

Dodatek E

Uwagi o wielomianach Laguerre'a

E.1 Podstawy – definicje

Wielomiany Laguerre'a $L_m^{(\alpha)}(x)$ są wielomianami stopnia m . Jako ich definicję można przyjąć wzór Rodriguesa

$$L_m^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{m!} x^{-\alpha} e^x \frac{d^m}{dx^m} (x^{m+\alpha} e^{-x}), \quad (\text{E.1})$$

gdzie przyjmujemy m – liczba naturalna ($m = 0, 1, 2, \dots$), oraz parametr $\alpha > -1$ jest liczbą rzeczywistą. Warto też zwrócić uwagę na czynnik normujący $m!$ w mianowniku wzoru (E.1). Różne źródła w różny sposób określają wspomniany czynnik. Na podstawie wzoru Rodriguesa można łatwo skonstruować wielomiany Laguerre'a w jawnej postaci. Trzy pierwsze wielomiany Laguerre'a, niezbędne do wyznaczenia kilku pierwszych funkcji radialnych atomu wodoropodobnego, są postaci

$$L_0^{(\alpha)}(x) = 1, \quad (\text{E.2a})$$

$$L_1^{(\alpha)}(x) = (\alpha + 1) - x, \quad (\text{E.2b})$$

$$L_2^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{2}(\alpha + 1)(\alpha + 2) - x(\alpha + 2) + \frac{1}{2}x^2. \quad (\text{E.2c})$$

Stosując we wzorze Rodriguesa wzór Leibniza dla pochodnej (rzędu m) iloczynu dwóch funkcji, możemy uzyskać jawne, ogólne wyrażenie dla wielomianów Laguerre'a

$$L_m^{(\alpha)}(x) = \sum_{k=0}^m (-1)^k \frac{x^k}{k!} \frac{\Gamma(m + \alpha + 1)}{(m - k)! \Gamma(\alpha + k + 1)}. \quad (\text{E.3})$$

Korzystając z uogólnionego rozumienia współczynników dwumianowych (dopuszczającego rzeczywisty górny indeks) możemy zapisać wielomiany Laguerre'a w postaci równoważnej

$$L_m^{(\alpha)}(x) = \sum_{k=0}^m (-1)^k \frac{x^k}{k!} \binom{m + \alpha}{k + \alpha}. \quad (\text{E.4})$$

Jeśli parametr α jest liczbą naturalną to funkcje Γ przechodzą w zwykłe silnie i wówczas mamy

$$L_m^{(\alpha)}(x) = \sum_{k=0}^m (-1)^k \frac{x^k}{k!} \frac{(m + \alpha)!}{(m - k)! (k + \alpha)!}. \quad (\text{E.5})$$

W wielu zastosowaniach przydaje się fakt, że wielomiany Laguerre'a spełniają równanie różniczkowe

$$x \frac{d^2}{dx^2} w(x) + (\alpha + 1 - x) \frac{d}{dx} w(x) + n w(x) = 0, \quad \text{gdzie} \quad w(x) = L_n^\alpha(x). \quad (\text{E.6})$$

Wielomiany Laguerre'a mają funkcje tworzącą określoną dla $|z| < 1$ w następujący sposób

$$\frac{1}{(1-z)^{\alpha+1}} \exp\left(-\frac{xz}{1-z}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(\alpha)}(x) z^n. \quad (\text{E.7})$$

Odnotujmy jeszcze związek pomiędzy wielomianami Laguerre'a a konfluentną funkcją hipergeometryczną

$${}_1F_1(-m, \alpha, z) = \frac{m! \Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(m+\alpha+1)} L_m^{(\alpha)}(z). \quad (\text{E.8})$$

E.2 Całki z wielomianami Laguerre'a

Przypadek ogólny

Potrzebować będziemy pewnych całek zawierających wielomiany Laguerre'a. Rozważmy więc następującą całkę z dwóch funkcji tworzących (E.7) parametryzowanych przez z i t

$$J(a) = \int_0^\infty dx x^{a-1} e^{-x} \frac{\exp\left(-\frac{xz}{1-z}\right)}{(1-z)^{\alpha+1}} \frac{\exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right)}{(1-t)^{\beta+1}}, \quad (\text{E.9})$$

gdzie przyjmujemy $a > 0$. Po uporządkowaniu wykładników funkcji eksponencjalnych nie jest trudno obliczyć tę całkę. Z drugiej strony możemy rozwinąć funkcje tworzące wielomianów Laguerre'a według (E.7). Całkę $J(a)$ obliczoną z (E.9) porównujemy z rozwinięciem i otrzymujemy

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} z^m t^n \int_0^\infty dx x^{a-1} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\beta)}(x) &= \\ &= \frac{\Gamma(a)}{(1-z)^{1+\alpha-a} (1-t)^{1+\beta-a} (1-zt)^a}. \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Warto przypomnieć rozwinięcie dla dowolnego, rzeczywistego b i dla $|x| < 1$

$$(1-x)^b = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} (-b)_k, \quad \text{gdzie} \quad (z)_k = z(z+1)(z+2)\dots(z+k-1). \quad (\text{E.11})$$

Dla b całkowitego dodatniego szereg urywa się i redukuje do dwumianu Newtona. Iloczyn $(z)_k$ nazywamy symbolem Pochhammera. Zawiera on k czynników. Dla $z \neq -n$ (nie będącego ujemną liczbą całkowitą) mamy

$$(z)_k = \frac{\Gamma(z+k)}{\Gamma(z)}, \quad \text{przy czym} \quad (z)_0 = 1. \quad (\text{E.12})$$

Całka ortogonalizacyjna. Rodziny wielomianów Laguerre'a

Relacja (E.10) jest szczególnie interesująca dla przypadku $\alpha = \beta = a - 1$. Dwa pierwsze czynniki mianownika prawej strony dają jedynki. Mamy prosty przypadek

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} z^m t^n \int_0^\infty dx x^\alpha e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= \Gamma(\alpha+1) (1-zt)^{-(\alpha+1)} \\ &= \Gamma(\alpha+1) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(zt)^k}{k!} (\alpha+1)_k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(zt)^k}{k!} \Gamma(\alpha+k+1), \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

gdzie skorzystaliśmy z rozwinięcia (E.11) i własności symbolu Pochhammera (E.12) dla $\alpha+1 > 0$. Po prawej stronie równości (E.13) zmienne z i t występują zawsze w tej samej potęgce. A zatem po lewej stronie wyrazy z $m \neq n$ muszą zniknąć, łatwo więc odczytujemy

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^\alpha L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) = \delta_{mn} \frac{\Gamma(\alpha + m + 1)}{m!}. \quad (\text{E.14})$$

Jest to relacja ortogonalności dla rodziny wielomianów Laguerre'a z ustalonym górnym indeksem α . Zapewnia ona ortogonalność radialnych funkcji falowych atomu wodoropodobnego ze względu na główną liczbę kwantową. Zauważmy, że ze względu na różnie przyjmowane czynniki normujące w definicjach (E.1) lub (E.3) znajdujemy w podręcznikach różne wersje całki ortogonalizacyjnej.

W szczególności, z (E.14), dla $\alpha = 2l + 1$ oraz $n = m = n - l - 1$ otrzymujemy

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^{2l+1} [L_{n-l-1}^{(2l+1)}(x)]^2 = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}. \quad (\text{E.15})$$

Całki w rodzinie wielomianów o określonym górnym indeksie

Ogólne wyrażenie (E.10) pozwala rozpatrywać wiele różnych przypadków. Ze względu na potrzeby związane z mechaniką kwantową dalsze rozważania ograniczymy do przypadku, w którym oba górne indeksy wielomianów Laguerre'a są jednakowe $\alpha = \beta$, a więc do rodziny wielomianów ortogonalnych. Ponadto przyjmiemy wykładnik a w postaci $a = \alpha + 1 + q > 0$, gdzie dopuszczamy q jako dowolną liczbę rzeczywistą spełniającą podany warunek. Z ogólnej relacji (E.10) otrzymujemy wówczas

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} z^m t^n \int_0^\infty dx x^{\alpha+q} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= \\ &= (1-z)^q (1-t)^q (1-zt)^{-(\alpha+q+1)} \Gamma(\alpha + q + 1). \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

Stosując relacje (E.11) i (E.12) przekształcamy prawą stronę

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} z^m t^n \int_0^\infty dx x^{\alpha+q} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+p} t^{k+s}}{p! s! k!} (-q)_p (-q)_s \Gamma(\alpha + q + k + 1). \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

Sumy po obu stronach nie są identyczne. Porównując współczynniki przy jednakowych potęgach z oraz t widzimy, że indeksy sumowania powiązane są warunkami

$$\begin{aligned} m = k + p &\Rightarrow p = m - k, \\ n = k + s &\Rightarrow s = n - k. \end{aligned} \quad (\text{E.18})$$

A więc przy wybranych m i n indeksy p i s są jednoznacznie określone przez m , n oraz k . Każdemu wyrazowi po lewej odpowiada więc po prawej stronie pojedyncza suma względem indeksu k . W ten sposób z (E.17) otrzymujemy (przy warunku $q + \alpha > -1$)

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha+q} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-q)_{m-k} (-q)_{n-k}}{(m-k)! (n-k)!} \frac{\Gamma(\alpha + q + k + 1)}{k!}. \quad (\text{E.19})$$

Suma po k tak naprawdę jest skończona. Wynika to stąd, że argumenty silni w mianowniku nie mogą być ujemne. Warunki te muszą być spełnione równocześnie. A zatem można je zapisać wspólnie

$$k \leq k_{\max} = \min(m, n). \quad (\text{E.20})$$

A więc w (E.19) suma po k jest skończona i górną granicą sumy jest k_{max} . Całka (E.19) wraz z warunkiem (E.20) stanowi wynik, który będziemy dalej badać. Pewne uproszczenia możemy dostać rozpatrując bardziej konkretne przypadki, w których symbol Pochhammera przyjmuje prostą postać.

Przypadek szczególny: $\alpha = \beta$ oraz $q \geq 0$

Jeżeli $q \geq 0$ to z definicji symbolu Pochhammera wynika

$$\frac{1}{p!} (-q)_p = (-1)^p \binom{q}{p}, \quad (\text{E.21})$$

gdzie symbol Newtona ponownie rozumiemy w sensie uogólnionym. Wówczas z (E.19) przy uwzględnieniu (E.20) dostajemy

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx x^{\alpha+q} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= \\ &= \sum_{k=0}^{k_{max}} (-1)^{m+n} \frac{\Gamma(\alpha + q + k + 1)}{k!} \binom{q}{m-k} \binom{q}{n-k}. \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

Biorąc pod uwagę własność symetrii współczynników dwumianowych mamy

$$\binom{q}{m-k} = \binom{q}{q-m+k} \quad (\text{E.23})$$

Znów więc mamy warunki $q - m + k \geq 0$ oraz analogicznie $q - n + k \geq 0$. Wobec tego w sumie po k nie znikają tylko te człony, dla których k jest najmniejszą liczbą całkowitą spełniającą warunek

$$k \geq k_{min} = [\max(m - q, n - q)], \quad (\text{E.24})$$

gdzie $[\cdot]$ oznacza część całkowitą. Suma w (E.22) jest więc jeszcze bardziej ograniczona.

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx x^{\alpha+q} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= \\ &= \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} (-1)^{m+n} \frac{\Gamma(\alpha + q + k + 1)}{k!} \binom{q}{m-k} \binom{q}{n-k}. \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

W przypadku dowolnego q rzeczywistego niewiele możemy dalej zrobić. Nietrudno jest, na przykład przyjąć, że q jest nieujemną liczbą całkowitą. Zauważmy, że w tej sytuacji może się tak zdarzyć, iż dla pewnych par (m, n) nie da się znaleźć indeksów k spełniających jednocześnie warunki (E.20) i (E.24). Oczywiście wtedy całka występująca po lewej stronie wzoru (E.25) jest równa zeru.

Jako przykład takiej sytuacji rozważmy $q = 0$. Warunek dla k ma postać

$$q = 0, \quad \implies \quad \min(m, n) \geq k \geq \max(m, n). \quad (\text{E.26})$$

Jeśli $m \neq n$ to oczywiście nie może on być spełniony przez jakąkolwiek liczbę całkowitą k . A więc wtedy całka po lewej (E.25) znika. Jedynie dla przypadku $m = n$ możliwe jest $k = m$. Łatwo sprawdzić, że wtedy odtwarza się całka ortogonalizacyjna (E.14).

Przypadek szczególny: $\alpha = \beta$, $m = n$ oraz $q = j \geq 0$ – całkowite

W konkretnych zastosowaniach potrzebujemy całek, w których $\alpha = \beta$, $m = n$ oraz q jest nieujemną liczbą całkowitą $q = j \geq 0$. Wówczas $k_{min} = m - j$, zaś $k_{max} = m$. Ze wzoru (E.25) otrzymujemy

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha+j} e^{-x} [L_m^{(\alpha)}(x)]^2 = \sum_{k=m-j}^m \frac{\Gamma(\alpha+j+k+1)}{k!} \binom{j}{m-k}^2, \quad (\text{E.27})$$

Wygodnie jest wprowadzić nowy indeks sumowania $s = k + j - m$, który przebiega zbiór $(0, 1, 2, \dots, j)$. W ten sposób całka (E.27) przybiera postać

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha+j} e^{-x} [L_m^{(\alpha)}(x)]^2 = \sum_{s=0}^j \frac{\Gamma(\alpha+m+s+1)}{(m-j+s)!} \binom{j}{s}^2, \quad (\text{E.28})$$

gdzie wykorzystaliśmy również własność symetrii (E.23).

Uzyskana relacja (E.28) jest pożyteczna przy obliczaniu całek zawierających funkcje radialne atomu wodoropodobnego. Bez trudu z (E.28) otrzymujemy całki dla $j = 0, 1, 2$. Dla $j = 0$ oczywiście ponownie dostajemy całkę ortogonalizacyjną (E.14). Pomijając bardzo proste obliczenia podajemy dwie następne całki. Całka z $j = 1$ pojawia się przy normowaniu, natomiast przypadek $j = 1$ mamy przy obliczaniu wartości oczekiwanej promienia atomu wodoropodobnego. Odpowiednie całki wynoszą =

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha+1} e^{-x} [L_m^{(\alpha)}(x)]^2 = (2m + \alpha + 1) \frac{\Gamma(\alpha + m + 1)}{m!} \quad (\text{E.29a})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx x^{\alpha+2} e^{-x} [L_m^{(\alpha)}(x)]^2 \\ = [(\alpha + 1)(\alpha + 6m + 2) + 6m^2] \frac{\Gamma(\alpha + m + 1)}{m!}. \end{aligned} \quad (\text{E.29b})$$

Zwróćmy uwagę, że dla wielomianów Laguerre'a występujących w funkcjach radialnych mamy $\alpha = 2l + 1$ oraz $m = n - l - 1$. Wobec tego,

$$\int_0^\infty dx x^{2l+2} e^{-x} [L_{n-l-1}^{(2l+1)}(x)]^2 = 2n \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}, \quad (\text{E.30a})$$

$$\int_0^\infty dx x^{2l+3} e^{-x} [L_{n-l-1}^{(2l+1)}(x)]^2 = 2(3n^2 - l(l+1)) \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}. \quad (\text{E.30b})$$

Przypadek szczególny $\alpha = \beta$, $m = n$ oraz $q < 0$

Ponownie korzystamy ze wzoru (E.19), w którym teraz przyjmujemy $q = -|q|$, przy warunku $|q| < \alpha + 1$. Jak łatwo sprawdzić, symbol Pochhammera i współczynnik dwumianowy spełniają relację

$$\frac{(|q|)_p}{p!} = \binom{|q| + p - 1}{p}. \quad (\text{E.31})$$

Uwzględniając powyższą formułę otrzymujemy

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx x^{\alpha-|q|} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) &= \sum_{k=0}^{k_{max}} \frac{\Gamma(\alpha + k - |q| + 1)}{k!} \\ &\times \binom{|q| + m - k - 1}{m - k} \binom{|q| + n - k - 1}{n - k}, \end{aligned} \quad (\text{E.32})$$

co jest mało pożyteczne, jeśli q jest dowolną liczbą ujemną spełniającą warunek $|q| < \alpha + 1$.

Współczynniki dwumianowe występujące w (E.32) upraszczają się do jedynek, jeśli $q = -1$. Wówczas z (E.32) dostajemy

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^{k_{max}} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{k!}, \quad (\text{E.33})$$

gdzie $k_{max} = \min(m, n)$ zgodnie z warunkiem (E.20).

W tym miejscu warto jest przypomnieć pewne, bardzo użyteczne własności współczynników dwumianowych.

Lemat E.1 Dla współczynników dwumianowych z rzeczywistym parametrem λ , zachodzi reguła sumacyjna (zwana sumowaniem równoległym)

$$\sum_{k=0}^M \binom{\lambda+k}{k} = \binom{\lambda+M+1}{M}. \quad (\text{E.34})$$

Dowód lematu można w prosty sposób przeprowadzić przez indukcję względem liczby całkowitej M . Relację sumowania równoległego można zapisać przez funkcje gamma:

$$\sum_{k=0}^M \frac{\Gamma(\lambda+k+1)}{k!} = \frac{\Gamma(\lambda+M+2)}{(\lambda+1) M!}, \quad (\text{E.35})$$

gdzie czynnik $\Gamma(\lambda+1)$ się skrócił. Stosując (E.35) (przy $\lambda+1 = \alpha$) do całki (E.33) otrzymujemy

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha+k_{max}+1)}{\alpha (k_{max})!}. \quad (\text{E.36})$$

W zastosowaniach kwantowo-mechanicznych przydatna nam będzie całka typu (E.36) dla przypadku $m = n$. W tej sytuacji, ze wzoru (E.36) dostajemy

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-x} \left[L_m^{(\alpha)}(x) \right]^2 = \frac{\Gamma(\alpha+m+1)}{m! \alpha}. \quad (\text{E.37})$$

Jeżeli jeszcze położymy $\alpha = 2l+1$ oraz $m = n-l-1$ to wówczas

$$\int_0^\infty dx x^{2l} e^{-x} \left[L_{n-l-1}^{(2l+1)}(x) \right]^2 = \frac{(n+l)!}{(2l+1)(n-l-1)!}. \quad (\text{E.38})$$
