第8章 本征值问题和正交函数展开

8.1 正则Sturm-Liouville本征值问题

本征值的性质，正交、完备的函数系

8.2 奇异Sturm-Liouville本征值问题

Bessel方程, Legendre算子, Hermite算子

8.3 连续谱和混合谱

第三类边界条件，声学和量子力学例子

8.4 正交多项式展开

一般定理和性质，三个典型的多项式

8.5 一般Hermite对称算子的本征值问题

基本性质，正算子，空间对称性与简并

8.1 正则Sturm-Liouville 本征值问题

偏微分方程 → 分离变量法 → 本征值问题

❑一般算子的本征值问题

求下列方程的非零解以及非零解存在条件

$$\boldsymbol{L}(\psi)=\lambda\psi$$

其中，L: 任意算子（矩阵算子、微分算子、积分算子……)；λ: 本征值；ψ: 本征函数——同时决定!

矩阵的本征值问题

$$\boldsymbol{A}=[N\times N]\Rightarrow \boldsymbol{A}X_n=\lambda_n X_n \quad (n=1,2,\cdots,N)$$

Hermite对称矩阵*A*

①本征值是实的

$$\lambda_n^*=\lambda_n \Rightarrow \mathrm{Im}(\lambda_n)=0$$

②本征矢量正交

$$X_m^T X_n=\delta_{mn} \quad (n,m=1,2,\cdots,N)$$

③本征矢量构成完备基

$$x=\sum_n^N C_n X_n$$

矩阵方程的解

$$\boldsymbol{A}x = b \Leftarrow x = \sum_{n}^{N} C_n X_n$$

$$\boldsymbol{A}x = \sum_{n}^{N} C_n \boldsymbol{A} X_n = \sum_{n}^{N} C_n \lambda_n X_n = b \Rightarrow C_m = \frac{X_m^T \cdot b}{\lambda_m}$$

$$x = \sum_{n=1}^{N} \frac{X_n^T \cdot b}{\lambda_n} X_n \quad \Rightarrow \quad x = C_0 X_0 + \sum_{n=1}^{N} \frac{X_n^T \cdot b}{\lambda_n} X_n$$

如果存在零本征值，解不唯一，解存在条件：

$$X_0^T \cdot b = 0 \Leftarrow \boldsymbol{A} X_0 = 0$$

■ 线性微分方程的非齐次问题

$$\boldsymbol{L}(\psi) = f \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{L}(\psi_n) = \lambda_n \psi_n, (n = 1, 2, \ldots)$$

Hermite对称的微分算子*A*(定义见后面讨论)

①本征值是实的

$$\lambda_n^* = \lambda_n \Rightarrow \mathrm{Im}(\lambda_n) = 0$$

②本征函数正交

$$(\psi_m^*, \psi_n) = \delta_{mn} \quad (n, m = 1, 2, \cdots, \infty)$$

③本征函数构成完备基

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n$$

线性非齐次方程的解

$$\mathbf{L}(\psi)=f \Leftarrow \psi=\sum_{n=1}^{\infty} a_n\psi_n \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} a_n\mathbf{L}(\psi_n)=f$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n\lambda_n\psi_n=f \Rightarrow a_n\lambda_n=(\psi_n,f)$$

$$\psi=\sum_{n=1}^{\infty} a_n\psi_n=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\psi_n,f)}{\lambda_n}\psi_n \Rightarrow \psi=a_0\psi_0+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\psi_n,f)}{\lambda_n}\psi_n$$

如果有零本征值，解不唯一，存在条件： (ψ_0,f)

二个问题的重大区别：无限求和的收敛性问题?

❑ Sturm-Liouville 本征值问题的标准形式

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}(y) \equiv -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right] + q(x)y = \lambda\rho(x)y, x \in (a,b) \\ \left.\left(\alpha_1 y - \beta_1\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=a} = 0; \quad \left.\left(\alpha_2 y + \beta_2\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=b} = 0 \end{cases}$$

$\rho(x) \geq 0$ 称为权函数

第一类边界条件：$\beta_1 = \beta_2 = 0$, 固定边界

第二类边界条件：$\alpha_1 = \alpha_2 = 0$，自由边界

第三类边界条件：其他情况，阻抗边界

■ 一般形式方程变换成S-L系统

$$p_2(x)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+p_1(x)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+p_0(x)u+\lambda u=0$$

⬆

$$\rho(x)=\frac{1}{p_2(x)}\exp\left[\int^x\frac{p_1(\tau)}{p_2(\tau)}\mathrm{d}\tau\right]$$

$$p(x)=\rho(x)p_2(x);\quad q(x)=-\rho(x)p_0(x)$$

⬇

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x}\right]+q(x)u(x)=\lambda\rho(x)u(x)$$

注意边界条件形式不变化

■ Liouville变换(走时变换)

$$u(x)=v(t)\left[p(x)\rho(x)\right]^{-1/4};\quad t=\int_a^x\sqrt{\frac{\rho(s)}{p(s)}}\mathrm{d}s$$

$$\frac{\mathrm{d}^2v(t)}{\mathrm{d}t^2}+\left[\lambda-Q(t)\right]v(t)=0$$

注意：边界条件形式也变化

$$Q(t)=\frac{q\left[x(t)\right]}{\rho\left[x(t)\right]}+\frac{1}{\left[p[x(t)]\rho[x(t)]\right]^{1/4}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\left[(p\rho)^{1/4}\right]$$

正则Sturm-Liouville 本征值问题

(1) $p(x)>0,\ \rho(x)>0,\ q(x)\geq 0$ ➡ 为什么?

(2) $p(x),\ p'(x),\ \rho(x)>0,\ q(x)$ 在$[a,b]$内连续

(3) $\alpha_i\beta_i \geq 0$ 和 $\alpha_i+\beta_i>0$ ➡ 为什么?

注意：这里的全部参量都是实数

非正则Sturm-Liouville 本征值问题

上述三个条件有一个或者二个不满足

定义内积——带权$\rho(x)$

$$(\varphi_1,\varphi_2)=\int_a^b \rho(x)\varphi_1^*(x)\varphi_2(x)\mathrm{d}x$$

如果

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)\varphi_i^*(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x = \delta_{ij}$$

则称φ_i和φ_j正交、归一.

❑ L的Hermite对称性

$$(\boldsymbol{L}\varphi_i, \varphi_j) = (\varphi_i, \boldsymbol{L}\varphi_j)$$

积分形式

$$\int_a^b [\boldsymbol{L}\varphi_i(x)]^* \varphi_j(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \varphi_i^*(x)\boldsymbol{L}[\varphi_j(x)]\mathrm{d}x$$

证明：首先导出Lagrange恒等式

$$\int_a^b [\varphi_i^* \boldsymbol{L}\varphi_j - \varphi_j (\boldsymbol{L}\varphi_i)^*]\mathrm{d}x$$

$$= \int_a^b \left[\varphi_j \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(p\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*}{\mathrm{d}x} \right) - \varphi_i^* \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(p\frac{\mathrm{d}\varphi_j}{\mathrm{d}x} \right) \right]\mathrm{d}x$$

$$= \int_a^b \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p\left(\varphi_j \frac{\mathrm{d}\varphi_i^*}{\mathrm{d}x} - \varphi_i^* \frac{\mathrm{d}\varphi_j}{\mathrm{d}x} \right) \right]\mathrm{d}x$$

$$= p(x)\left(\varphi_j \frac{\mathrm{d}\varphi_i^*}{\mathrm{d}x} - \varphi_i^* \frac{\mathrm{d}\varphi_j}{\mathrm{d}x} \right)\Bigg|_a^b = 0$$

$$\int_a^b [\varphi_i^* \boldsymbol{L}\varphi_j - \varphi_j (\boldsymbol{L}\varphi_i)^*]\mathrm{d}x = p(x)\left(\varphi_j \frac{\mathrm{d}\varphi_i^*}{\mathrm{d}x} - \varphi_i^* \frac{\mathrm{d}\varphi_j}{\mathrm{d}x} \right)\Bigg|_a^b = 0$$

最后一个等式是因为

$$\alpha_1\varphi_i^*(a)-\beta_1\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*(a)}{\mathrm{d}x}=0;\quad \alpha_1\varphi_j(a)-\beta_1\frac{\mathrm{d}\varphi_j(a)}{\mathrm{d}x}=0$$

α_1和β_1存在非零解条件

$$\varphi_j(a)\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*(a)}{\mathrm{d}x}-\varphi_i^*(a)\frac{\mathrm{d}\varphi_j(a)}{\mathrm{d}x}=0$$

同理

$$\varphi_j(b)\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*(b)}{\mathrm{d}x}-\varphi_i^*(b)\frac{\mathrm{d}\varphi_j(b)}{\mathrm{d}x}=0$$

❑正则Sturm-Liouville 本征值问题的性质

①本征值是实数且非负（大于等于零），本征函数可选择为实值函数

证明：1、由

$$\boldsymbol{L}(\varphi)=\lambda\rho(x)\varphi;\ \ [\boldsymbol{L}(\varphi)]^{*}=\lambda^{*}\rho(x)\varphi^{*}$$

$$\int_a^b\left\{[\boldsymbol{L}(\varphi)]^{*}\varphi-\varphi^{*}\boldsymbol{L}(\varphi)\right\}\mathrm{d}x$$

$$=(\lambda^{*}-\lambda)\int_a^b\rho(x)\varphi^{*}\varphi\mathrm{d}x\equiv 0$$

即 $\lambda=\lambda^{*}$ ⇒ **本征值是实数**

2、因为本征方程中p、q、λ和ρ都是实数，任一解的实部和虚部都是本征方程的解，故本征函数可选择为实值函数

3、由 $\boldsymbol{L}(\varphi)=\lambda\rho(x)\varphi$ 得到

$$\lambda=\frac{1}{\int_a^b \rho\,|\,\varphi(x)\,|^2\,\mathrm{d}x}\int_a^b \varphi(x)\boldsymbol{L}\varphi\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{\|\varphi\|^2}\left[-\int_a^b \varphi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(p\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x+\int_a^b q\varphi^2\mathrm{d}x\right]$$

$$=-\left(p\varphi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\Bigg|_a^b+\int_a^b p\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)^2 dx+\int_a^b q\varphi^2\mathrm{d}x$$

利用边界条件

$$-p(b)\varphi(b)\frac{\mathrm{d}\varphi(b)}{\mathrm{d}x}=\begin{cases}\dfrac{\alpha_2}{\beta_2}p(b)\varphi^2(b)\ge 0, & \beta_2\ne 0\\ 0, & \beta_2=0\end{cases}$$

$$p(a)\varphi(a)\frac{\mathrm{d}\varphi(a)}{\mathrm{d}x}=\begin{cases}\dfrac{\alpha_1}{\beta_1}p(a)\varphi^2(a)\ge 0, & \beta_1\ne 0\\ 0, & \beta_1=0\end{cases}$$

——对正则Sturm-Liouville 本征值问题，

$p(x)>0$, $\rho(x)>0$, $q(x)\ge 0$，$\alpha_i\beta_i\ge 0$，显然$\lambda\ge 0$。

- 如果在闭区域$[a,b]$内，$q(x)>0$，则$\lambda>0$，即零不是本征值;

- 如果$q(x)=0$, 则当且仅当时$\alpha_1=\alpha_2=0$ (第二类边界条件)$\lambda=0$是本征值.

②对应不同本征值的本征函数相互正交，且可归一化

证明：设两个不同的本征值(λ_i,λ_j), 分别对应的本征函数是 (φ_i,φ_j)，则

$$\mathbf{L}\varphi_i=\lambda_i\rho(x)\varphi_i;\quad \mathbf{L}\varphi_j=\lambda_j\rho(x)\varphi_j$$

由上二式得到

$$(\boldsymbol{L}\varphi_i)^*\varphi_j = \lambda_i\rho(x)\varphi_i^*\varphi_j; \quad \varphi_i^*\boldsymbol{L}(\varphi_j) = \lambda_j\rho(x)\varphi_i^*\varphi_j$$

$$\int_a^b [(\boldsymbol{L}\varphi_i)^*\varphi_j - \varphi_i^*\boldsymbol{L}(\varphi_j)]\mathrm{d}x$$

$$= (\lambda_i - \lambda_j)\int_a^b \rho(x)\varphi_i^*\varphi_j\mathrm{d}x \equiv 0$$

当*i* ≠*j*时

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_i^*\varphi_j\mathrm{d}x \equiv 0$$

当*i*=*j*时

$$\int_a^b \rho(x)|\varphi_i|^2\mathrm{d}x \equiv N_i^2 < \infty$$

在有限空间内，本征函数是平方可积的

取

$$\psi_i(x)=\frac{1}{N_i}\varphi_i(x)\ (i=0,1,2,....)$$

则正交和归一化方程可以统一写成

$$\int_a^b \rho(x)\psi_i^*\psi_j \mathrm{d}x=\delta_{ij}$$

Kronecker delta函数

注意：①下面假定本征函数已经归一化；②在开空间，本征函数归一到Dirac delta函数

③如果 $p(x), p'(x), q(x)$ 连续或者至多是端点的一阶极点，则存在无限个本征值

$$0 \le \lambda_0 \le \lambda_1 \le \lambda_2 \le \lambda_3 \le \ldots\ldots; \lim_{n\to\infty} \lambda_n = \infty$$

相应的本征函数为

$$\varphi_1(x), \varphi_2(x), \varphi_3(x), \ldots$$

④对应一个本征值，只有一个本征函数，即正则Sturm-Liouville 本征值问题是非简并的。

⑤第n个本征值λ_n对应的本征函数$\varphi_n(x)$在开区间(a,b)内有n个一阶零点。

⑥本征函数 $\{\varphi_n(x)\}$ 是完备的。$[a, b]$ 上带权$\rho(x)$平方可积的函数 $f(x)$可展成广义Fourier 级数：

$$\int_a^b \rho(x)\,|\,f(x)\,|^2\,\mathrm{d}x < \infty; \quad f(x) \cong \sum_{n=0}^{\infty} f_n \varphi_n(x)$$

$$f_n = \int_a^b f(x)\varphi_n^*(x)\rho(x)\mathrm{d}x$$

❑ 关于函数系的完备性

如果对定义在 $[a, b]$ 上的平方可积函数 $f(x)$，在平方平均收敛的意义上

$$\lim_{N\to\infty}\int_a^b \Big|\, f(x) - \sum_{n=0}^{N} f_n \varphi_n(x)\Big|^2 \rho(x)\mathrm{d}x = 0$$

则称函数系 $\{\varphi_n(x)\}$ 是定义在 $L^2[a,b]$ 上的完备集。

证明：考虑带权平方平均误差

$$\Delta_N \equiv \int_a^b \left| f(x) - \sum_{n=0}^{N} c_n \varphi_n(x) \right|^2 \rho(x)\mathrm{d}x$$

$$f_n \equiv \int_a^b f(x)\varphi_n^*(x)\rho(x)\mathrm{d}x; \quad (f, f) \equiv \int_a^b | f(x) | \rho(x)\mathrm{d}x$$

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{mn}$$

$$\Delta_N = (f, f) - \sum_{n=0}^{N} f_n c_n^* - \sum_{n=0}^{N} f_n^* c_n + \sum_{n=0}^{N} c_n c_n^*$$

极小条件

$$\frac{\partial \Delta_N}{\partial c_k} = 0; \quad \frac{\partial \Delta_N}{\partial c_k^*} = 0 \quad （k = 0, \cdots, N)$$

$$c_k^* = f_k^* = \int_a^b f^*(x)\varphi_k(x)\rho(x)\mathrm{d}x$$

$$c_k = f_k = \int_a^b f(x)\varphi_k^*(x)\rho(x)\mathrm{d}x$$

- **广义Bessel不等式**

$$\Delta_N = (f, f) - \sum_{n=0}^{N} |f_n|^2 > 0 \Rightarrow (f, f) \geq \sum_{n=0}^{N} |f_n|^2$$

$$(f, f) = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=0}^{N} |f_n|^2$$

例1 简单情况

$$\begin{cases} -X'' = \lambda X, \ (0 < x < l) \\ X(0) = X(l) = 0 \end{cases}$$

解：λ分三种情况讨论

- $\lambda = 0$ $\quad X''(x) = 0 \Rightarrow X(x) = C + Dx$

由边界条件

$$X(0) = C = 0; X(l) = C + Dl = Dl = 0$$

$$\Downarrow$$

$$X(x) \equiv 0 \Rightarrow \lambda \neq 0$$

- $\lambda < 0$

$$X(x) = Ae^{-\sqrt{|\lambda|}x} + Be^{\sqrt{|\lambda|}x}$$

由边界条件

$$X(0) = A + B = 0$$

$$X(l) = Ae^{-\sqrt{|\lambda|}l} + Be^{\sqrt{|\lambda|}l} = 0$$

无实数解

存在非零的条件

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ e^{-\sqrt{|\lambda|}l} & e^{\sqrt{|\lambda|}l} \end{vmatrix} = e^{\sqrt{|\lambda|}l} - e^{-\sqrt{|\lambda|}l} = 0$$

- **$\lambda > 0$**

$$X(x) = A\sin\sqrt{\lambda}x + B\cos\sqrt{\lambda}x$$

由边界条件

$$X(0) = B = 0;\ X(l) = A\sin\sqrt{\lambda}l = 0$$

$$\Rightarrow \sqrt{\lambda} l = n\pi, (n = 1, 2, ...)$$

因此，本征函数和本征值

$$X_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right), \ (n = 1, 2, ...)$$

$$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{l^2}, \ (n = 1, 2, ...)$$

反对称函数F级数展开的基函数

任意常数A由归一化条件决定

$$\int_0^l |X(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

$$X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right); \ \ \lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2, \ (n = 1, 2, ...)$$

□ 如果 $\begin{cases} -X'' = \lambda X, \ (0 < x < l) \\ X'(0) = X'(l) = 0 \end{cases}$

$$X_n(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{l}}, & (n=0) \\ \sqrt{\dfrac{2}{l}} \cos\left(\dfrac{n\pi}{l} x\right), & (n > 0) \end{cases}$$

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2, \quad (0 = 1, 2, 3\ldots)$$

对称函数F级数展开的基函数

$\lambda = 0$ 是本征值

□ 如果

$$\begin{cases} -X'' = \lambda X, \ (0 < x < l) \\ X(0) = X'(l) = 0 \end{cases}$$

$$X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left[\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{l} x\right]; \quad \lambda_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \left(\frac{\pi}{l}\right)^2$$

$$(n = 0, 1, 2 \ldots)$$

——注意：λ =0不是本征值

□ 如果

$$\begin{cases} -X'' = \lambda X, \ (0 < x < l) \\ X'(0) = X(l) = 0 \end{cases}$$

$$X_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\cos\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{l}x\right];\quad \lambda_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\left(\frac{\pi}{l}\right)^2$$

$$(n=0,1,2\ldots)$$

□ **如果**

$$\begin{cases} -X''=\lambda X,\ (0<x<l) \\ X(0)=0,\quad \alpha X(l)+\beta X'(l)=0 \end{cases}$$

$$X_\lambda(x)=A_\lambda\sin(\lambda x) \Rightarrow \alpha X_\lambda(l)+\beta X_\lambda'(l)=0$$

本征方程 $\alpha\tan(\lambda l)+\beta\lambda=0$

——存在一系列正根$\{\lambda_n\}$

归一化

$$\| X_n(x) \|^2 = A_n^2 \int_0^l \sin^2 \lambda_n x \mathrm{d}x$$

$$= \frac{A_n^2}{2}[l + \sin(2\lambda_n l)] = 1$$

$$\Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{l + \sin(2\lambda_n l)}}$$

$$X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l + \sin(2\lambda_n l)}} \sin(\lambda_n x)$$

① $\alpha = 0 \Rightarrow \cos(\lambda l) = 0$ $\Rightarrow$ $\lambda_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{l}$

② $\beta = 0 \Rightarrow \sin(\lambda l) = 0$ $\Rightarrow$ $\lambda_n = n\frac{\pi}{l}$

例2: 周期性边界条件——非Sturm-Liouville型本征值问题

$$\begin{cases} -X'' = \lambda X, \ (-\infty < x < +\infty) \\ X(-l) = X(l); X'(-l) = X'(l) \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

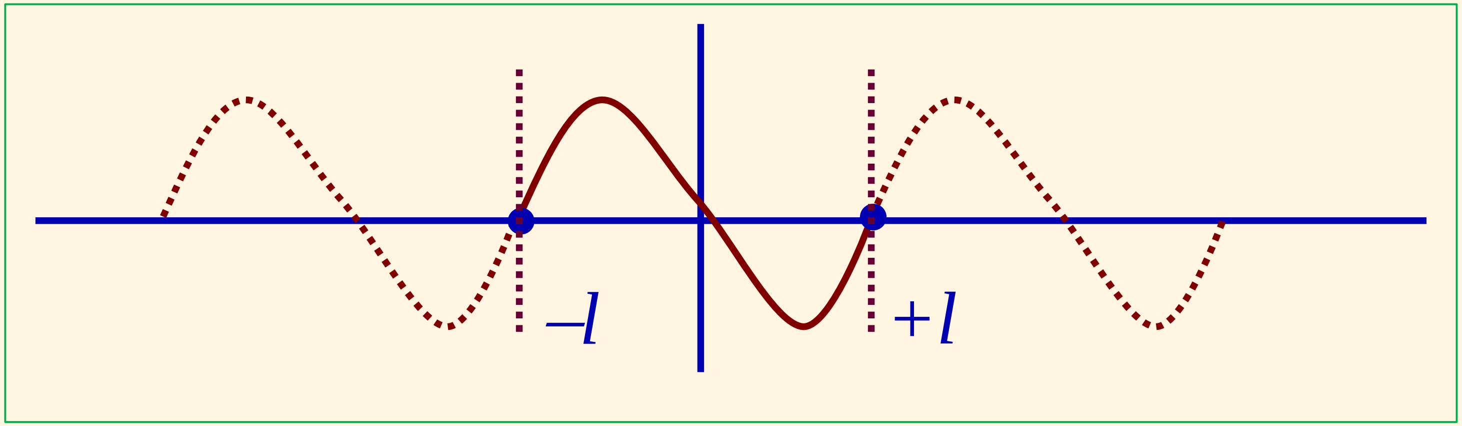
$$X(x) = A\sin\sqrt{\lambda}x + B\cos\sqrt{\lambda}x$$

$$X'(x) = \sqrt{\lambda}A\cos\sqrt{\lambda}x - \sqrt{\lambda}B\sin\sqrt{\lambda}x$$

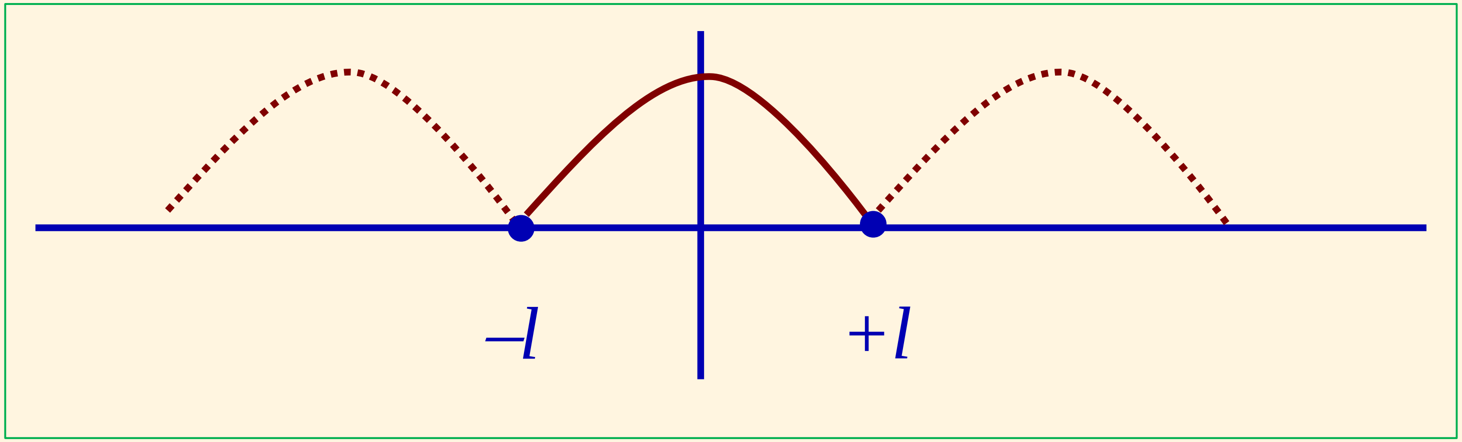
$$\Downarrow$$

本征方程

$$2A\sin\sqrt{\lambda}l = 0; \quad \sqrt{\lambda}B\sin\sqrt{\lambda}l = 0$$



不仅函数值相等，导数也要相等



函数值相等，但导数不相等

① $A=0, B\neq 0, \lambda\neq 0; \sqrt{\lambda}l=n\pi$

$$X(x)=B\cos\sqrt{\lambda}x=B\cos\left(\frac{n\pi}{l}x\right), \lambda_n=\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

$$X_n(x)=\frac{1}{\sqrt{l}}\cos\left(\frac{n\pi}{l}x\right), \lambda_n=\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

② $B=0, A\neq 0, \lambda\neq 0; \sqrt{\lambda}l=n\pi$

$$X(x)=A\sin\sqrt{\lambda}x=A\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right), \lambda_n=\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

$$X_n(x)=\frac{1}{\sqrt{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right), \lambda_n=\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

③ $A=0, B\neq 0, \lambda=0 \Rightarrow X_0(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2l}}, \lambda_0=0$

- **当$n\neq 0$时，对应于一个本征值，存在二个本征函数——二度简并**

$$X_n(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2l}} \quad (n=0)\\ \dfrac{1}{\sqrt{l}}\sin\left(\dfrac{n\pi}{l}x\right)\\ \dfrac{1}{\sqrt{l}}\cos\left(\dfrac{n\pi}{l}x\right)\end{cases}; \ \lambda_n=\left(\dfrac{n\pi}{l}\right)^2 \ (n=0,1,2,\ldots)$$

——非奇偶性函数的F展开的基函数

例3：极坐标平面角度的周期边界条件

$$\begin{cases} -\Phi''(\varphi)=\lambda\Phi(\varphi) \\ \Phi(\varphi)=\Phi(2\pi+\varphi) \end{cases} \Rightarrow \Phi(\varphi)=Ae^{i\sqrt{\lambda}\varphi}+Be^{-i\sqrt{\lambda}\varphi}$$

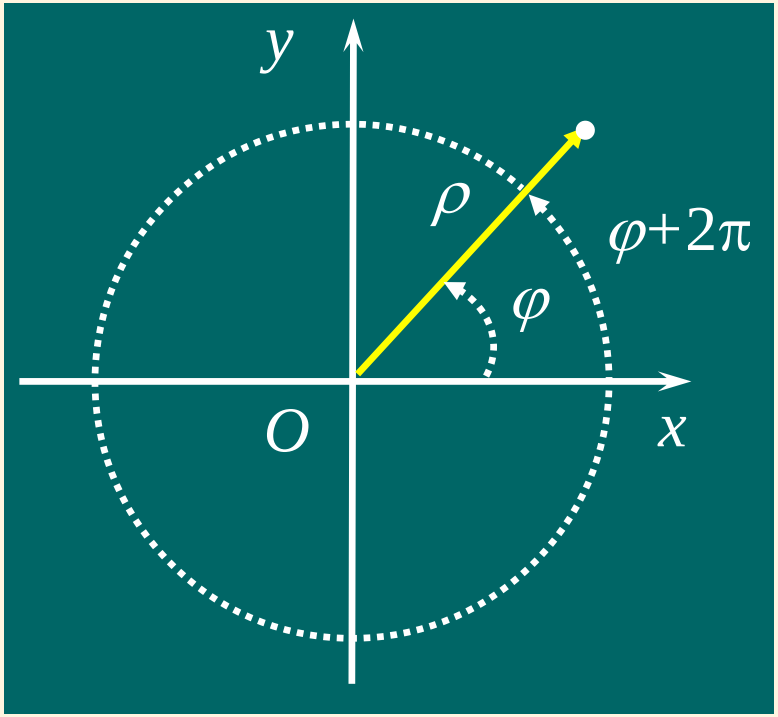
$$\Downarrow$$

$$Ae^{i\sqrt{\lambda}\varphi}+Be^{-i\sqrt{\lambda}\varphi}$$

$$=Ae^{i\sqrt{\lambda}(2\pi+\varphi)}+Be^{-i\sqrt{\lambda}(2\pi+\varphi)}$$

$$\Downarrow$$

$$e^{\pm i\sqrt{\lambda}2\pi}=1$$



因此，本征值为

$$\lambda=m^2,(m=0,\pm1,\pm2,\ldots)$$

——m≠0，二度简并

本征值函数为

$$\Phi_m(\varphi)=A_m e^{\mathrm{i}m\varphi} \Rightarrow \Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\mathrm{i}m\varphi}$$

■三角函数表示

$$\Phi(\varphi)=A\cos(\sqrt{\lambda}\varphi)+B\sin(\sqrt{\lambda}\varphi)$$

$$\Downarrow$$

$$A\cos(\sqrt{\lambda}\varphi)+B\sin(\sqrt{\lambda}\varphi)$$

$$=A\cos[\sqrt{\lambda}(2\pi+\varphi)]+B\sin[\sqrt{\lambda}(2\pi+\varphi)]$$

$$\Downarrow$$

$$A\cos(\sqrt{\lambda}\varphi)+B\sin(\sqrt{\lambda}\varphi)$$

$$=[A\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)]\cos(\sqrt{\lambda}\varphi)$$

$$+[-A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)]\sin(\sqrt{\lambda}\varphi)$$

上式恒成立条件

$$A\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)=A$$

$$-A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)=B$$

利用三角函数运算(见下页补充)

$$2A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)=0;\ 2B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)=0$$

$$\Downarrow$$

$$A=0, B\neq 0, \sqrt{\lambda}\neq 0 \Rightarrow \sqrt{\lambda}=m$$

$$B=0, A\neq 0, \sqrt{\lambda}\neq 0 \Rightarrow \sqrt{\lambda}=m$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\Phi_m(\varphi)=\begin{cases} A_0, & m=0 \\ A_m\cos(m\varphi), & m>0 \\ B_m\sin(m\varphi), & m>0 \end{cases}}$$

■补充过程

$$A\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)=A \qquad (1)$$

$$-A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)=B \qquad (2)$$

①: $(1)\times\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)+(2)\times\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)$

$$\Downarrow$$

$$B=A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)+B\cos(\sqrt{\lambda}2\pi) \qquad (3)$$

由方程(2)和(3)

$$\boxed{2A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)=0}$$

②: $(1)\times\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)-(2)\times\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)$

$$\Downarrow$$

$$A=A\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)-B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi) \qquad (4)$$

由方程(1)和(4)

$$\boxed{2B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)=0}$$

归一化本征值函数系为

$$\Phi_m(\varphi)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} & m=0\\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\cos(m\varphi), & m>0\\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(m\varphi), & m>0\end{cases}$$

$$\Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\Phi_m^c(\varphi)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} & m=0\\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\cos(m\varphi), & m>0\end{cases}\\ &\Phi_m^s(\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(m\varphi), \quad m\geq 1\end{aligned}}$$

——相当于二个垂直的子空间，分别对应偶函数和奇函数的展开基函数

■**问题1：有限角问题？如果物理问题限制角度**

$$\boxed{\begin{cases}\Phi''+\lambda\Phi=0,\varphi\in(\varphi_1,\varphi_2)\\ \Phi\big|_{\varphi=\varphi_1}=\Phi\big|_{\varphi=\varphi_2}=0\end{cases}}$$

$$\Phi_m(\varphi) = A_m \sin\left[\frac{m\pi}{\varphi_2 - \varphi_1}(\varphi - \varphi_1)\right], \quad (m = 1, 2, \ldots.)$$

- **如果区域[0,π/2]**

偶数

$$\varphi_1 = 0, \varphi_2 = \pi/2 \Rightarrow \Phi_m(\varphi) = A_m \sin(2m\varphi), (m = 1, 2, \ldots.)$$

- **如果区域[0,π]**

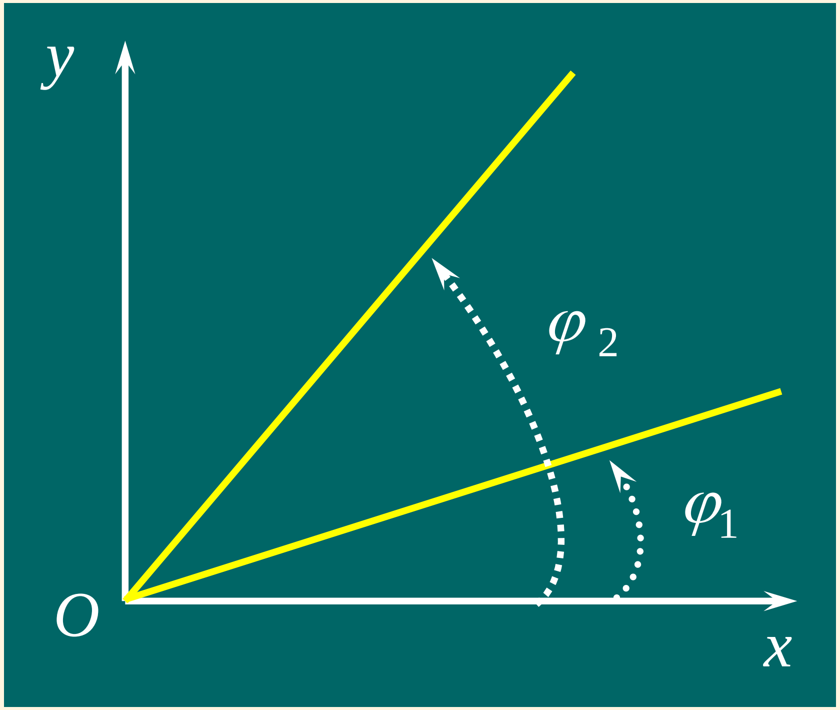
$$\Phi_m(\varphi) = A_m \sin(m\varphi)$$

$$(m = 1, 2, \ldots.)$$

- **如果区域[0,2π]**

$$\Phi_m(\varphi) = A_m \sin\left(\frac{m}{2}\varphi\right)$$

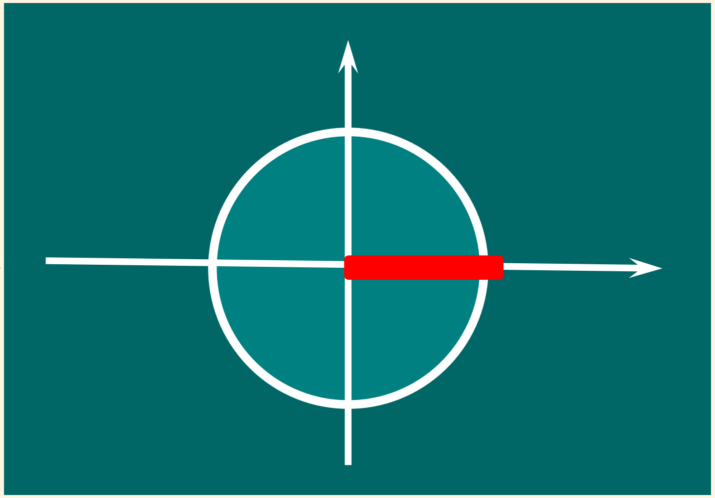
$$(m = 1, 2, \ldots.)$$



比较周期边界条件　为什么?

$$\Phi(\varphi) = A_m e^{im\varphi};(m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.)$$

二个问题的区域不一样



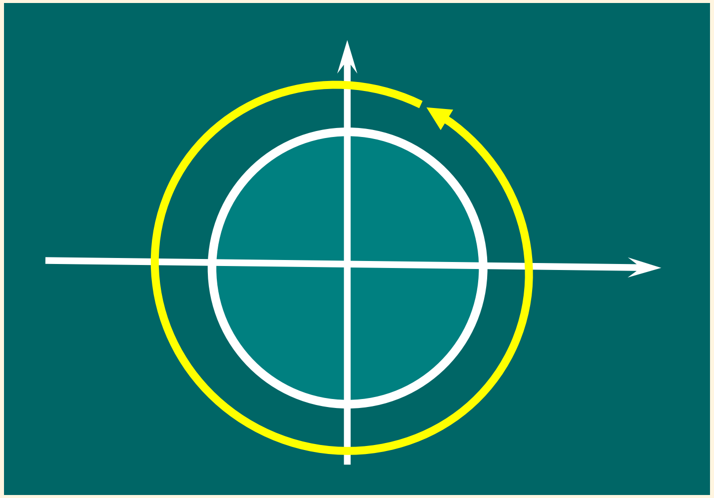
■问题2：速度势问题

当m=0时，$-\Phi''(\varphi) = 0 \Rightarrow \Phi(\varphi) = C + D\varphi$

如果物理问题要求函数满足周期性边界条件，则取D=0，但某些物理问题中，必须保留这一项，如不可压缩流体围绕圆柱定常流动，速度势不是真正的物理量，而速度才是

$$\boldsymbol{v}=\nabla u(\rho,\varphi)=\frac{\partial u(\rho,\varphi)}{\partial\rho}\boldsymbol{e}_{\rho}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial u(\rho,\varphi)}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_{\varphi}$$

- 求梯度后，存在与角度无关的环流速度，而这是有意义的；
- 其他与角度有关的项仍然必须满足周期性边界条件。



■ 关于边界条件的说明

$$L[y] \equiv -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right] + q(x)y = \lambda\rho(x)y, x \in (a,b)$$

$$\alpha_{11}y(a) + \beta_{11}y'(a) + \alpha_{12}y(b) + \beta_{12}y'(b) = 0$$
$$\alpha_{21}y(a) + \beta_{21}y'(a) + \alpha_{22}y(b) + \beta_{22}y'(b) = 0$$

——二端相关边界条件

① 如：周期性边界条件——非Sturm-Liouville型本征值问题！

② 系数α_{ij}、β_{ij}满足一定条件，L才有Hermite对称性（作为习题）！

8.2 奇异Sturm-Liouville 本征值问题

具体问题具体分析

- **Bessel函数展开** ***x*=0是Bessel方程的正则奇点**

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)+\frac{n^2}{x}\varphi=\lambda x\varphi,\quad x\in(0,l)$$

$$\varphi(x)\,|_{x=0}<\infty;\left.\left(\alpha\varphi+\beta\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=l}=0$$

显然

$$p(x)=x,\rho(x)=x,q(x)=\frac{n^2}{x}>0$$

■ Bessel方程的通解

$$\varphi(x) = AJ_n(\sqrt{\lambda}x) + BN_n(\sqrt{\lambda}x)$$

因为 $J_n(0) \to$ 有限；$N_n(0) \to \infty$ ，由

$$\varphi(x)\big|_{x=0} < \infty \Rightarrow B \equiv 0$$

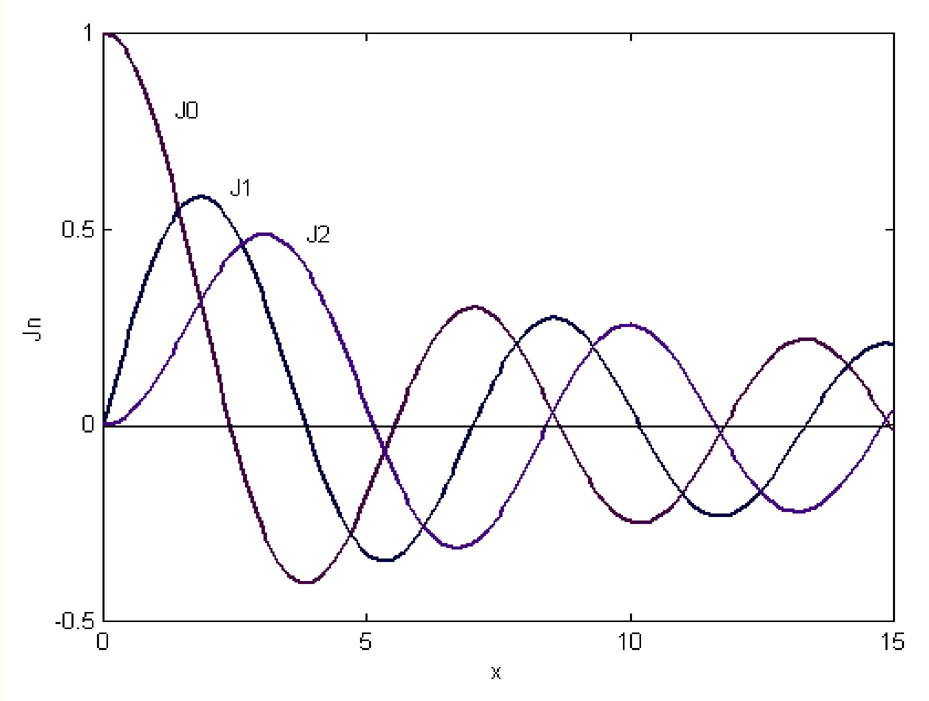
■ 决定本征值λ的方程

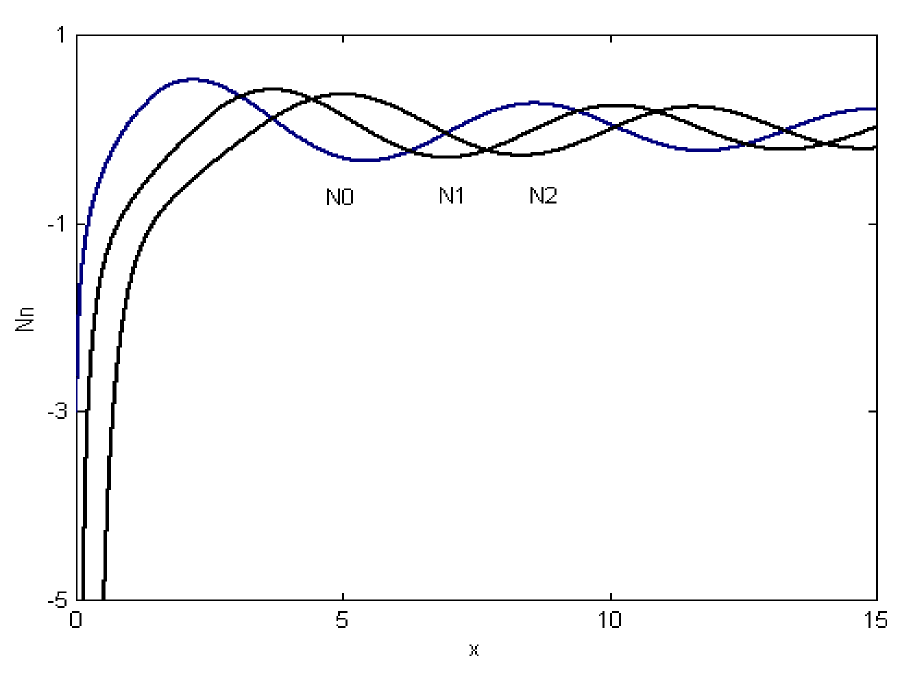
$$\left.\left[\alpha J_n(\sqrt{\lambda}x) + \beta \frac{\mathrm{d}J_n(\sqrt{\lambda}x)}{\mathrm{d}x}\right]\right|_{x=l} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\alpha J_n(\xi) + \frac{\beta}{l}\xi \frac{\mathrm{d}J_n(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = 0}$$

前三个Bessel 函数





前三个Neumann 函数

设方程的第k个正根为 $\boxed{\alpha_k^n}, (k=1,2,\cdots)$

- **本征值**

$$\lambda_k^n = (\alpha_k^n)^2 / l^2$$

- **本征函数系**

$$\varphi_k^n(x) = AJ_n\left(\sqrt{\lambda_k^n}\,x\right)$$

- **对第一类边界条件**

$$\varphi_k^n(x) = \frac{\sqrt{2}}{l}\cdot\frac{J_n\left(\sqrt{\lambda_k^n}\,x\right)}{J_{n+1}\left(\sqrt{\lambda_k^n}\,l\right)}, (k=1,2,\cdots)$$

对每一个n, 函数系是一个正交、归一的完备系

- 对任一函数$f(x)\in L^2[0,l]$且带权平方可积

$$\int_0^l x f^2(x)\mathrm{d}x<\infty$$

注意:对每一个n都成立.

总可展成Bessel-Fourier级数

$$f(x)\cong\sum_{k=1}^{\infty}(\varphi_k^n,f)\varphi_k^n(x)$$

- 如果问题不包括原点(正则S-L本征值问题)

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)+\frac{n^2}{x}\varphi=\lambda x\varphi,\quad x\in(1,2)$$

$$\left.\left(\alpha_1\varphi-\beta_1\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=1}=0;\left.\left(\alpha_2\varphi+\beta_2\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=2}=0$$

■ Bessel方程的通解

$$\varphi(x) = AJ_n(\sqrt{\lambda}x) + BN_n(\sqrt{\lambda}x)$$

由边界条件

$$\left.\left(\alpha_1\varphi - \beta_1\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=1} = 0;\left.\left(\alpha_2\varphi + \beta_2\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\right|_{x=2} = 0$$

本征方程

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = 0$$

$$a_{11} = \alpha_1 J_n(\sqrt{\lambda}) - \beta_1 \left.\frac{\mathrm{d}J_n(\sqrt{\lambda}x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=1}$$

$$a_{12} = \alpha_1 N_n(\sqrt{\lambda}) - \beta_1 \left.\frac{\mathrm{d}N_n(\sqrt{\lambda}x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=1}$$

$$a_{21} = \alpha_2 J_n(2\sqrt{\lambda}) + \beta_2 \left.\frac{\mathrm{d}J_n(\sqrt{\lambda}x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=2}$$

$$a_{22} = \alpha_2 N_n(2\sqrt{\lambda}) + \beta_2 \left.\frac{\mathrm{d}N_n(\sqrt{\lambda}x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=2}$$

□ Legendre微分算子

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}-2x\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}+\lambda y=0,\quad x\in(-1,+1)$$

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right]=\lambda y,\quad x\in(-1,+1)$$

$$y(\pm 1)<\infty \Leftarrow \boxed{\text{自然边界条件}}$$

——奇异S-L本征值问题

本征函数：Legendre多项式；本征值 $\lambda_l = l(l+1)$

$$y_l(x)=P_l(x)\ (l=0,1,2,\ldots)$$

■ 如果 $x \in (a,b),\quad -1 < a,b < +1$

不存在自然边界条件; 二个端点给出边界条件

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right] = \lambda y,\quad x \in (a,b)$$

$$y(a)=y(b)=0$$

——正则S-L本征值问题

$$\lambda = \mu(\mu+1)$$

$$y(x) = AP_\mu(x) + BQ_\mu(x)$$

$$AP_\mu(a)+BQ_\mu(a)=0$$

$$AP_\mu(b)+BQ_\mu(b)=0$$

本征值方程

$$P_\mu(a)Q_\mu(b)-P_\mu(b)Q_\mu(a)=0$$

- **如果** $x\in(a,+1),\ \ (-1<a<0)$

***x*=1处存在自然边界条件; *x*=*a*端给出边界条件**

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right]=\lambda y,\ \ x\in(a,b)$$

$$y(a)=0\,;y(+1)<\infty$$ **自然边界条件**

——奇异S-L本征值问题

本征函数和本征值方程： Legendre函数

$$y(x) = AP_\mu(x); P_\mu(a) = 0$$

❑Hermite微分算子

$$\frac{\mathrm{d}^2 H}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\xi} + \lambda H = 0,\ x \in (-\infty, \infty)$$

⬇

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(e^{-x^2}\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}x}\right) = \lambda e^{-x^2} H, x \in (-\infty, \infty)$$

$$\lim_{x\to\pm\infty} H(x) < \infty$$ ⬅ 自然边界条件

——奇异S-L本征值问题

存在有限解的条件为$\lambda_n=2n$, (n=0,1,2,…..) , 相应的本征函数为Hermite多项式

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}$$

函数系

$$\left\{\varphi_n(x)\right\}=\left\{\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}H_n(x);\rho(x)=e^{-x^2}\right\}$$

构成Hilbert空间$L^2(-\infty,\infty)$上正交归一的完备系

$$f(x)\approx\sum_{n=0}^{\infty}f_n\varphi_n(x);\ f_n=\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)f(x)\varphi_n(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)f^2(x)\mathrm{d}x<\infty;$$

□ 正交性条件 设a点存在自然边界条件

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}(\varphi) \equiv -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right] + q(x)\varphi = \lambda\rho(x)\varphi, x \in (a,b) \\ \varphi(x)\big|_{x=a} < \infty; \quad \left(\alpha_2\varphi + \beta_2\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)\Bigg|_{x=b} = 0 \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\int_a^b [\varphi_i^* \boldsymbol{L}\varphi_j - \varphi_j (\boldsymbol{L}\varphi_i)^*] \mathrm{d}x = p(x)\left(\varphi_j \frac{\mathrm{d}\varphi_i^*}{\mathrm{d}x} - \varphi_i^* \frac{\mathrm{d}\varphi_j}{\mathrm{d}x}\right)\Bigg|_a^b$$

$$\Uparrow$$

$$\varphi_j(b)\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*(b)}{\mathrm{d}x} - \varphi_i^*(b)\frac{\mathrm{d}\varphi_j(b)}{\mathrm{d}x} = 0$$

为了a点边界条件为零

$$\varphi_j(a)\,p(a)\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a}-\varphi_i^*(a)\,p(a)\frac{\mathrm{d}\varphi_j(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a}=0$$

$$p(a)\frac{\mathrm{d}\varphi_i^*(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a}=p(a)\frac{\mathrm{d}\varphi_j^*(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a}=0$$

- **Legendre微分算子**

$$p(x)=1-x^2\Leftarrow x=\pm 1$$

- **Bessel微分算子**

$$p(x)=x\Leftarrow x=0$$

- **Hermite微分算子**

$$p(x)=e^{-x^2}\Leftarrow a=\infty$$

8.3 连续谱和混合谱

离散本征值：源于边界条件，物理上，边界的反射形成离散的驻波模式。当不存在边界条件时，本征值没有限制—形成连续谱。

■**一维无限大**

$$-\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\lambda^2\varphi(x)\ (-\infty<x<\infty)$$

$$\Downarrow$$

$$\varphi_\lambda(x)=A_\lambda\exp(\mathrm{i}\lambda x)\ (-\infty<\lambda<\infty)$$

本征值可是任意实数，本征方程都存在非零解

问题：如何归一化?

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_\lambda(x)\varphi_{\lambda'}^*(x)\mathrm{d}x = A_\lambda A_{\lambda'}^*\int_{-\infty}^{\infty}e^{\mathrm{i}(\lambda-\lambda')x}\mathrm{d}x$$

$$= 2\pi A_\lambda A_{\lambda'}^*\delta(\lambda-\lambda')$$

如果取

$$A_\lambda = 1/\sqrt{2\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_\lambda(x)\varphi_{\lambda'}^*(x)\mathrm{d}x = \delta(\lambda-\lambda')$$

■ **本征函数为**

$$\varphi_\lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\mathrm{i}\lambda x) \quad (-\infty < \lambda < \infty)$$

■平方可积函数按本征函数展开

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\varphi_\lambda(x)\mathrm{d}\lambda=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\exp(\mathrm{i}\lambda x)\mathrm{d}\lambda$$

$$f(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\varphi_\lambda^*(x)\mathrm{d}\lambda=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\exp(-\mathrm{i}\lambda x)\mathrm{d}\lambda$$

——一维Fourier积分

■三维无限大

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right)\varphi=k^2\varphi\ ;-\infty<(x_1,x_2,x_3)<\infty$$

$$\varphi_{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3}(x_1,x_2,x_3)=A_{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3}\exp[\mathrm{i}(k_1x_1+k_2x_2+k_3x_3)]$$

$$k^2=k_1^2+k_2^2+k_3^2;-\infty<(k_1,k_2,k_3)<\infty$$

归一化

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_{k_1,k_2,k_3}\varphi^*_{k_1',k_2',k_3'}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3$$

$$=A_{k_1,k_2,k_3}A^*_{k_1',k_2',k_3'}(2\pi)^3\delta(k_1-k_1')\delta(k_2-k_2')\delta(k_3-k_3')$$

$$\varphi_{k_1,k_2,k_3}(x_1,x_2,x_3)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\exp[\mathrm{i}(k_1x_1+k_2x_2+k_3x_3)]$$

$$f(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int f(\boldsymbol{k})\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}$$

$$f(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int f(\boldsymbol{r})\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

平面波展开

■半无限大空间

①第一类边界条件

$$-\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\lambda^2\varphi(x)\ \ (0<x<\infty)$$

$$\varphi(x)\big|_{x=0}=0$$

$$\varphi_\lambda(x)=A_\lambda\sin(\lambda x)\ \ (0<\lambda<\infty)$$

$$\Downarrow$$

归一积分

$$\int_0^\infty\varphi_\lambda(x)\varphi^*_{\lambda'}(x)\mathrm{d}x=A_\lambda A^*_{\lambda'}\int_0^\infty\sin(\lambda x)\sin(\lambda' x)\mathrm{d}x$$

$$\int_0^{\infty}\varphi_\lambda(x)\varphi_{\lambda'}^*(x)\mathrm{d}x=\frac{A_\lambda A_{\lambda'}^*}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\sin(\lambda x)\sin(\lambda' x)\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{A_\lambda A_{\lambda'}^*}{8}4\pi[\delta(\lambda+\lambda')-\delta(\lambda-\lambda')]=\frac{A_\lambda A_{\lambda'}^*}{2}\pi\delta(\lambda-\lambda')$$

如果取 $A_\lambda=\sqrt{2/\pi}$

$$\varphi_\lambda(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(\lambda x)\ \ (0<\lambda<\infty)$$

■奇函数的Fourier积分

$$f(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^{\infty}f(\lambda)\sin(\lambda x)\mathrm{d}\lambda$$

$$f(\lambda)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^{\infty}f(x)\sin(\lambda x)\mathrm{d}x$$

奇延拓函数，或者满足第一类边界条件的函数

②第二类边界条件

$$-\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \lambda^2\varphi(x) \ (0 < x < \infty)$$

$$\varphi'(x)|_{x=0} = 0$$

$$\varphi_\lambda(x) = B_\lambda \cos(\lambda x) \ (0 < \lambda < \infty)$$

$$\int_0^\infty \varphi_\lambda(x)\varphi^*_{\lambda'}(x)\mathrm{d}x = B_\lambda B^*_{\lambda'}\int_0^\infty \cos(\lambda x)\cos(\lambda' x)\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2}B_\lambda B^*_{\lambda'}\int_0^\infty \{\cos[(\lambda+\lambda')x] + \cos[(\lambda-\lambda')x]\}\,\mathrm{d}x$$

$$= \frac{\pi}{2}B_\lambda B^*_{\lambda'}[\delta(\lambda+\lambda') + \delta(\lambda-\lambda')] = \frac{\pi}{2}B_\lambda B^*_{\lambda'}\delta(\lambda-\lambda')$$

如果取 $B_\lambda = \sqrt{2/\pi}$

$$\varphi_\lambda(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\cos(\lambda x)\ (0<\lambda<\infty)$$

■偶函数的Fourier积分

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty f(\lambda)\cos(\lambda x)\mathrm{d}\lambda$$

$$f(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty f(x)\cos(\lambda x)\mathrm{d}x$$

偶延拓函数，或者满足第二类边界条件的函数

③第三类边界条件

$$-\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \lambda^2\varphi(x)\ (0<x<\infty)$$

$$\alpha\varphi(0) - \beta\varphi'(x)|_{x=0} = 0$$

$$\varphi_\lambda(x) = A_\lambda \sin(\lambda x) + B_\lambda \cos(\lambda x) \ (0 < \lambda < \infty)$$

$$\alpha\varphi(0) - \beta\varphi'(0) = 0$$

$$\alpha B_\lambda - \beta\lambda A_\lambda = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\varphi_\lambda(x) = \frac{A_\lambda}{\alpha}[\alpha \sin(\lambda x) + \beta\lambda \cos(\lambda x)]$$

$$= C_\lambda[\alpha \sin(\lambda x) + \beta\lambda \cos(\lambda x)]$$

归一化计算

$$\varphi_\lambda\varphi_{\lambda'} = C_\lambda C_{\lambda'}[\alpha^2 \sin(\lambda x)\sin(\lambda' x)$$

$$+\alpha\beta\lambda' \sin(\lambda x)\cos(\lambda' x)$$

$$+\alpha\beta\lambda \cos(\lambda x)\sin(\lambda' x) + \beta^2\lambda\lambda' \cos(\lambda x)\cos(\lambda' x)]$$

注意到：在广义函数意义下

$$\delta(y)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\mathrm{i}yx}\mathrm{d}x=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\infty}\cos(yx)\mathrm{d}x$$

$$f(y)=\int_{0}^{\infty}\sin(yx)\mathrm{d}x=0$$

证明

$$(f,\varphi)=\int_{0}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\sin(yx)\varphi(y)\mathrm{d}y\right]\mathrm{d}x,\forall\varphi$$

利用试验函数的偶函数特性

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sin(yx)\varphi(y)\mathrm{d}y=0$$

因此

$$(f,\varphi)=0\Rightarrow f(y)\equiv 0$$

$$\int_0^{\infty}\varphi_\lambda\varphi_{\lambda'}\mathrm{d}x = C_\lambda C_{\lambda'}\Big[\alpha^2\int_0^{\infty}\sin(\lambda x)\sin(\lambda' x)\mathrm{d}x$$

$$+\beta^2\lambda\lambda'\int_0^{\infty}\cos(\lambda x)\cos(\lambda' x)\mathrm{d}x\Big]$$

$$=\frac{\pi}{2}C_\lambda C_{\lambda'}(\beta^2\lambda^2+\alpha^2)\delta(\lambda-\lambda')$$

$$\varphi_\lambda(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi(\beta^2\lambda^2+\alpha^2)}}[\alpha\sin(\lambda x)+\beta\lambda\cos(\lambda x)]$$

$$f(x)=\int_0^{\infty}f(\lambda)\varphi_\lambda(x)\mathrm{d}\lambda$$

$$f(\lambda)=\int_0^{\infty}f(x)\varphi_\lambda(x)\mathrm{d}x$$

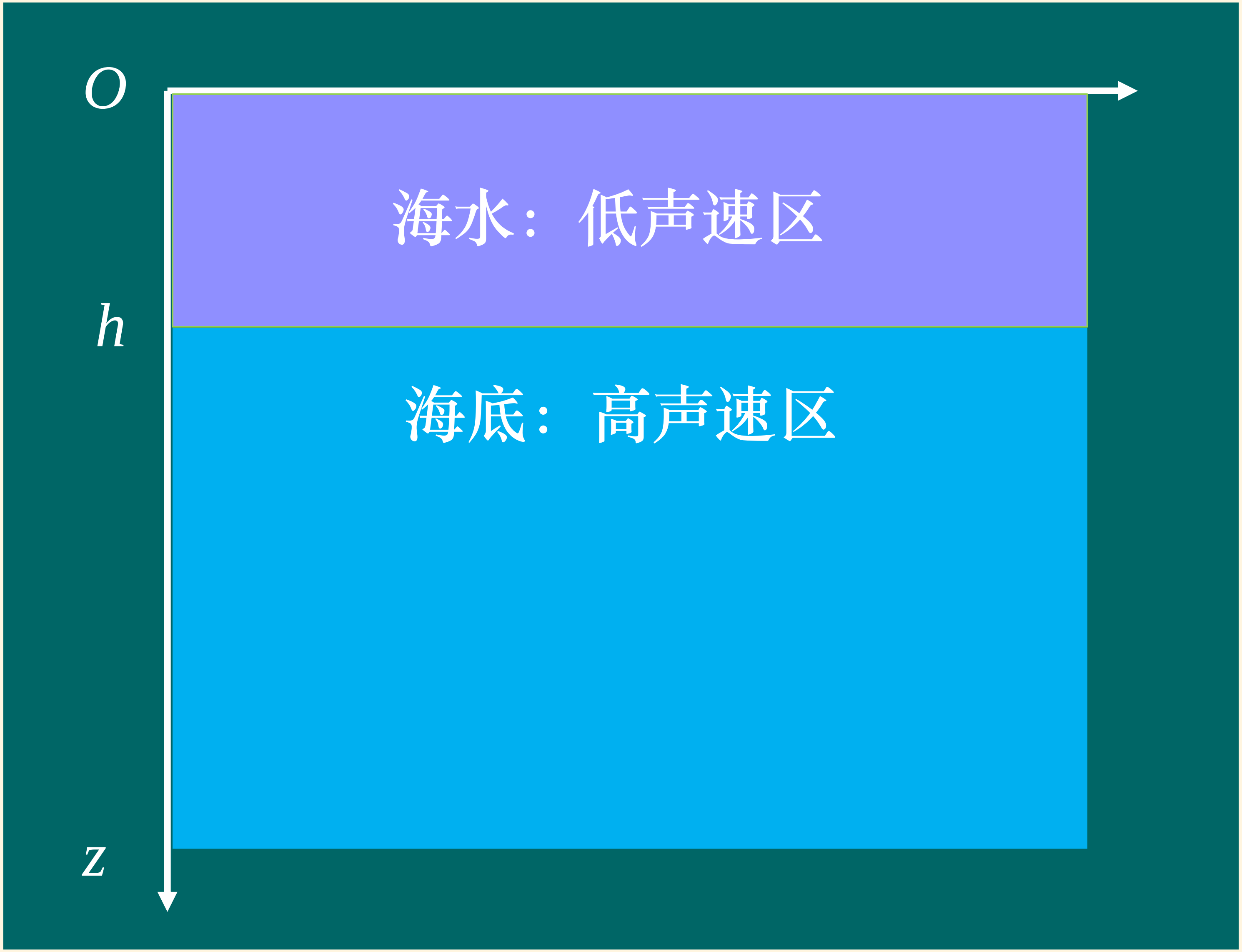
满足第三类边界条件的函数，广义Fourier变换

■ 混合谱问题

- ■ 无限或者半无限非均匀介质
- ■ 非均匀区域对波的局域化，存在局域化模式

例1 声学：半无限大区域——有限个本征值

$$\begin{cases} -X_1''(z)=(a_1^2-\lambda^2)X_1(z)\ (0<z<h) \\ -X_2''(z)=(a_2^2-\lambda^2)X_2(z)\ (h<z<\infty) \\ X_1(0)=0 \\ X_1(h-0)=X_2(h+0);\ X_1'(h-0)=X_2'(h+0) \\ \lim\limits_{z\to\infty} X_2(z)<\infty;\ a_1>a_2 \end{cases}$$


O
海水：低声速区
h
海底：高声速区
z

① $0<\lambda<a_2\ \ (\lambda<a_1)$

$$X(\lambda,z)\equiv\begin{cases}X_1(z)=A\cos\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}z\right)+B\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}z\right)\\X_2(z)=C\exp\left(-\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}z\right)+D\exp\left(\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}z\right)\end{cases}$$

$$A=0;\ \ \lim_{z\to\infty}X_2(\lambda,z)<\infty$$

三个系数，对λ不存在约束，连续谱

$$B\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}h\right)=Ce^{-\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}h}+De^{\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}h}$$

$$B\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\cos\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}h\right)=\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}\left[-Ce^{-\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}h}+De^{\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}h}\right]$$

② $a_2 < \lambda < a_1$

$$X_1(z) = A\cos\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\,z\right) + B\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\,z\right)$$

$$X_2(z) = C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,z\right) + D\exp\left(\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,z\right)$$

⇓

$$X_1(0)=0 \Rightarrow A=0; \quad \lim_{z\to\infty} X_2(z) < \infty \Rightarrow D=0$$

⇓

$$X_1(z) = B\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\,z\right); X_2(z) = C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,z\right)$$

⇓

$$X_1(h-0) = X_2(h+0); X_1'(h-0) = X_2'(h+0)$$

$$B\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\,h\right)=C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,h\right)$$

$$B\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\cos\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\,h\right)=-C\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\exp\left(-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,h\right)$$

- **存在非零解条件得到决定本征值的方程**

$$\tan\left(h\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\right)=-\frac{\sqrt{a_1^2-\lambda^2}}{\sqrt{\lambda^2-a_2^2}} \Rightarrow \lambda_n=\lambda_1,\lambda_2,\ldots$$

- **相应的本征函数**

$$X_n(z)=\begin{cases} B_n\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda_n^2}\,z\right) & (0<z<h) \\ B_n\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda_n^2}\,h\right)e^{\sqrt{\lambda_n^2-a_2^2}\,(z-h)} & (h<z<\infty) \end{cases}$$

■ 问题：本征方程存在多少个根?

$$y = h\sqrt{a_1^2 - \lambda^2}; a = h\sqrt{a_1^2 - a_2^2}$$

$$\Downarrow$$

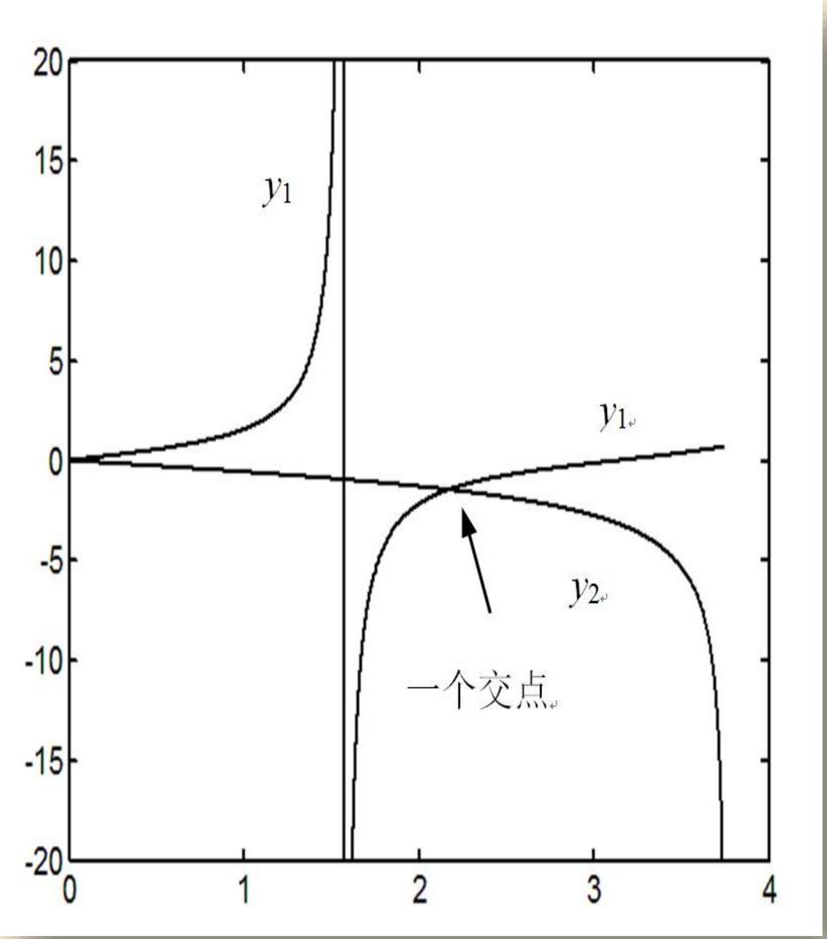
$$\tan(y) = -\frac{y}{\sqrt{a^2 - y^2}}$$

图像法解方程

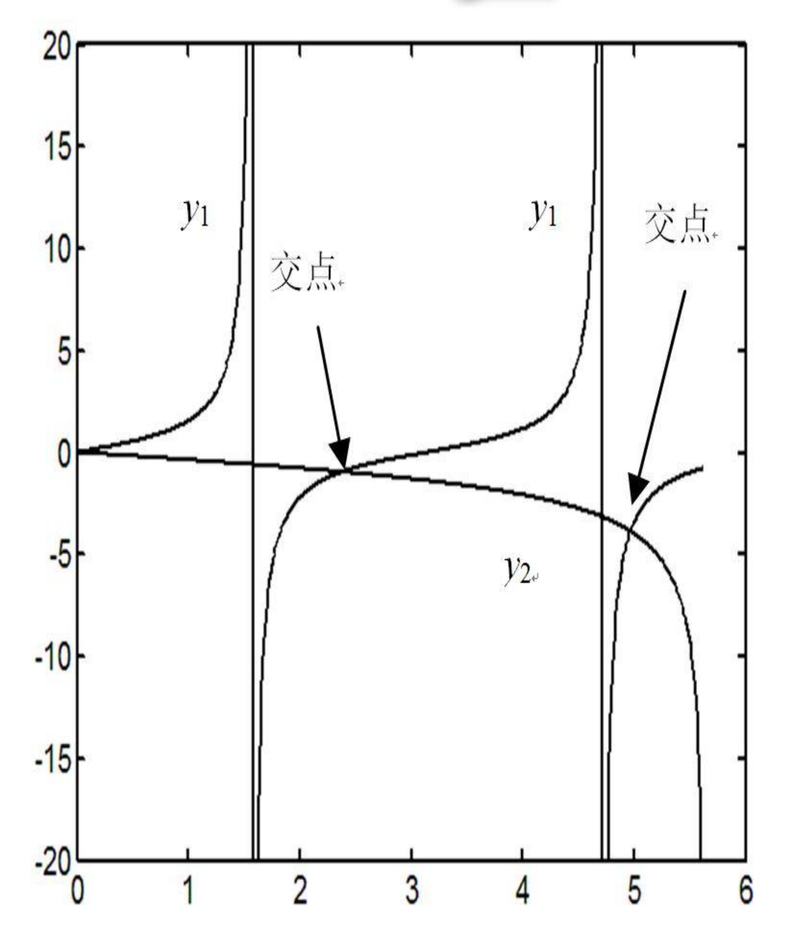
$$y_1 = \tan(y);\ y_2 = -\frac{y}{\sqrt{a^2 - y^2}}$$

渐近线方程

$$y_1 = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi;\ y_2 = a$$

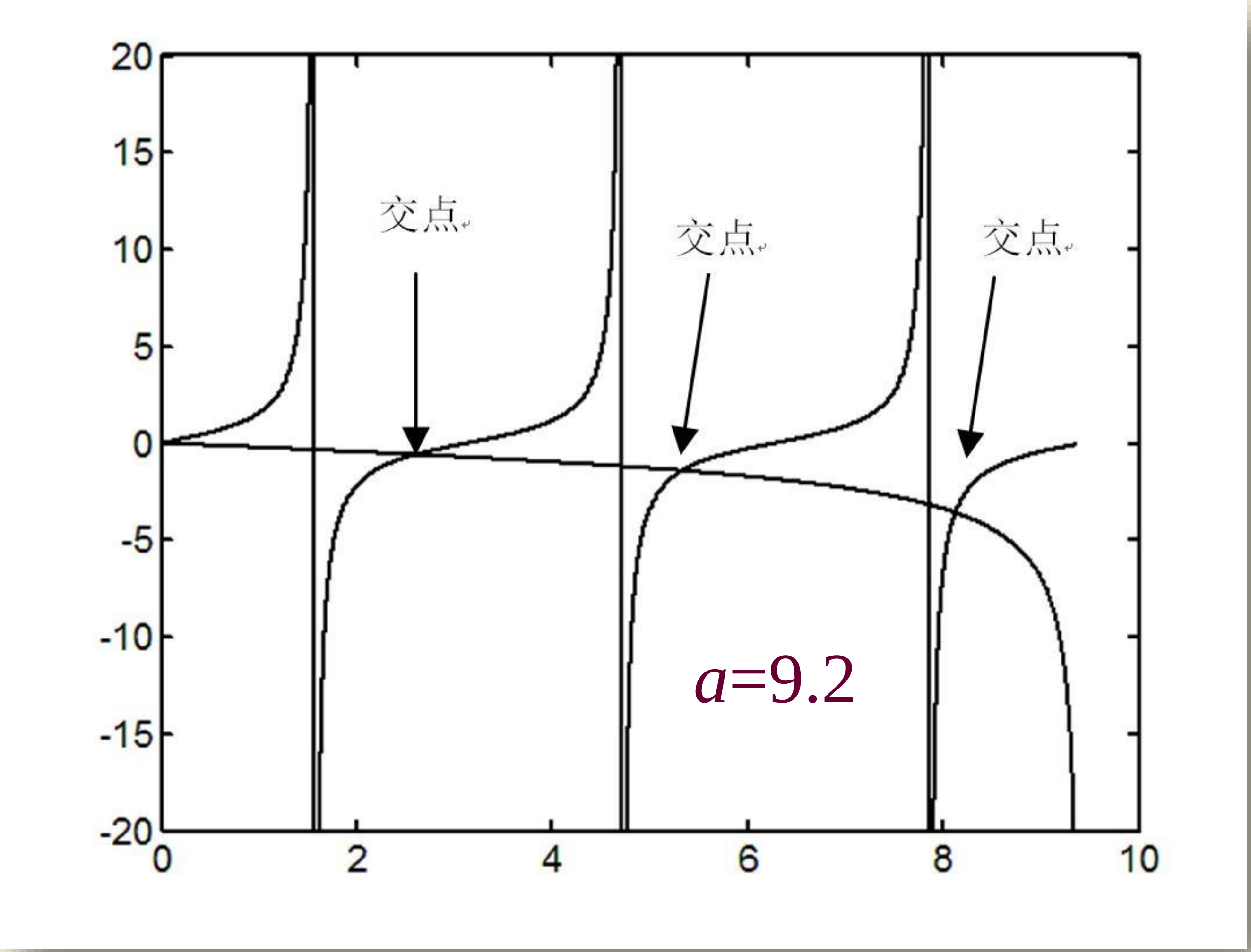


a=3.7



a=5.6

交点数与a的大小有关。本征值只有有限个，不可能构成完备系



③ $\lambda > a_1, a_2$

$$X_1(z) = A\cosh\left(\sqrt{\lambda^2 - a_1^2}\,z\right) + B\sinh\left(\sqrt{\lambda^2 - a_1^2}\,z\right)$$

$$X_2(z) = C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2 - a_2^2}\,z\right) + D\exp\left(\sqrt{\lambda^2 - a_2^2}\,z\right)$$

$$X_1(0) = 0 \Rightarrow A = 0; \quad \lim_{z\to\infty} X_2(z) < \infty \Rightarrow D = 0$$

$$X_1(z) = B\sinh\left(\sqrt{\lambda^2 - a_1^2}\,z\right); X_2(z) = C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2 - a_2^2}\,z\right)$$

$$X_1(h-0) = X_2(h+0); X_1'(h-0) = X_2'(h+0)$$

$$B\sinh\left(\sqrt{\lambda^2-a_1^2}\,h\right)=C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,h\right)$$

$$\sqrt{\lambda^2-a_1^2}\,B\cosh\left(\sqrt{\lambda^2-a_1^2}\,h\right)=-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,C\exp\left(-\sqrt{\lambda^2-a_2^2}\,h\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\tanh\left(\sqrt{\lambda^2-a_1^2}\,h\right)=-\frac{\sqrt{\lambda^2-a_1^2}}{\sqrt{\lambda^2-a_2^2}}$$

$$y=h\sqrt{\lambda^2-a_1^2}$$

$$a=h\sqrt{a_1^2-a_2^2}$$

$$\Rightarrow \tanh(y)=-\frac{y}{\sqrt{y^2+a^2}}$$

——无正实根，不存在本征解

本征函数系的完备性?

$$X_n(z)=\begin{cases} B_n\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda_n^2}\,z\right) & (0<z<h) \\ B_n\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda_n^2}\,h\right)e^{\sqrt{\lambda_n^2-a_2^2}\,(z-h)} & (h<z<\infty) \end{cases} \quad (n=1,2,\ldots M)$$

$$(a_2<\lambda_n<a_1)$$

$$X(\lambda,z)\equiv\begin{cases} B\sin\left(\sqrt{a_1^2-\lambda^2}\,z\right) & (0<z<h) \\ C(B)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}\,z}+D(B)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{a_2^2-\lambda^2}\,z} & (h<z<\infty) \end{cases}$$

$$(0<\lambda<a_2)$$

$$\Downarrow$$

$$f(z)\cong\sum_{n=1}^{M}A_nX_n(z)+\int_0^{a_2}A(\lambda)X(\lambda,z)\mathrm{d}\lambda$$

例2 量子力学：一维势井中的微观粒子

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

——E为待求的能量本征值。势函数为

$$U(x)=\begin{cases}-U_0, & |x|\le a \\ 0, & |x|>a\end{cases};\quad (U_0>0)$$

边界条件

$$\psi(x)|_{x=\pm a+0}=\psi(x)|_{x=\pm a-0}$$

$$\psi'(x)|_{x=\pm a+0}=\psi'(x)|_{x=\pm a-0}$$

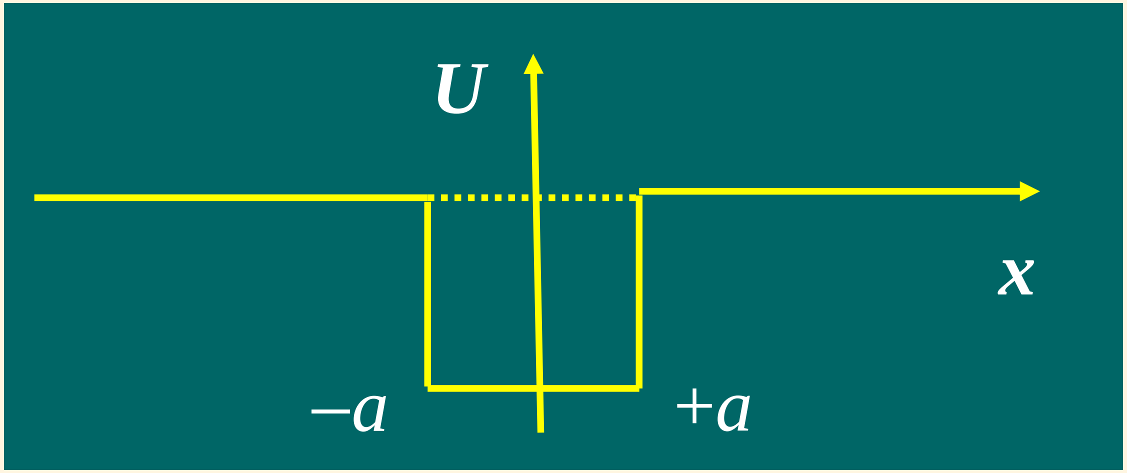
前一个：物理边界条件；后一个：数学边界条件

①本征值E>0 (连续谱，散射态)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+(\beta^2+k^2)\psi=0,\quad |x|<a$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+k^2\psi=0,\quad |x|>a$$

$$k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2};\beta^2\equiv\frac{2mU_0}{\hbar^2}$$



$$\psi(x)=\begin{cases} C\exp(\mathrm{i}kx)+F\exp(-\mathrm{i}kx), & -\infty<x<-a \\ A\sin(\sqrt{\beta^2+k^2}x)+B\cos(\sqrt{\beta^2+k^2}x), & |x|<a \\ D\exp(\mathrm{i}kx)+G\exp(-\mathrm{i}kx) & +a<x<+\infty \end{cases}$$

——由于存在6个待定系数，而仅仅只有4个方程，故此时*k*(也即*E*)是任意的，只要*E*>0．因此，本征值*E*(或者*k*)构成连续谱。

■ 井内对称解

$$\psi^c(k,x)=\begin{cases} C_c\exp[\mathrm{i}k(x+a)]+F_c\exp[-\mathrm{i}k(x+a)], & -\infty<x<-a \\ B_c\cos(\sqrt{\beta^2+k^2}x), & |x|<a \\ D_c\exp[\mathrm{i}k(x-a)]+G_c\exp[-\mathrm{i}k(x-a)], & +a<x<+\infty \end{cases}$$

■ 井内反对称解

$$\psi^{s}(k,x)=\begin{cases} C_s\exp[\mathrm{i}k(x+a)]+F_s\exp[-\mathrm{i}k(x+a)], & -\infty<x<-a \\ B_s\sin(\sqrt{\beta^2+k^2}x), & |x|<a \\ D_s\exp[\mathrm{i}k(x-a)]+G_s\exp[-\mathrm{i}k(x-a)] & +a<x<+\infty \end{cases}$$

②本征值E<0 (有限个分立谱，局域态)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\delta^2\psi=0,\ \ |x|<a;\ \ \delta=\sqrt{2m(U_0+E)/\hbar^2}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\alpha^2\psi=0,\ |x|>a;\ \ \alpha=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$$

$$\Downarrow$$

$$\psi(x)=\begin{cases} A\exp(\alpha x)+F\exp(-\alpha x), & -\infty<x<-a \\ B\cos\delta x+C\sin\delta x, & |x|<a \\ D\exp(-\alpha x)+G\exp(\alpha x), & a<x<+\infty \end{cases}$$

■ 井内对称解

$$\psi^c(x)=\begin{cases} A_c\exp[\alpha(x+a)], & -\infty<x<-a \\ B_c\cos\delta x, & |x|<a \\ D_c\exp[-\alpha(x-a)], & a<x<+\infty \end{cases}$$

$$\delta\tan\delta a=\alpha;\quad \delta=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0+E)},\quad \alpha=\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

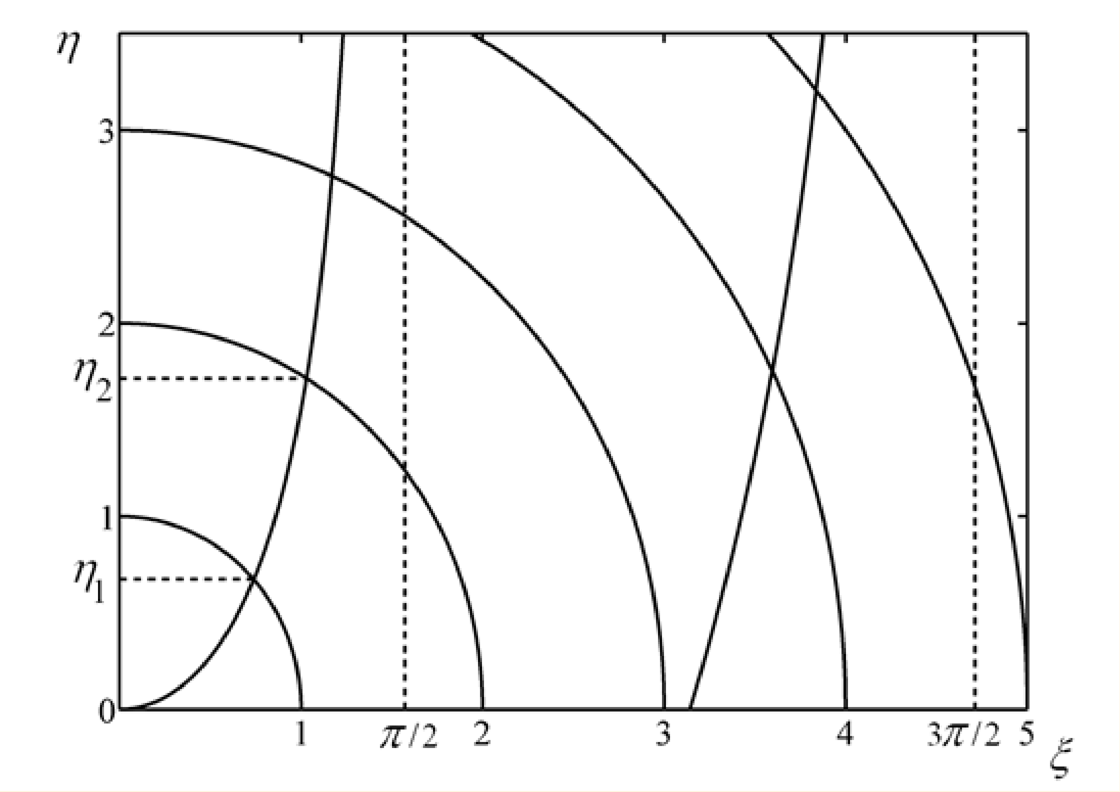
$$\psi_v^c(x)=\begin{cases} B_c\cos\delta a\exp[\alpha(x+a)], & -\infty<x<-a \\ B_c\cos\delta x, & |x|<a \\ B_c\cos\delta a\exp[-\alpha(x-a)], & a<x<+\infty \end{cases}$$

本征方程的解

$$\xi = \delta a$$
$$\eta = \alpha a$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} U_0 a^2 \\ \eta = \xi \tan \xi \end{cases} \Rightarrow E_\nu^c = -\frac{\eta_\nu^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$(\nu = 1, 2, \cdots, N)$$



■ 井内反对称解

$$\psi^{s}(x)=\begin{cases} A_s \exp[\alpha(x+a)], & -\infty<x<-a \\ B_s \sin\delta x, & |x|<a \\ D_s \exp[-\alpha(x-a)], & a<x<+\infty \end{cases}$$

$$\boxed{\alpha\tan\delta a+\delta=0;\quad \delta=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0+E)},\quad \alpha=\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}}$$

$$\psi_{v}^{s}(x)=\begin{cases} -B_s \sin\delta a\exp[\alpha(x+a)], & -\infty<x<-a \\ B_s \sin\delta x, & |x|<a \\ B_s \sin\delta a\exp[-\alpha(x-a)], & a<x<+\infty \end{cases}$$

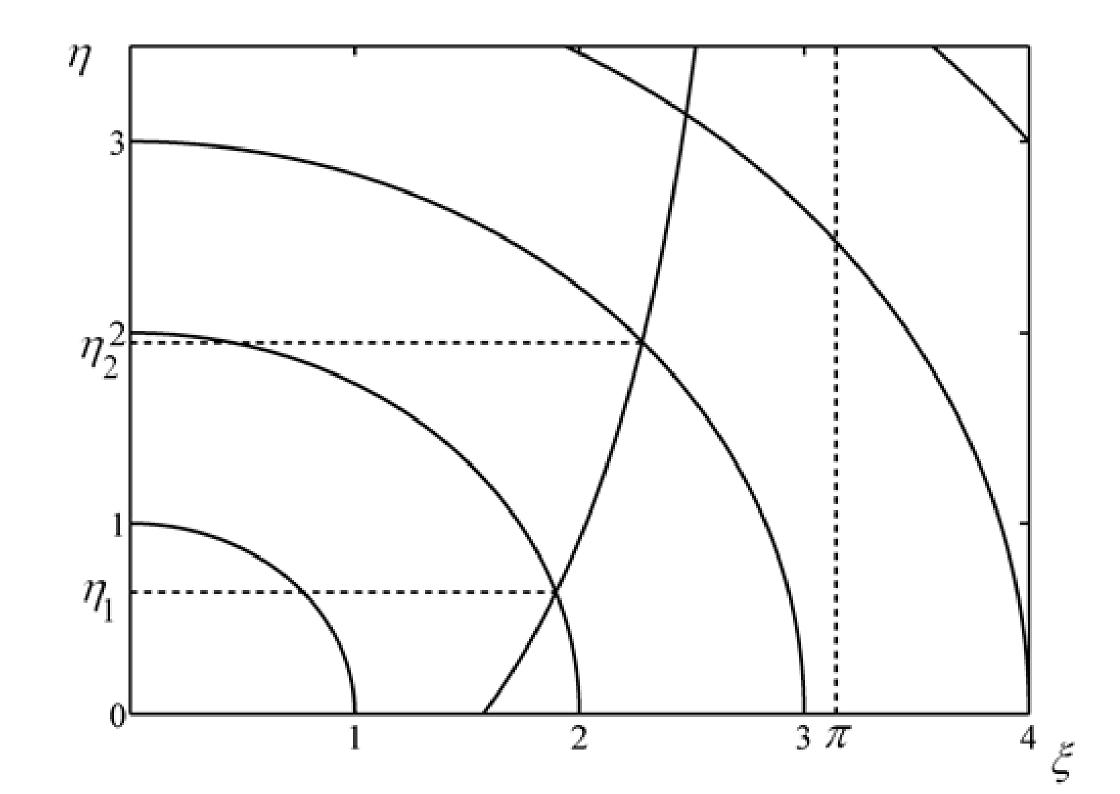
本征方程的解

$$\xi = \delta a \qquad \eta = \alpha a$$

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} U_0 a^2 \\ \eta = -\xi \cot \xi \end{cases}$$

$$E_\nu^s = -\frac{\eta_\nu^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$(\nu = 1, 2, \cdots, M)$$



本征函数系的完备性?

连续谱

$$\psi^{c}(k,x);\psi^{s}(k,x)\quad (E>0;k\equiv\pm\sqrt{2mE/\hbar^{2}})$$

分立谱

$$\psi_{\nu}^{c}(x)(\nu=1,2,\ldots,N);\quad \psi_{\nu}^{s}(x)(\nu=1,2,\ldots,M);\ (E<0)$$

$$\Downarrow$$

$$f(x)\cong\sum_{\nu=1}^{N}A_{\nu}^{c}\psi_{\nu}^{c}(x)+\sum_{\nu=1}^{M}A_{\nu}^{s}\psi_{\nu}^{s}(x)$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}A^{c}(k)\psi^{c}(k,x)\mathrm{d}k+\int_{-\infty}^{\infty}A^{s}(k)\psi^{s}(k,x)\mathrm{d}k$$

■ 简单的Schrodinger方程的初值问题

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi(x,t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\psi(x,t)\big|_{t=0}=\psi_0(x)$$

$$\psi(x,t)=\sum_{\nu=1}^{N}A_\nu^c\psi_\nu^c(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\nu^c t/\hbar}+\sum_{\nu=1}^{M}A_\nu^s\psi_\nu^s(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_\nu^s t/\hbar}$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}A^c(k)\psi^c(k,x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\,\mathrm{d}k\ \ (E=k^2\hbar^2/2m)$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}A^s(k)\psi^s(k,x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\,\mathrm{d}k\ \ (E=k^2\hbar^2/2m)$$

9.4 正交多项式展开

■一般性质

$$F_n(x)=\frac{1}{\rho(x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(\rho s^n)\ (n=0,1,2,\dots)$$

如果

- **$F_1(x)$是1阶多项式;**
- **$s(x)$至多是x的2阶多项式;**
- **在开区间 (a,b), $\rho(x)>0$, 可积，并且满足**

$$\rho(a)s(a)=\rho(b)s(b)=0$$

则$F_n(x)$ 是n阶多项式，且带权$\rho(x)$正交

$$\int_a^b F_n(x)F_m(x)\rho(x)\mathrm{d}x = N_{nm}^2\delta_{nm}$$

- **$F_1(x)$是1阶多项式**

$$F_1(x) = \frac{1}{\rho(x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}[\rho(x)s(x)] = C_0 + C_1 x$$

- **s=constant C=1(不失一般性)**

$$F_1(x) = \frac{\rho'(x)}{\rho(x)} = C_0 + C_1 x$$

$$\Downarrow$$

$$\rho(x) = \exp\left(C_0 x + \frac{1}{2}C_1 x^2\right)$$

■ **在开区间 (a,b), $\rho(x)>0$, 可积，并且满足**

$$\rho(a)s(a) = \rho(b)s(b)=0$$

$$\rho(a)s(a) = \exp\left(C_0 a + \frac{1}{2}C_1 a^2\right) = 0$$

$$\rho(b)s(b) = \exp\left(C_0 b + \frac{1}{2}C_1 b^2\right) = 0$$

$$\boxed{\begin{gathered}(a,b)\to(-\infty,\infty)\\ C_1<0\end{gathered}}$$

$$\rho(x) = \exp\left[-\frac{1}{2}|C_1|\left(x-\frac{C_0}{|C_1|}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{C_0^2}{|C_1|}\right]$$

$$= e^{C_0^2/2|C_1|}\exp\left[-\frac{1}{2}|C_1|\left(x-\frac{C_0}{|C_1|}\right)^2\right]$$

注意到

$$F_n(x)=\frac{1}{\rho(x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(\rho s^n),\quad (n=0,1,2,\ldots)$$

$\rho(x)$系数可除去，并且通过适当的坐标变换

$$\rho(x)=\exp(-y^2);\, y=\sqrt{\frac{|C_1|}{2}}\left(x-\frac{C_0}{|C_1|}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$H_n(y)=(-1)^n\frac{1}{e^{-y^2}}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}y^n}e^{-y^2}$$

——Hermite多项式

■***s=c+dx***

$$\frac{1}{\rho(x)s(x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\rho(x)s(x)\right]=\frac{C_0+C_1x}{s(x)}$$

$$\rho(x)s(x)=A\exp\int\left(\frac{C_0+C_1x}{c+dx}\right)dx$$

$$\rho(x)s(x)=A\exp\int\left(\frac{C_1}{d}+\frac{C_0-C_1c/d}{c+dx}\right)\mathrm{d}x$$

$$=(c+dx)^{\alpha}A\exp\left(\beta x\right)$$

$$\alpha=\frac{\left(C_0-C_1c/d\right)}{d},\beta=\frac{C_1}{d}$$

94

- **在开区间 (a,b), $\rho(x)>0$, 可积，并且满足**

$$\rho(a)s(a)=\rho(b)s(b)=0$$

$$\rho(a)s(a)=(c+da)^{\alpha}A\exp\left(\beta a\right)=0$$

$$\rho(b)s(b)=(c+db)^{\alpha}A\exp\left(\beta b\right)=0$$

$$c+da=0\Rightarrow a=-c/d,\alpha>0$$

$$b\to\infty,\beta<0$$

$$\rho(x)=(c+dx)^{\alpha-1}A\exp\left(-|\beta|x\right)$$

通过适当变换，可取*d*=1,*c*=0,|*β*|=1,*a*=0,*b*= ∞

$$\rho(x)=x^{\nu}\exp\left(-x\right),\nu=\alpha-1>-1$$

$$s(x)=x$$

$$\Downarrow$$

$$L_n^{\nu}(x)\sim\frac{1}{x^{\nu}\exp(-x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[x^{\nu+n}\exp(-x)]$$

——**连带Laguerre多项式**

$$L_n^0(x)=L_n(x)\sim\frac{1}{\exp(-x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[x^n\exp(-x)]$$

——**Laguerre多项式**

■ $s=c+dx+ex^2$

$$\rho(x)s(x)=A\exp\int\left(\frac{C_0+C_1x}{c+dx+ex^2}\right)\mathrm{d}x$$

Jacobi 多项式

$$P_n^{\mu,\nu}(x)\sim\frac{1}{(1+x)^\mu(1-x)^\nu}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(1+x)^\mu(1-x)^\nu(1-x^2)^n]$$

$$\rho(x)=(1+x)^\mu(1-x)^\nu;\quad s(x)=1-x^2$$

$$\mu,\nu>-1;\quad (a,b)=(-1,+1)$$

■ **$\mu=\nu=0$ Legendre 多项式**

$$P_n(x)=P_n^{0,0}(x)\sim\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(1-x^2)^n;\rho(x)=1;\ (a,b)=(-1,+1)$$

$\mu=\nu=1/2$ 第一类Chebyshev 多项式

$$C_n^{(1)}=P_n^{1/2,1/2}(x)\sim\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[\sqrt{1-x^2}(1-x^2)^n\right]$$

$$\rho(x)=\sqrt{1-x^2};(a,b)=(-1,+1)$$

—任意连续函数的多项式逼近中，最佳逼近

$\mu=\nu=-1/2$ 第二类Chebyshev 多项式

$$C_n^{(2)}=P_n^{-1/2,-1/2}(x)\sim\sqrt{1-x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}(1-x^2)^n\right]$$

$$\rho(x)=1/\sqrt{1-x^2};(a,b)=(-1,+1)$$

满足的微分方程

$$F_n(x)=\frac{1}{\rho(x)}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(\rho s^n)\ (n=0,1,2,\ldots)$$

$$a(x)\frac{\mathrm{d}^2F_n(x)}{\mathrm{d}x^2}+b(x)\frac{\mathrm{d}F_n(x)}{\mathrm{d}x}+c(x)F_n(x)+\lambda_nF_n(x)=0$$

$$a(x)=a_2x^2+a_1x+a_0$$
$$b(x)=b_1x+b_0;c(x)=c_0=0$$

二阶方程存在多项式解的条件

写成S-L形式

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}F_n(x)}{\mathrm{d}x}\right]=\lambda_n\rho(x)F_n(x)$$

$$p(x)=\exp\left[\int\frac{b(x)}{a(x)}\mathrm{d}x\right];q(x)=-\frac{c(x)}{a(x)}p(x)=0$$

$$\rho(x)=\frac{p(x)}{a(x)};\quad \lambda_n=n(a_2n+b_1-a_2)(n=0,1,2,\dots)$$

■三个典型的多项式

①Legendre多项式——有限区域的正交多项式

②Laguerre多项式——半无限区域的正交多项式

③Hermite多项式——无限区域的正交多项式

——物理中最常见的，奇异S-L本征值问题的解.

❑Legendre 多项式展开

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right]=\lambda\varphi,\quad x\in(-1,1)$$

$$\varphi(\pm 1)<\infty$$

本征函数为Legendre多项式, 归一化的本征函数

$$\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2n+1}{2}}P_n(x);\lambda_n=n(n+1),\ (n=0,1,2\cdots)$$

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n$$

对任一函数$f(x) \in L^2[-1,1]$平方可积

$$\int_{-1}^{1} f^2(x)\mathrm{d}x < \infty$$

总可展成Legendre级数

$$f(x) \cong \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{2n+1}{2}\right)(P_n, f)P_n(x)$$

- **Hermite多项式展开**

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(e^{-x^2}\frac{\mathrm{d}H_n}{\mathrm{d}x}\right) = \lambda_n e^{-x^2}H_n, x \in (-\infty, \infty)$$

$$H_n(\pm\infty) < \infty$$

本征函数为Hermite多项式, 归一化的本征函数

$$\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}H_n(x),\lambda_n=2n\quad(n=0,1,2,\ldots\ldots)$$

Fourier积分算子的本征函数

■**前几个Hermite多项式**

$$H_0(x)=1;\quad H_1(x)=2x$$

$$H_2(x)=4x^2-2;H_3(x)=8x^3-12x$$

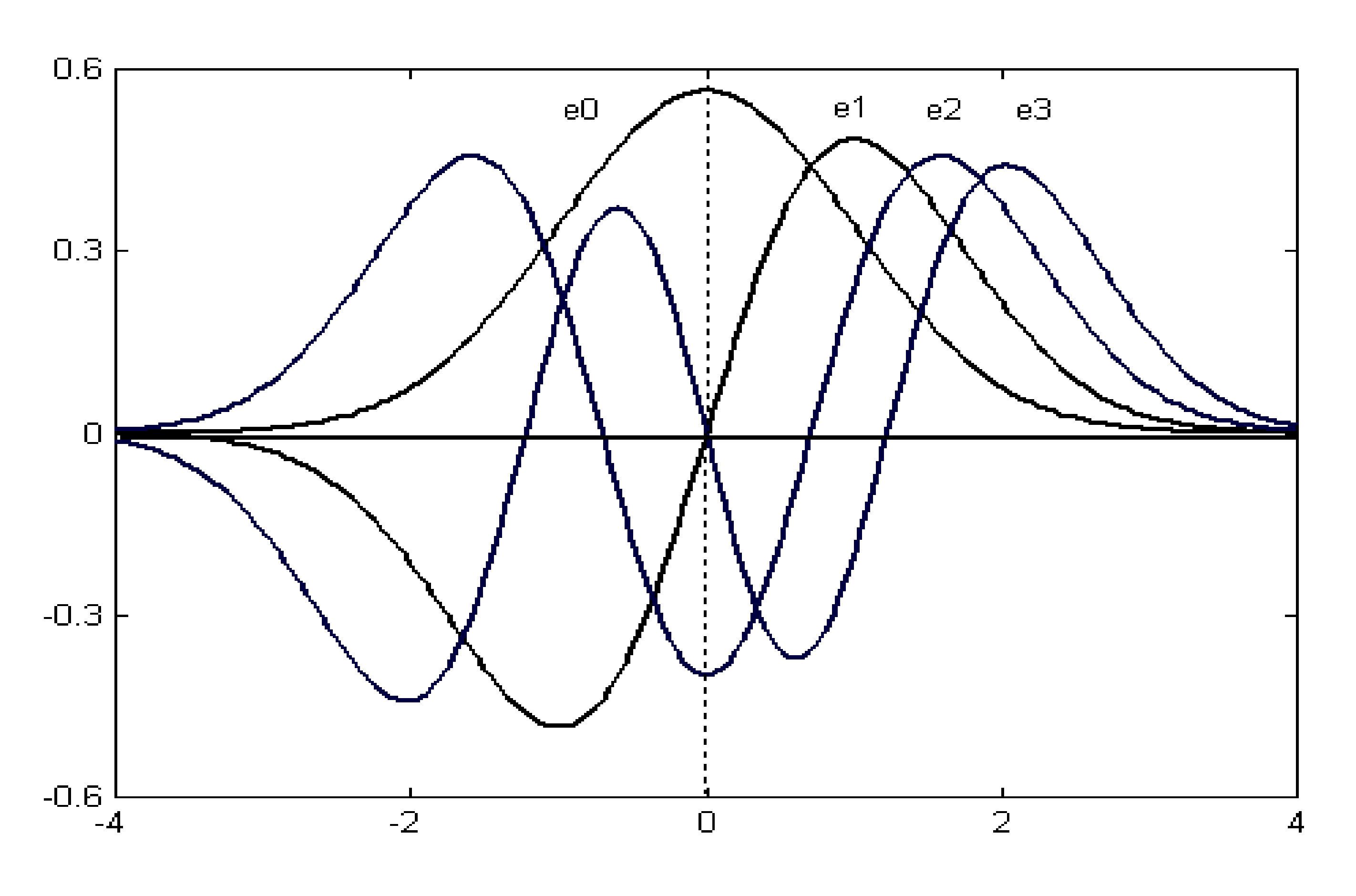
对任一带权平方可积函数

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-x^2)\,|\,f(x)\,|^2\mathrm{d}x<\infty$$

可展成广义Fourier级数

$$f(x)\cong\sum_{n=0}^{\infty}(\varphi_n,f)\,\varphi_n(x)$$

Hermite多项式图像 $e_n(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}e^{-x^2/2}H_n(x)$



❑Laguerre多项式展开

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(xe^{-x}\frac{\mathrm{d}L_n}{\mathrm{d}x}\right)=\lambda_n e^{-x}L_n, x\in(0,\infty)$$

$$L_n(\infty)<\infty$$

本征函数为Laguerre 多项式, 归一化的本征函数

$$\varphi_n(x)=L_n(x);\ \lambda_n=n,(n=0,1,2,\ldots..)$$

$$L_n(x)=\frac{1}{n!}\frac{1}{e^{-x}}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n e^{-x})$$

对任一带权平方可积函数

$$\int_0^{\infty}\exp(-x)\,|\,f(x)\,|^2 dx<\infty$$

可展成广义Fourier级数

$$f(x) \cong \sum_{n=0}^{\infty} (\varphi_n, f)\varphi_n(x)$$

前几个Laguerre多项式

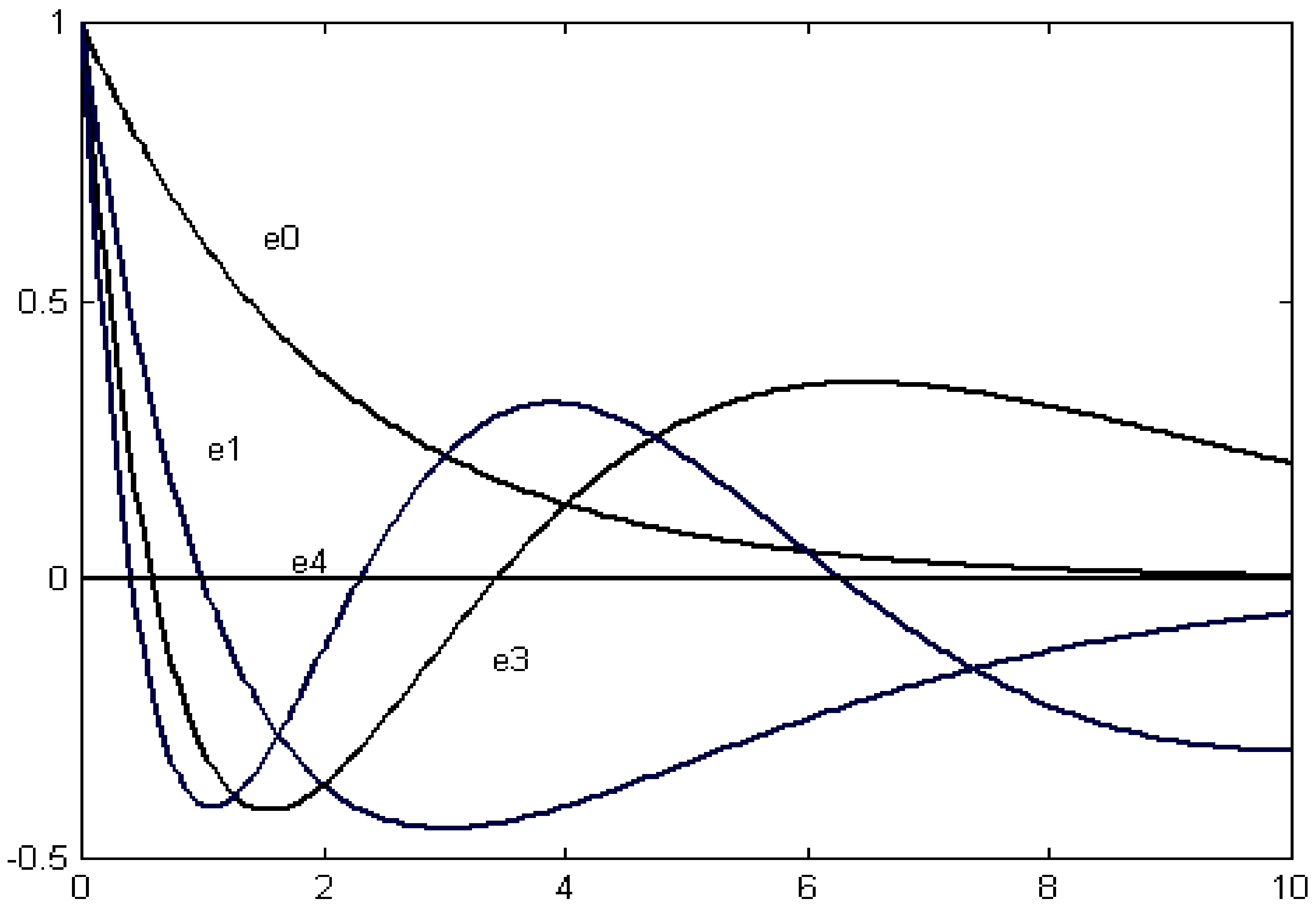
$$L_0(x) = 1; \quad L_1(x) = 1 - x$$

$$L_2(x) = 1 - 2x + \frac{1}{2}x^2$$

$$L_3(x) = 1 - 3x + \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^3$$

Laguerre 多项式图像

$$e_n(x) = e^{-x/2}L_n(x)$$


1
0.5
0
-0.5
0
2
4
6
8
10
e0
e1
e4
e3

9.5 一般Hermite算子的本征值问题

- **函数空间$L^2[G]$**

定义在空间区域G上的全部平方可积函数$f(\mathbf{r})$组成的函数空间

$$\int_G |f(\mathbf{r})|^2 \mathrm{d}^3\mathbf{r} < \infty$$

- **$L^2[G]$的内积—可以讨论二个函数的"角度"**

二个函数的内积定义为

$$(u,v) \equiv \int_G u^*(\mathbf{r})v(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}$$

或者

$$(u,v) \equiv \int_G \rho(\mathbf{r})u^*(\mathbf{r})v(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}$$

权函数 $\rho(\mathbf{r})\geq 0$

■ 函数正交性，如果

$$(u,v)\equiv\int_G \rho(\boldsymbol{r})u^*(\boldsymbol{r})v(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0$$

■ $L^2[G]$的函数的模—可以讨论函数的“长度”

$$\|u\|=\sqrt{(u,u)}\equiv\sqrt{\int_G \rho(\boldsymbol{r})|u(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}$$

■ 函数归一化，如果

$$\|u\|^2\equiv\int_G \rho(\boldsymbol{r})|u(\boldsymbol{r})|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=1$$

一般取 $u(\boldsymbol{r})\Rightarrow u(\boldsymbol{r})/\|u\|$ 可使平方可积函数归一化。

■ 零函数，如果

$$\|u\| = \sqrt{\int_G \rho(\mathbf{r})\,|u(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}} = 0$$

则称$u(r)$为零函数！—零函数并不意味$u(r)$恒为零，不排除零测度点的变化。

■ $L^2[G]$的度量—可以讨论二个函数的“距离”

$L^2[G]$的任意二个函数的度量为

$$d \equiv \|u - v\| = \sqrt{\int_G \rho(\mathbf{r})\,|u(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r})|^2\, d^3\mathbf{r}}$$

如果$d=0$, $u(\mathbf{r}) \approx v(\mathbf{r})$, 即几乎处处相等。

■ 函数系列的完备性—$L^2[G]$上的函数系列

$$\{u_i(\boldsymbol{r})\} \quad (i=0,1,2,\dots)$$

称为完备系，如果对$L^2[G]$上的任意函数 $f(\boldsymbol{r})$，在均方平均收敛的意义上

$$\lim_{N\to\infty}\int_G \left| f(\boldsymbol{r}) - \sum_{i=0}^{N} f_i u_i(\boldsymbol{r}) \right|^2 \rho(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0$$

即任意平方可积函数$f(\boldsymbol{r})$可展开成广义Fourier级数

$$f(\boldsymbol{r}) \approx \sum_{i=0}^{\infty} f_i u_i(\boldsymbol{r})$$

■ 共轭算子

$L^2[G]$ 空间上的线性算子(包括微分算子和积分算子)的共轭算子定义

$$(\boldsymbol{L}\psi_1,\psi_2)=(\psi_1,\boldsymbol{L}^{+}\psi_2)$$

或者

$$(\psi_1,\boldsymbol{L}\psi_2)=(\boldsymbol{L}^{+}\psi_1,\psi_2)$$

上式可写成

$$\boxed{\int_G \rho(\boldsymbol{r})[\boldsymbol{L}\psi_1(\boldsymbol{r})]^{*}\psi_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_G \rho(\boldsymbol{r})\psi_1^{*}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{L}^{+}\psi_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}$$

或者

$$\int_G \rho(\boldsymbol{r})\psi_1^{*}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{L}\psi_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_G \rho(\boldsymbol{r})[\boldsymbol{L}^{+}\psi_1^{*}(\boldsymbol{r})]\psi_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

■ Hermite对称算子

如果$H=H^{+}$则称为自厄算子或者Hermite对称算子，有关系式

$$(\boldsymbol{H}\psi_1,\psi_2)=(\psi_1,\boldsymbol{H}\psi_2)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\int_G (\boldsymbol{H}\psi_1)^*\psi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_G \psi_1^*\boldsymbol{H}\psi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}$$

■ Hermite对称算子的本征值问题

$$\boldsymbol{H}\psi=\lambda\psi$$

——求上述方程的非零解，以及非零解存在的条件

■ Hermite对称算子的三个基本性质

① Hermite算子的本征值必是实数，且本征值是分立的;

② 对应于不同本征值的本征函数相互正交:

$$\int_G \varphi_i(\boldsymbol{r})\varphi_j^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \delta_{ij}$$

③ 设Hermite对称算子H的本征值可数

$$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n \cdots$$

相应的本征函数系正交归一. 如果: (1)最小本征值有限；(2)最大本征值无限。则本征函数系构成$L^2[G]$上的完备系，对$L^2[G]$上的任意函数 $f(r)$,

可展开成广义Fourier级数

$$f(\boldsymbol{r}) \cong \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(\boldsymbol{r})$$

其中, 广义Fourier系数为

$$a_n \equiv (\varphi_n, f) = \int_G \varphi_n^*(\boldsymbol{r}) f(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

(证明：忽略, 与Sturm-Liouville本征值问题类似)

- **简并问题**

- **定义：对应于一个本征值，有二个以上的线性无关的本征函数，称这个本征值是简并的**

- 二阶常微分方程：一个本征值至多两个线性无关的本征函数——Sturm-Liouville型本征值问题是非简并的
- 偏微分方程：一个本征值有多个线性无关的本征函数

——产生简并的物理原因：空间的对称性。对称性越高，简并度越高——如球、正方体区域。

- 正算子

如果对一切H作用的函数ψ均有

$$\frac{(\psi, \boldsymbol{H}\psi)}{\|\psi\|^2} > 0$$

则算子H称为正算子。其物理意义：量子力学中能量本征值大于零(或者小于零）；经典波(声波或电磁波)本征振动频率大于零.

例1 Laplace算子$H=-\nabla^2$，在G内，$\varphi\in C^2$; 在∂G上，$\varphi\in C^1$，并且满足边界条件

$$\left.\left(\alpha\varphi+\beta\frac{\partial\varphi}{\partial n}\right)\right|_{\partial G}=0$$

■ Hermite 对称算子 由Green公式

$$\int_G(\varphi_1^*\nabla^2\varphi_2-\varphi_2\nabla^2\varphi_1^*)\mathrm{d}\tau=\iint_{\partial G}\left(\varphi_1^*\frac{\partial\varphi_2}{\partial n}-\varphi_2\frac{\partial\varphi_1^*}{\partial n}\right)\mathrm{d}S$$

另一方面(要求系数是实的)

$$\left.\left(\alpha\varphi_1^* + \beta\frac{\partial\varphi_1^*}{\partial n}\right)\right|_{\partial G} = 0;\left.\left(\alpha\varphi_2 + \beta\frac{\partial\varphi_2}{\partial n}\right)\right|_{\partial G} = 0$$

$$\left.\left(\varphi_1^*\frac{\partial\varphi_2}{\partial n} - \varphi_2\frac{\partial\varphi_1^*}{\partial n}\right)\right|_{\partial G} \equiv 0$$

α，β存在非零解的条件

$$(\varphi_1, \boldsymbol{H}\varphi_2) = \int_G \varphi_1^*\nabla^2\varphi_2 \mathrm{d}\tau = \int_G \varphi_2\nabla^2\varphi_1^* \mathrm{d}\tau$$

$$= (\boldsymbol{H}\varphi_1, \varphi_2)$$

因此，Laplace算子在边界条件下

$$\left(\alpha\varphi+\beta\frac{\partial\varphi}{\partial n}\right)\bigg|_{\partial G}=0$$

是Hermite对称算子(要求系数是实的)

例2 证明Laplace算子$H=-\nabla^2$的本征函数在第一或者第二类边界条件下满足正交关系

$$\int_G \nabla\varphi_i(\boldsymbol{r})\cdot\nabla\varphi_j^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\lambda_i\delta_{ij}$$

利用矢量运算关系

$$\nabla\varphi_i(\boldsymbol{r})\cdot\nabla\varphi_j^*(\boldsymbol{r})=\nabla\cdot[\varphi_j^*(\boldsymbol{r})\nabla\varphi_i(\boldsymbol{r})]-\varphi_j^*(\boldsymbol{r})\nabla^2\varphi_i(\boldsymbol{r})$$

$$=\nabla\cdot[\varphi_j^*(\boldsymbol{r})\nabla\varphi_i(\boldsymbol{r})]+\lambda_i\varphi_j^*(\boldsymbol{r})\nabla^2\varphi_i(\boldsymbol{r})$$

等式作二边体积分

$$\int_G \nabla\varphi_i(\mathbf{r})\cdot\nabla\varphi_j^*(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}=\int_G \nabla\cdot[\varphi_j^*(\mathbf{r})\nabla\varphi_i(\mathbf{r})]\mathrm{d}^3\mathbf{r}+\lambda_i\int_G \varphi_i(\mathbf{r})\varphi_j^*(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}$$

$$=\iint_{\partial G}\varphi_j^*(\mathbf{r})\frac{\partial\varphi_i(\mathbf{r})}{\partial n}\mathrm{d}S+\lambda_i\int_G \varphi_i(\mathbf{r})\varphi_j^*(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}=\lambda_i\delta_{ij}$$

- **正算子**

$$(\varphi,\boldsymbol{H}\varphi)=-\int_G \varphi\nabla^2\varphi\,\mathrm{d}\tau=\int_G |\nabla\varphi|^2\mathrm{d}\tau-\iint_{\partial G}\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial n}\mathrm{d}S$$

利用边界条件得到

$$(\varphi,\boldsymbol{H}\varphi)=\int_G |\nabla\varphi|^2\,\mathrm{d}\tau+\begin{cases}\displaystyle\iint_{\partial G}\frac{\alpha}{\beta}|\varphi|^2\,\mathrm{d}S, & \beta\neq 0\\[2ex] \displaystyle\iint_{\partial G}\frac{\beta}{\alpha}\left|\frac{\partial\varphi}{\partial n}\right|^2\mathrm{d}S, & \alpha\neq 0\end{cases}$$

如果$\alpha/\beta\geq 0$或$\alpha/\beta\geq 0$, 则 $(\varphi, \boldsymbol{H}\varphi) > 0$, Laplace算子是正算子

例3 三维S-L算子

$$\boldsymbol{H} = -\nabla\cdot[p(\boldsymbol{r})\nabla] + q(\boldsymbol{r})$$

$$\left[\alpha(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) + \beta(\boldsymbol{r})\frac{\partial\phi(\boldsymbol{r})}{\partial n}\right]\Bigg|_{\partial G} = 0;\ p(\boldsymbol{r}) > 0, q(\boldsymbol{r}) \geq 0$$

$$\alpha(\boldsymbol{r})/\beta(\boldsymbol{r}) \geq 0;\ \beta(\boldsymbol{r})/\alpha(\boldsymbol{r}) \geq 0$$

广义Green公式

$$\int_G(\phi_1^*\boldsymbol{H}\phi_2 - \phi_2\boldsymbol{H}\phi_1^*)\mathrm{d}\tau = \iint_{\partial G} p(\boldsymbol{r})\left(\phi_2\frac{\partial\phi_1^*}{\partial n} - \phi_1^*\frac{\partial\phi_2}{\partial n}\right)\mathrm{d}S$$

证明： 由矢量恒等式

$$\phi_1^*\nabla\cdot(p\nabla\phi_2)=\nabla\cdot(p\phi_1^*\nabla\phi_2)-p(\nabla\phi_1^*)\cdot(\nabla\phi_2)$$

$$\phi_2\nabla\cdot(p\nabla\phi_1^*)=\nabla\cdot(p\phi_2\nabla\phi_1^*)-p(\nabla\phi_2)\cdot(\nabla\phi_1^*)$$

二式相减

$$\phi_1^*\nabla\cdot[p(\boldsymbol{r})\nabla\phi_2]-\phi_2\nabla\cdot[p(\boldsymbol{r})\nabla\phi_1^*]$$

$$=\nabla\cdot[p(\boldsymbol{r})(\phi_1^*\nabla\phi_2-\phi_2\nabla\phi_1^*)]$$

$$\int_G(\phi_1^*\boldsymbol{H}\phi_2-\phi_2\boldsymbol{H}\phi_1^*)\mathrm{d}\tau=-\int_G\nabla\cdot[p(\boldsymbol{r})(\phi_1^*\nabla\phi_2-\phi_2\nabla\phi_1^*)]\mathrm{d}\tau$$

$$=-\iint_{\partial G}p(\boldsymbol{r})(\phi_1^*\nabla\phi_2-\phi_2\nabla\phi_1^*)\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S$$

$$=\iint_{\partial G}p(\boldsymbol{r})\left(\phi_2\frac{\partial\phi_1^*}{\partial n}-\phi_1^*\frac{\partial\phi_2}{\partial n}\right)\mathrm{d}S$$

■ **Hermite对称性** 如果：α和β是实的

$$\alpha\phi_2+\beta\frac{\partial\phi_2}{\partial n}=0$$

$$\alpha\phi_1^*+\beta\frac{\partial\phi_1^*}{\partial n}=0$$

$$\Rightarrow\left(\phi_2\frac{\partial\phi_1^*}{\partial n}-\phi_1^*\frac{\partial\phi_2}{\partial n}\right)_{\partial G}=0$$

$$\Downarrow$$

$$\int_G\phi_1^*\boldsymbol{H}\phi_2\mathrm{d}\tau=\int_G(\boldsymbol{H}\phi_1^*)\phi_2\mathrm{d}\tau$$

——故H是Hermite对称算子

■ **正算子** 注意到条件

$$p(\boldsymbol{r})>0,q(\boldsymbol{r})\geq 0$$

$$\alpha(\boldsymbol{r})/\beta(\boldsymbol{r})\geq 0;\beta(\boldsymbol{r})/\alpha(\boldsymbol{r})\geq 0$$

$$\int_G (\phi^* \boldsymbol{H}\phi)\mathrm{d}\tau = \int_G \phi^* [-\nabla\cdot(p\nabla\phi) + q\phi]\mathrm{d}\tau$$

$$= -\int_G [\nabla\cdot(p\phi^*\nabla\phi) - p\,|\nabla\phi|^2]\mathrm{d}\tau + \int_G q\,|\phi|^2\,\mathrm{d}\tau$$

$$= \int_G (p\,|\nabla\phi|^2 + q\,|\phi|^2)\mathrm{d}\tau - \iint_{\partial G} p\phi^* \frac{\partial\phi}{\partial n}\mathrm{d}S$$

$$= \int_G (p\,|\nabla\phi|^2 + q\,|\phi|^2)\mathrm{d}\tau + \begin{cases} \displaystyle\iint_{\partial G} \frac{\alpha}{\beta} p\,|\phi|^2\,\mathrm{d}S, & \beta \neq 0 \\ \displaystyle\iint_{\partial G} \frac{\beta}{\alpha} p\left|\frac{\partial\phi}{\partial n}\right|^2 \mathrm{d}S, & \alpha \neq 0 \end{cases}$$

——故*H*是正的Hermite对称算子

例4 矩形域上二维Laplace算子的本征值问题

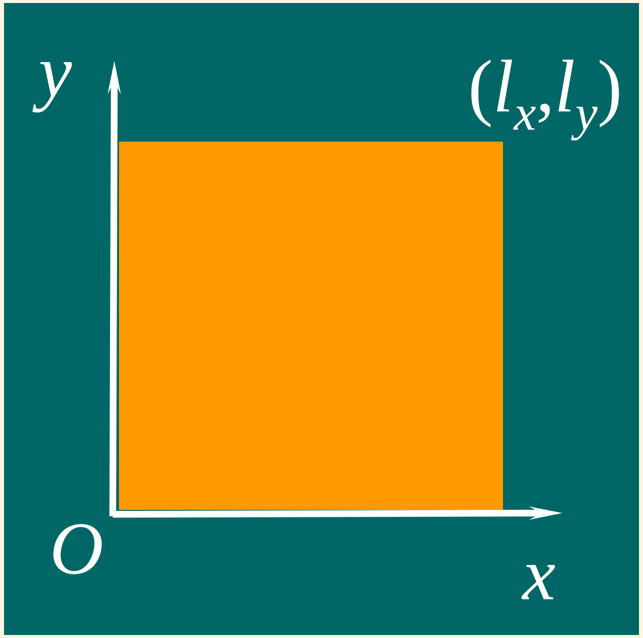
$$-\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)=\lambda\phi(x,y)\in G$$

$$\phi(x,y)\,|_{\partial G}=0$$

解

$$\lambda_{n,m}=\sqrt{\left(\frac{n\pi}{l_x}\right)^2+\left(\frac{m\pi}{l_y}\right)^2}$$

$$\phi_{nm}(x,y)=\sqrt{\frac{4}{l_x l_y}}\sin\frac{n\pi}{l_x}x\sin\frac{m\pi}{l_y}y$$



- **简并情况** **假定$l_x=3l_y=l$,**

$$\lambda_{n,m}=\sqrt{\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2+\left(\frac{3m\pi}{l}\right)^2}$$

$$\lambda_{6,1}=\sqrt{\left(\frac{6\pi}{l}\right)^2+\left(\frac{3\pi}{l}\right)^2}=\lambda_{3,2}$$

- **当l_x/l_y =有理数时，发生简并；**
- **当l_x/l_y = 无理数时，简并消失。**

$$\phi_{61}(x,y)=\sqrt{\frac{4}{l_x l_y}}\sin\frac{6\pi}{l}x\sin\frac{3\pi}{l}y$$

$$\phi_{32}(x,y)=\sqrt{\frac{4}{l_x l_y}}\sin\frac{3\pi}{l}x\sin\frac{6\pi}{l}y$$

同一本征值对应二个不同本征函数：二度简并

第8章 小 结

■讨论本征值问题的意义?

本征值：可观察性—经典波动，量子力学

本征函数：数学上的性质—完备性

■正则的S-L本征值和本征函数的基本性质

1.本征值是实数且非负

2.本征函数系构成正交、归一的完备系

3.本征值构成无限、可数的分立谱

4.本征值非简并

5.本征函数零点分布性质

■一般Hermite对称算子的基本性质

1.本征值是实数且非负

2.本征函数系构成正交、归一的完备系

3.本征值构成无限、可数的分立谱

■算子谱与空间的关系

■离散谱——封闭空间

$$f(\boldsymbol{r}) \cong \sum_{n=0}^{\infty} f_n \varphi_n(\boldsymbol{r}) \Longleftarrow \boldsymbol{H}\varphi_n = \lambda_n \varphi_n$$

■连续谱——开空间

$$f(\mathbf{r}) \cong \int f(\lambda)\varphi(\lambda,\mathbf{r})\mathrm{d}\lambda \Leftarrow \boldsymbol{H}\varphi = \lambda\varphi$$

■混合谱（离散谱+连续谱）——非均匀开空间

$$f(\mathbf{r}) \cong \sum_{n=0}^{M} f_n\varphi_n(\mathbf{r}) + \int f(\lambda)\varphi(\lambda,\mathbf{r})\mathrm{d}\lambda$$

$$\Uparrow$$

$$\boldsymbol{H}\varphi_n = \lambda_n\varphi_n \quad (n = 1, 2, \ldots, M)$$

$$\boldsymbol{H}\varphi = \lambda\varphi$$

■离散谱+连续谱——某个正交方向开空间

$$f(\mathbf{r}) \cong \sum_{n=0}^{M} \int f_n(\lambda)\varphi_n(\lambda,\mathbf{r})\mathrm{d}\lambda$$

■三个典型正交多项式

❑**Legendre 多项式——有限区域[*a*,*b*]**

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n$$

❑**Laguerre多项式——半无限区域(0,∞)**

$$L_n(x)=\frac{1}{n!}\frac{1}{e^{-x}}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n e^{-x})$$

❑**Hermite多项式展开**

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}$$

本征矢量和本征值的几何意义

$$f(\mathbf{r}) \cong c_1\varphi_1(\mathbf{r}) + c_2\varphi_2(\mathbf{r}) + c_3\varphi_3(\mathbf{r}) + \ldots + \ldots$$

$$\boldsymbol{H}f(\mathbf{r}) \cong c_1\boldsymbol{H}\varphi_1(\mathbf{r}) + c_2\boldsymbol{H}\varphi_2(\mathbf{r}) + c_3\boldsymbol{H}\varphi_3(\mathbf{r}) + \ldots + \ldots$$

$$= c_1\lambda_1\varphi_1(\mathbf{r}) + c_2\lambda_2\varphi_2(\mathbf{r}) + c_3\lambda_3\varphi_3(\mathbf{r}) + \ldots + \ldots$$

$$\boldsymbol{H}^n f(\mathbf{r}) \cong c_1\lambda_1^n\varphi_1(\mathbf{r}) + c_2\lambda_2^n\varphi_2(\mathbf{r}) + c_3\lambda_3^n\varphi_3(\mathbf{r}) + \ldots + \ldots$$

① 基(函数)方向的“扩张”或者“收缩”，然后叠加，形成新的矢量；

② 微分或积分运算简化成代数运算。