^{(c)}[x(s), a, b]. \quad (53)$$

Здесь $\rho(s)$ и $d_k$ – вес и квадрат нормы полиномов $w_k^{(c)}(x, a, b)$ (см. табл. 2); $k = j_2 - m_2$, $x(s) = s(s+1)$, $s = j$, $a = m$, $b = j_1 + j_2 + 1$, $c = m' = j_1 - j_2$.

---

*) Формула (52) объясняет аналогию между ККГ и полиномами Якоби, замеченную в [8] (см. [7, 17]). Частный случай формулы (52) рассматривался в [9, 36].

Изучение свойств ККГ на основе формул (52) и (53) см. в [13].

**3.3. 6j-символы Вигнера и полиномы Рака.** В атомной и ядерной спектроскопии и в других физических приложениях наряду с коэффициентами Клебша – Гордана широко используются также 6j-символы Вигнера и пропорциональные им коэффициенты Рака. Данные величины возникают при разложении тензорного произведения трех неприводимых представлений группы вращений $D^{j_1}\otimes D^{j_2}\otimes D^{j_3}$ на неприводимые компоненты $D^j$ или, что то же самое, при сложении трех моментов $\vec{J}_1$, $\vec{J}_2$, $\vec{J}_3$ в квантовой механике. Полный момент $\vec{J}$ можно получить по крайней мере двумя способами:

$$\vec{J}_1+\vec{J}_2=\vec{J}_{12}, \quad \vec{J}_{12}+\vec{J}_3=\vec{J} \tag{54}$$

или

$$\vec{J}_2+\vec{J}_3=\vec{J}_{23}, \quad \vec{J}_1+\vec{J}_{23}=\vec{J}. \tag{55}$$

Преобразование между собственными функциями полного момента $\Psi_{jm}^{j_{12}}$ и $\Psi_{jm}^{j_{23}}$, соответствующими схемам связи (54) и (55), осуществляется при помощи унитарной матрицы $U(j_{12}, j_{23})$:

$$\Psi_{jm}^{j_{23}} = \sum_{j_{12}} U(j_{12}, j_{23})\, \Psi_{jm}^{j_{12}}.$$

Эта матрица пропорциональна *6j-символу Вигнера*:

$$U(j_{12}, j_{23}) = (-1)^{j_1+j_2+j_3+j}\sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}.$$

Как уже отмечалось выше, 6j-символы Вигнера можно выразить через *полиномы Рака* $u_n^{(\alpha,\beta)}(x, a, b)$. Согласно [12, 21, 37], имеем

$$\frac{(-1)^{j_1+j+j_{23}}}{\sqrt{2j_{12}+1}}\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} = \frac{\sqrt{\rho(s)}}{d_n}\, u_n^{(\alpha,\beta)}[x(s), a, b] \tag{56}$$

$$(j_1-j_2 \geq |j_3-j|, \quad j_3-j_2 \geq |j_1-j|),$$

где $\rho(s)$ и $d_n$ — вес и норма полиномов $u_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ (см. табл. 2); $n = j_{12} - j_1 + j_2$, $x(s) = s(s + 1)$, $s = j_{23}$, $a = j_3 - j_2$, $b = j_2 + j_3 + 1$, $\alpha = j_1 - j_2 - j_3 + j$, $\beta = j_1 - j_2 + j_3 - j$.

Полиномы Хана $h_n^{(\alpha,\beta)}(x, N)$ и полиномы Рака $u_n^{(\alpha,\beta)}(x, a, b)$ — разностные аналоги полиномов Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(s)$ на линейной и квадратичной сетках соответственно. Поэтому, согласно формулам (50), (52) и (56), ККГ и 6j-символы оказываются разностными аналогами d-функций.

Мы показали, что коэффициенты Клебша — Гордана и 6j-символы Вигнера, возникающие при сложении двух и трех моментов, можно выразить соответственно через полиномы Хана и Рака. При сложении четырех моментов появляются 9j-символы (коэффициенты Фано), которые ортогональны уже по двум независимым дискретным переменным и в свою очередь тесно связаны с некоторой новой системой ортогональных полиномов от двух переменных [24].

Классические ортогональные полиномы дискретной переменной возникают также в некоторых задачах, родственных теории представлений трехмерной группы вращений. Например, при изучении представлений четырехмерной группы вращений SO(4), группы Лоренца SO(3,1) и группы SU(3) [13], в кулоновской задаче квантовой механики [27]; при решении многомерного уравнения Лапласа методом деревьев [13, 25].

## 4. СПЕЦИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Специальные функции математической физики широко используются в квантовой механике при изучении состояний дискретного и непрерывного спектров, описании процессов упругого и неупругого рассеяния, в теории излучения, при решении различных модельных задач и разработке приближенных методов.

**4.1. Общая схема решения задач на собственные значения, приводящих к уравнениям гипергеометрического типа.** Одна из основных задач нерелятивистской квантовой механики состоит в нахождении уровней энергии E и волновых функций $\psi = \psi(\vec{r})$ частицы, движение которой в поле с потенциалом $U = U(\vec{r})$ описывается *стационарным уравнением Шредингера*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \tag{57}$$

где $\Delta$ — оператор Лапласа; $\hbar$ — постоянная Планка; m — масса частицы. Если под действием сил частица не может уйти на бесконечность, то говорят о связанных состояниях частицы. При этом волновая функция $\psi(\vec{r})$ должна быть ограниченной и удовлетворять *условию нормировки*

$$\int_V |\psi(\vec{r})|^2 dV = 1.$$

Во многих случаях решение уравнения (57) методом разделения переменных приводит к обобщенным уравнениям гипергеометрического типа

$$u'' + \frac{\tilde{\tau}(x)}{\sigma(x)}u' + \frac{\tilde{\sigma}(x)}{\sigma^2(x)}u = 0, \tag{58}$$

где $\sigma(x)$ и $\tilde{\sigma}(x)$ — некоторые полиномы не выше второй степени; $\tilde{\tau}(x)$ — полином не выше первой степени.

Дифференциальные уравнения вида (58) возникают при изучении таких важных задач квантовой механики, как гармонический осциллятор, движение частицы в центрально-симметричном поле, решение уравнений Шредингера, Клейна — Гордона и Дирака для кулоновского потенциала, движение заряженной частицы в однородных электрических и магнитных полях, вращение симметричного волчка и т.д. Кроме того, к уравнению вида (58) приводят многочисленные модельные задачи атомной, молекулярной и ядерной физики, связанные с изучением процессов рассеяния, взаимодействия нейтронов с тяжелыми ядрами, анализом вращательно-колебательных спектров молекул*).

При нахождении уровней энергии E и волновых функций для перечисленных задач исходное уравнение приводится к уравнению (58) на некотором интервале $(a, b)$, причем энергия E входит в коэффициенты уравнения (58) как параметр. Для связанных состояний решения должны удовлетворять условиям нормировки, которые обыч-

---

*) См. Флюгге З. Задачи по квантовой механике, т. 1 и 2.–М.: Мир, 1974.

но эквивалентны следующим требованиям: *функция* $u(x)\sqrt{\tilde{\rho}(x)}$ *должна быть ограниченной и квадратично интегрируемой на интервале* $(a, b)$. Здесь $\tilde{\rho}(x)$ — решение уравнения $(\sigma\tilde{\rho})' = \tilde{\tau}\rho$, возникающего при приведении (58) к самосопряженному виду

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

Как было показано в разд. 1, уравнение (58) с помощью замены $u = \varphi y$ может быть приведено к уравнению гипергеометрического типа

$$(\sigma\rho y')' + \lambda\rho y = 0, \tag{59}$$

где $\lambda$ — постоянная; функция $\rho(x)$ удовлетворяет уравнению

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho, \quad \tau = \tilde{\tau} + 2\frac{\varphi'}{\varphi}\sigma.$$

Отсюда $\rho = \tilde{\rho}\varphi^2$, $u\sqrt{\tilde{\rho}} = y\sqrt{\rho}$ и, следовательно, сформулированные выше требования на функцию $u(x)$ переходят в аналогичные требования на $y(x)$.

Значения постоянной $\lambda$, при которых поставленная задача имеет нетривиальные решения, называют *собственными значениями*, а соответствующие решения $y = y(x, \lambda)$ — *собственными функциями*.

Простейшими решениями уравнения (59) при

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

являются *классические ортогональные полиномы* $y_n(x)$ (см. разд. 1). Эти решения ортогональны на интервале $(a, b)$ с весом $\rho(x)$, если выполнены условия

$$\sigma(x)\rho(x)x^k\Big|_{x=a,b} = 0 \quad (k = 0, 1, \ldots). \tag{60}$$

Оказывается, что среди всей совокупности решений уравнения (59), отвечающих произвольным значениям $\lambda$, классические ортогональные полиномы представляют собой единственно возможные нетривиальные решения, удовлетворяющие условиям *ограниченности и квадратичной интегрируемости* функции $y(x)\sqrt{\rho(x)}$ на интервале $(a, b)$. Справедлива следующая теорема [16].

**Теорема 3.** *Пусть функция $\rho(x)$ является ограниченным и положительным на интервале $(a, b)$ решением уравнения $(\sigma\rho)' = \tau\rho$, удовлетворяющим условию (60). Тогда нетривиальные решения $y = y(x)$ уравнения гипергеометрического типа (59), для которых функция $y(x)\sqrt{\rho(x)}$ ограничена и квадратично интегрируема на интервале $(a, b)$, существуют только при*

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{1}{2}n(n-1)\sigma'' \quad (n = 0, 1, \ldots) \tag{61}$$

*и имеют вид*

$$y(x, \lambda_n) = y_n(x) = \frac{B_n}{\rho(x)}\left[\sigma^n(x)\rho(x)\right]^{(n)}, \tag{62}$$

*т.е. совпадают с классическими ортогональными полиномами. (Если $a$ и $b$ — конечны, то требование квадратичной интегрируемости можно опустить.)*

С помощью формул (61) и (62) можно определить собственные значения энергии $E$ и волновые функции исходной задачи.

Замечание. Уравнение (58) с помощью замены $u = \varphi y$ можно привести к виду (59) или, что то же самое, к виду

$$\sigma(x)y'' + \tau(x)y' + \lambda y = 0 \tag{63}$$

несколькими способами (см. разд. 1). Функция $\varphi(x)$ — решение уравнения

$$\frac{\varphi'}{\varphi} = \frac{\pi(x)}{\sigma(x)}, \tag{64}$$

где

$$\pi(x) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma} \tag{65}$$

— полином не выше первой степени. Постоянная $k$ выбирается из условия, чтобы подкоренное выражение представляло собой квадрат полинома первой степени. В уравнении (63)

$$\tau(x) = \tilde{\tau}(x) + 2\pi(x), \quad \lambda = k + \pi'(x). \qquad (66)$$

Полином первой степени $\tau(x)$ в случае классических ортогональных полиномов обращается в нуль на интервале $(a, b)$ и имеет отрицательную производную $\tau' < 0$ (см. [16], с. 68). Поэтому постоянную k и знак перед корнем в (65) следует выбирать таким образом, чтобы функция $\tau(x) = \tilde{\tau}(x) + 2\pi(x)$ удовлетворяла перечисленным требованиям.

## 4.2. Примеры

**Гармонический осциллятор.** В случае одномерного гармонического осциллятора, т.е. частицы массы $m$, движущейся в поле с потенциальной энергией $U = m\omega^2 x^2/2$, уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi = E\psi \quad (-\infty < x < \infty),$$

где $x$ — отклонение от положения равновесия; $\omega$ — частота. Волновая функция $\psi(x)$ должна быть ограниченной и удовлетворять условию нормировки. После перехода к безразмерным переменным $x = \alpha\xi$, $\psi(x) = u(\xi)$, $E = \hbar\omega\varepsilon$, где $\alpha = (\hbar/m\omega)^{1/2}$, получим уравнение

$$u'' + (2\varepsilon - \xi^2)u = 0, \qquad (67)$$

которое является уравнением типа (58) при

$$\sigma(\xi) = 1, \quad \tilde{\tau}(\xi) = 0, \quad \tilde{\sigma}(\xi) = 2\varepsilon - \xi^2.$$

В данном случае $\tilde{\rho}(\xi) = 1$ и, следовательно, требование квадратичной интегрируемости функции $u(\xi)\sqrt{\tilde{\rho}(\xi)}$ вытекает из условия нормировки. Приведем (67) к виду (63), полагая $u = \varphi(\xi)y$. Согласно (65), имеем

$$\pi(\xi) = \pm\sqrt{k - 2\varepsilon + \xi^2}.$$

Подкоренное выражение должно быть полным квадратом, поэтому $k = 2\varepsilon$. Из двух возможных видов полинома $\pi(\xi) = \pm\xi$ выберем тот, для которого функция $\tau(\xi) = \tilde{\tau}(\xi) + 2\pi(\xi) = \pm 2\xi$ имеет отрицательную производную

$$\pi(\xi) = -\xi, \quad \tau(\xi) = -2\xi.$$

Из (64) и (66) находим $\varphi(\xi) = e^{-\xi^2/2}$, $\lambda = 2\epsilon - 1$. Уровни энергии определяются из условия (61), что дает

$$E = E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0, 1, \ldots).$$

Собственные функции $y_n(\xi)$ с точностью до множителя совпадают с полиномами Эрмита $H_n(\xi)$. Поэтому

$$\psi = \psi_n(x) = C_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi).$$

Постоянная $C_n$ находится из условия нормировки: $C_n = (2^n n! d\sqrt{\pi})^{-1/2}$.

Уравнение Шредингера для центрально-симметричного поля. Приближение центрального поля для атомных электронов лежит в основе расчетов различных свойств атомных структур. Это приближение позволяет понять особенности поведения атомов и найти их энергетические состояния, не решая чрезвычайно трудную квантово-механическую задачу многих тел. Уравнение (57) для частицы с массой $\mu$, движущейся в центрально-симметричном поле $U = U(r)$, будем решать методом разделения переменных в сферических координатах, полагая

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

Для функций $F(r)$ и $Y(\theta, \varphi)$ получим уравнения:

$$\Delta_{\theta\varphi} Y + \lambda Y = 0, \tag{68}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dF}{dr}\right) + \left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)] - \frac{\lambda}{r^2}\right\} F = 0, \tag{69}$$

где $\Delta_{\theta\varphi}$ — угловая часть лапласиана. Используя дальнейшее разделение переменных, с помощью теоремы 3 можно показать, что непрерывные и ограниченные на сфере единичного радиуса решения уравнения (68) существуют только при $\lambda = l(l+1)$ и совпадают со сферическими гармониками $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, $l = 0, 1, \ldots$; $m = -l, -l+1, \ldots, l$ (см., например, [16]).

Уравнение (69) при $R = rF$, $\lambda = l(l+1)$ принимает вид

$$R'' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - U(r)\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0. \tag{70}$$

Для связанных состояний функция $R(r)$ должна удовлетворять условию нормировки
$$\int_0^{\infty} R^2(r)\,dr = 1.$$

**Решение уравнения Шредингера для кулонова поля.** Задача об относительном движении электрона с массой $m_e$ и зарядом $-e$ и ядра массы $M$, заряда $Ze$, притягивающихся по закону Кулона, сводится к задаче о движении одной частицы с приведенной массой $\mu = m_e M/(M + m_e) \approx m_e$ в поле с потенциальной энергией $U(r) = -Ze^2/r$. Уравнение (70) удобно переписать в атомной системе единиц, где в качестве единиц заряда, длины и энергии используются величины $e$, $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$, $E_0 = e^2/a_0$. В результате получим

$$R'' + \left[2\left(E + \frac{Z}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0. \qquad (71)$$

Это уравнение принадлежит к типу (58). Его ограниченные, квадратично интегрируемые решения можно найти согласно схеме, рассмотренной в подразд. 4.1 (табл. 3). Собственные значения энергии равны

$$E = E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}, \qquad (72)$$

где $n = l + 1, l + 2, \ldots$ — главное квантовое число, связанное с входящим в (61) числом нулей $n_r$ собственной функции $y_{n_r}(r)$ соотношением $n = n_r + l + 1$. Радиальные функции имеют вид

$$R_{nl}(r) = C_{nl}\, x^{l+1} e^{-x/2} L^{2l+1}_{n-l-1}(x), \quad x = \frac{2Zr}{n} \qquad (73)$$

где

$$C_{nl} = \frac{1}{n}\left[Z\frac{(n-l-1)!}{(n+l+1)!}\right]^{1/2},$$

$L_k^{\alpha}(x)$ — полиномы Лагерра.

**Решение уравнений Клейна — Гордона и Дирака для кулонова поля.** Если кинетическая энергия частицы массы $\mu$

Таблица 2. **Решение некоторых задач квантовой механики**

| Основные характеристики | Гармонический осциллятор | Уравнение Шредингера для кулонова поля $Z/r$ | Уравнение Клейна — Гордона для кулонова поля $Z/r$ |
|---|---|---|---|
| $\sigma$ | $1$ | $r$ | $r$ |
| $\tilde{\sigma}$ | $2\epsilon - \xi^2$ | $2Er^2 - 2Zr - l(l+1)$ | $(E^2 - 1)r^2 + 2\alpha Er + \alpha^2 - l(l+1)$ |
| $\tilde{\tau}$ | $0$ | $0$ | $0$ |
| $k$ | $2\epsilon$ | $2Z - (2l+1)\sqrt{-2E}$ | $2\alpha E - (2\nu+1)\sqrt{1-E^2}$ |
| $\pi$ | $-\xi$ | $l+1 - r\sqrt{-2E}$ | $\nu+1 - r\sqrt{1-E^2}$ |
| $\tau$ | $-2\xi$ | $2(l+1 - r\sqrt{-2E})$ | $2(\nu+1 - r\sqrt{1-E^2})$ |
| $\varphi$ | $e^{-\xi^2/2}$ | $r^{l+1}e^{-r\sqrt{-2E}}$ | $r^{\nu+1}e^{-r\sqrt{1-E^2}}$ |
| $\lambda$ | $2\epsilon - 1$ | $2[Z - (l+1)\sqrt{-2E}]$ | $2[\alpha E - (\nu+1)\sqrt{1-E^2}]$ |
| $E_n$ | $\hbar\omega(n + 1/2)$ | $-Z^2/2n^2 \quad (n = n_r + l + 1)$ | $[1 + (\frac{\alpha}{n+\nu+1})^2]^{-1/2} \quad (\nu = -\frac{1}{2} + [(l+\frac{1}{2})^2 - \alpha^2]^{1/2})$ |

сравнима с энергией покоя $\mu c^2$ (c — скорость света), то в зависимости от величины ее спина необходимо использовать релятивистские обобщения уравнения Шредингера — *уравнение Клейна — Гордона* или *уравнение Дирака**). Для заряженной частицы с целым спином, движущейся в поле $U = -Ze^2/r$, уравнение Клейна — Гордона имеет вид

$$\Delta\psi + \left[\left(E+\frac{\alpha}{r}\right)^2 - 1\right]\psi = 0, \tag{74}$$

где используется система единиц $\hbar = c = \mu = 1$. При этом $\alpha = Ze^2/\hbar c \approx Z/137$. Уравнение (74) возникает, например, при изучении движения $\pi$-мезонов в поле атомных ядер.

Разделяя переменные в сферических координатах

$$\psi = \psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} R(r)\, Y(\theta,\varphi),$$

где $Y = Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические гармоники, для функции $R(r)$ получим уравнение типа (58):

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

Ограниченные, квадратично интегрируемые решения можно найти по схеме подразд. 4.1 (см. табл. 3). Собственные значения энергии равны

$$E = E_n = \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n+\nu+1}\right)^2\right]^{-1/2} \quad (n = 0, 1, \ldots),$$

где $\nu = -1/2 + [(l + 1/2)^2 - \alpha^2]^{1/2}$. Функции $R(r)$ можно выразить через полиномы Лагерра.

При изучении движения частицы с полуцелым спином в кулоновом поле используют уравнение Дирака. Для связанных состояний решения этого уравнения также можно получить с помощью теоремы 3 [16].

Мы рассмотрели решение некоторых основных задач квантовой механики. Аналогично решаются многочисленные модельные задачи. Кроме того, специальные функции играют важную роль при разработке приближенных и численных методов квантовой механики (см., например, метод ВКБ).

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

## Список литературы


1. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. — М.: Наука, 1979.
2. Атакишев Н.М. Формула Родрига для полиномиальной части радиальной волновой функции в квазипотенциальной модели релятивистского гармонического осциллятора: Препринт Института физики АН АзССР, 1984, № 87.
3. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, т. 1, 2. — М.: Наука, 1973.
4. Биденхарн Л., Лаук Д. Угловой момент в квантовой физике, т. 1, 2. — М.: Мир, 1984.
5. Варшалович Д.А., Москалев А.И., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975.
6. Ватсон Г.Н. Теория бесселевых функций. — М.: ИЛ, 1949.
7. Виленкин Н.Я. Специальные функции и теория представлений групп. — М.: Наука, 1965.
8. Гельфанд И.М., Минлос Р.А., Шапиро З.Я. Представления группы вращений и группы Лоренца. — М.: Физматгиз, 1958.
9. Кириченко И.К., Степановский Ю.П. "Физические" формфакторы и ковариантная параметризация электромагнитного тока частицы с произвольным спином. — ЯФ, 1974, т. 20, с. 554 — 561.
10. Никифоров А.Ф., Суслов С.К. Полиномы Хана и их связь с коэффициентами Клебша — Гордана группы SU(2): Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В. Келдыша АН СССР, 1982, № 83.
11. Никифоров А.Ф., Суслов С.К., Уваров В.Б. Полиномы Рака и дуальные полиномы Хана как обобщение классических ортогональных полиномов дискретной переменной: Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В. Келдыша АН СССР, 1982, № 165.
12. Никифоров А.Ф., Суслов С.К., Уваров В.Б. Асимптотические формулы второго порядка точности для коэффициентов Клебша—Гордана и 6j-символов Вигнера: Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В. Келдыша АН СССР, 1983, № 64.
13. Никифоров А.Ф., Суслов С.К., Уваров В.Б. Классические ортогональные полиномы дискретной переменной. — М.: Наука, 1985.
14. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Основы теории специальных функций. — М.: Наука, 1974.

15. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Классические ортогональные полиномы дискретной переменной на неравномерных сетках: Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В. Келдыша АН СССР, 1983, № 17.
16. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Специальные функции математической физики. — М.: Наука, 1984.
17. Рывкин В.Б. Представление коэффициентов Клебша — Гордана в виде конечно-разностных аналогов полиномов Якоби. — ДАН БССР, 1959, т. 3, с. 183 — 185.
18. Самарский А.А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.
19. Сегё Г. Ортогональные многочлены. — М.: Физматгиз, 1962.
20. Смородинский Я.А., Суслов С.К. Коэффициенты Клебша — Гордана группы SU(2) и полиномы Хана. — ЯФ, 1982, т. 35, с. 192 — 201.
21. Смородинский Я.А., Суслов С.К. 6j-символы и ортогональные полиномы. — ЯФ, 1982, т. 36, с. 1066 — 1071.
22. Смородинский Я.А., Шелепин Л.А. Коэффициенты Клебша — Гордана с разных сторон. — УФН, 1972, т. 103, с. 3 — 45.
23. Суслов С.К. Формула Родрига для коэффициентов Рака. — ЯФ, 1983, т. 37, с. 795 — 796.
24. Суслов С.К. 9j-символы как ортогональные полиномы от двух дискретных переменных. — ЯФ, 1983, т. 38, с. 1102 — 1104.
25. Суслов С.К. Т-коэффициенты метода деревьев как ортогональные полиномы дискретной переменной. — ЯФ, 1983, т. 38, с. 1367 — 1375.
26. Суслов С.К. Полиномы Хана и Мейкснера от мнимого аргумента: Препринт ИАЭ-3915/1. — М., 1984.
27. Суслов С.К. Полиномы Хана в кулоновой задаче. — ЯФ, 1984, т. 40, с. 126 — 132.
28. Уитткер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа. Т. 2. — М.: Физматгиз, 1963.
29. Чебышев П.Л. Полное собрание сочинений, 1947, т. 2, с. 236 — 238, с. 314 — 334, с. 357 — 374; 1948, т. 3, с. 66 — 87. — М.: Изд-во АН СССР.
30. Юцис А.П., Бандзайтис А.А. Теория момента количества движения в квантовой механике. — Вильнюс: Мокслас, 1977.
31. Askey R., Wilson J.A. A set ortogonal polinomials that generalize the Racah coefficients or 6j-symbols. — SIAM J. Math. Anal., 1979, v. 10, p. 1008 — 1016.

32. Hahn W. Uber Ortogonal Polinome, die q-Differenzengleichungen genugen. — Math. Nachr., 1949, Bd. 2, S. 4 — 34.
33. Karlin S., Mc Gregor J.L. The Hahn polinomials, formulas and application. — Scr. Math., 1961, v. 26, p. 33 — 46.
34. Koornwinder T.H. Krawtchouk polinomials, a unification of two different group theoretic interpretations. Report ZW150/81. Amsterdam: Mathematisch Centrum, 1981 (SIAM J. Math. Anal., 1982, v. 13, p. 1011 — 1023).
35. Koornwinder T.H. Clebsch — Gordan coefficients for SU(2) and Hahn polinomials. Report ZW160/81. Amsterdam: Mathematisch Centrum, 1981 (Nieuw Archiev Voor Wisckunde (3), 1981, v. XXIX, p. 140 — 155).
36. Meckler A. On the Algebra of Angular Momentum. — Nuovo Cim. Suppl., 1959, v. XII (X), p. 1 — 40.
37. Wilson J.A. Some hypergeometric orthogonal polinomials. — SIAM J. Math. Anal., 1980, v. 11, p. 690 — 701.

Редактор Л. И. Кирюхина
Технический редактор Н. И. Мазаева
Корректор Г. Я. Кармадонова

Т-06146. 4.02.85. Формат 60x90/16. Уч.-изд. л. 2,5
Тираж 203. Индекс 3624. Заказ 140

Отпечатано в ИАЭ

## РУБРИКАТОР ПРЕПРИНТОВ ИАЭ

1. Общая, теоретическая и математическая физика
2. Ядерная физика

3. Общие проблемы ядерной энергетики
4. Физика и техника ядерных реакторов
5. Методы и программы расчета ядерных реакторов

6. Теоретическая физика плазмы
7. Экспериментальная физика плазмы и управляемый термоядерный синтез
8. Проблемы теормядерного реактора

9. Физика конденсированного состояния вещества
10. Физика низких температур и техническая сверхпроводимость
11. Радиационная физика твердого тела и радиационное материаловедение

12. Атомная и молекулярная физика
13. Химия и химическая технология

14. Приборы и техника эксперимента
15. Автоматизация и методы обработки экспериментальных данных
16. Вычислительная математика и техника

Индекс рубрики дается через дробь после основного номера ИАЭ.

35 коп. Индекс 3624

Препринт ИАЭ-4150/1. М., 1985