Глава 1

Полиномы Лежандра

1.1 Формула Родрига

Полиномы Лежандра обычно определяются формулой Родрига [Кур56]:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(x^2 - 1\right)^n \tag{1.1}$$

$$(n = 0,\ 1,\ 2,\ \dots)\,.$$

Очевидно, для любого целого неотрицательного n функция $P_n(x)$ есть полином степени n.

При $n = 0$, учитывая, что $0! = 1$ и $f^{(0)}(x) = f(x)$ получаем

$$P_0(x) = 1.$$

Далее, полагая $n = 1$; $n = 2$ и $n = 3$ в формуле (1.1), находим:

$$P_1(x) = \frac{1}{2} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(x^2 - 1\right) = x;$$

$$P_2(x) = \frac{1}{8} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \left(x^4 - 2x^2 + 1\right) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2};$$

$$P_3(x) = \frac{1}{48} \cdot \frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}x^3} \left(x^6 - 3x^4 + 3x^2 - 1\right) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$$

(1.1). Выражения для дальнейших полиномов Лежандра см. в работе [ЯЭ59].

Полиномы Лежандра находят применение в геофизике, квантовой механике, теории приближения функций и других областях.

Из формулы (1.1) вытекает, что $P_n(x)$ есть функция ЧЁТНАЯ, при n чётном и нечётная при n НЕЧЁТНОМ.

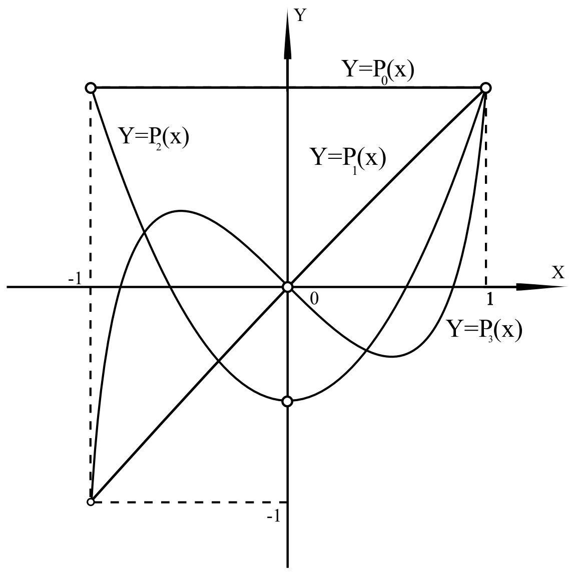

Рис. 1.1:

Определим значения $P_n(\pm 1)$. Для этого формулу (1.1) перепишем в следующем виде:

$$P_n(x) = k_n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left[(x-1)^n (x+1)^n \right], \tag{1.2}$$

где $k_n = \frac{1}{2^n n!}$.

Применяя формулу Лейбница

$$(uv)^{(n)} = \sum_{i=0}^{n} C_n^i u^{(i)} v^{(n-i)},$$

будем иметь

$$P_n(x) = k_n \sum_{i=0}^{n} C_n^i \frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}x^i} (x-1)^n \frac{\mathrm{d}^{n-i}}{\mathrm{d}x^{n-i}} (x+1)^n. \tag{1.3}$$

Полагая $x = 1$ в формуле (1.3) и принимая во внимание, что

$$\left[\frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}x^i} (x-1)^n \right]_{x=1} = 0 \quad \text{при} \quad 0 \leqslant i < n,$$

получаем

$$P_n(1) = k_n \left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x-1)^n\right]_{x=1} [(x+1)^n]_{x=1} = \frac{1}{2^n n!} n! 2^n = 1.$$

Учитывая чётность полиномов $P_n(x)$, имеем

$$P_n(-1) = (-1)^n P_n(1) = (-1)^n .$$

Найдём также $P_n(0)$. Если n – число нечётное, то, очевидно,

$$P_n(0) = 0.$$

Пусть $n = 2m$ – число чётное. Используя бином Ньютона, на основании формулы (1.1) получаем

$$P_{2m}(x) = \frac{1}{2^{2m}(2m)!} \cdot \frac{\mathrm{d}^{2m}}{\mathrm{d}x^{2m}} \left\{ \sum_{i=0}^{2m} (-1)^{2m-i} C_{2m}^i x^{2i} \right\} =$$
$$= \frac{1}{2^{2m}} \sum_{i=m}^{2m} (-1)^{2m-i} \frac{1}{i!\,(2m-i)!} \cdot 2i\,(2i-1)\ldots(2i-2m+1)\,x^{2i-2m}.$$

Откуда

$$P_{2m}(0) = \frac{1}{2^{2m}} (-1)^m \frac{1}{(m!)^2} (2m)! = (-1)^m \frac{1 \cdot 3 \cdot \cdots \cdot (2m-1)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdot \cdots \cdot (2m)}.$$

Можно доказать [Дже48], что если $n > 0$, то $|P_n(x)| < 1$ при $-1 < x < 1$.

1.2 Нули полиномов Лежандра

Нулём функции называется число, обращающее эту функцию в нуль, т. е. если ξ – нуль функции $f(x)$, то $f(\xi) = 0$.

Теорема. *Все нули полинома Лежандра положительной степени* $(n > 0)$ *действительны и расположены на интервале* $(-1,\, 1)$.

Доказательство. Для доказательства теоремы используем *теорему Ролля*, согласно которой между двумя нулями дифференцируемой функции находится по меньшей мере один нуль её производной.

Пусть

$$u = \left(x^2 - 1\right) \quad (n > 0)$$

и, следовательно,

$$P_n(x) = k_n u^{(n)}, \tag{1.4}$$

где

$$k_n = \frac{1}{2^n n!}.$$

Функция u, очевидно, имеет два нуля $a = -1$ и $b = 1$ кратности n. На основании теоремы Ролля производная u' имеет один нуль внутри отрезка $[-1,\, 1]$ и, кроме того, a и b являются нулями u' кратности $n-1$; таким образом, u' имеет на отрезке $[-1,\, 1]$ три нуля. Производя аналогичные рассуждения, убеждаемся, что n-я производная $u^{(n)}$ имеет внутри отрезка $[-1,\, 1]$ по меньшей мере n нулей. Отсюда в силу формулы 1.4 этим же свойством обладает и полином $P_n(x)$. Так как степень полинома $P_n(x)$ равна n, то и число действительных нулей его не может превышать n и, значит, все нули этого полинома лежат внутри отрезка $[-1,\, 1]$. □

1.3 Ортогональность полиномов Лежандра

Как известно [Гел98; Тол80], две действительные функции $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ называются ортогональными на отрезке $[a,\, b]$, если выполнено равенство

$$(\varphi,\, \psi) \equiv \int_a^b \varphi(x)\psi(x)\mathrm{d}x = 0.$$

Если функции $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ комплексные, то ортогональности их на отрезке $a \leqslant x \leqslant b$ должно быть выполнено условие $(\varphi,\, \psi) \equiv \displaystyle\int_a^b \varphi(x)\psi^*(x)\mathrm{d}x = 0$, где $\psi^*(x)$ – функция, сопряжённая с $\psi(x)$.

Теорема. *Полиномы Лежандра $P_n(x)$ и $P_m(x)$ различных степеней $(n \neq m)$ ортогональны на отрезке $[-1,\, 1]$.*

Доказательство. Рассмотрим интеграл

$$I_{mn} = \int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\mathrm{d}x = k_n k_m \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^2-1\right)^n \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left(x^2-1\right)^m \mathrm{d}x, \tag{1.5}$$

где $k_n = \dfrac{1}{2^n n!}$ и $k_m = \dfrac{1}{2^m m!}$.

Пусть для определённости $m > n$. Интегрируя по частям правую часть формулы 1.5, будем иметь

$$I_{nm} = k_n k_m \left\{ \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(x^2-1\right)^n \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(x^2-1\right)^m \Bigg|_{-1}^{1} - \right.$$
$$\left. - \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}x^{n+1}} \left(x^2-1\right)^n \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(x^2-1\right)^m \mathrm{d}x \right\}.$$

Так как $x = -1$ и $x = 1$ являются нулями кратности m функции $\left(x^2-1\right)^m$, то очевидно,

$$\frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(x^2-1\right) \Bigg|_{-1}^{1} = 0;$$

поэтому

$$I_{nm} = -k_n k_m \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}x^{n+1}} \left(x^2-1\right)^n \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(x^2-1\right)^m \mathrm{d}x.$$

Повторяя операцию интегрирования по частям m раз и учитывая, что

$$\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}} \left(x^2-1\right)^n = 0,$$

в силу того, что порядок дифференцирования выше степени многочлена, получим

$$I_{nm} = (-1)^m k_n k_m \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}} \left(x^2-1\right)^n \left(x^2-1\right)^m \mathrm{d}x = 0, \tag{1.6}$$

т. е.

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) \mathrm{d}x = 0 \quad \text{при} \quad n \neq m.$$

□

1.4 Нормировка полиномов Лежандра

Полагая $m = n$ в формуле 1.6, будем иметь

$$I_{nn} = (-1)^n k_n^2 \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}^{2n}}{\mathrm{d}x^{2n}} \left(x^2-1\right)^n \left(x^2-1\right)^n \mathrm{d}x,$$

где $k_n = \dfrac{1}{2^n n!}$.

Очевидно,

$$\frac{\mathrm{d}^{2n}}{\mathrm{d}x^{2n}}\left(x^2-1\right)^{2n}=\frac{\mathrm{d}^{2n}}{\mathrm{d}x^{2n}}\left(x^{2n}+\ldots\right)=(2n)!.$$

Поэтому

$$I_{nn}=(-1)^n\,\frac{1}{2^{2n}\,(n!)^2}\,(2n)!\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\mathrm{d}x. \tag{1.7}$$

Применяя многократное интегрирование по частям, получаем

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\mathrm{d}x&=\int_{-1}^{1}(x-1)^n\,(x+1)^n\,\mathrm{d}x=\\
&=\int_{-1}^{1}(x-1)^n\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\frac{(x+1)^{n+1}}{n+1}\right]\mathrm{d}x=\\
&=(x-1)^n\,\frac{(x+1)^{n+1}}{n+1}\bigg|_{-1}^{1}-\frac{n}{n+1}\int_{-1}^{1}(x-1)^{n-1}\,(x+1)^{n+1}\,\mathrm{d}x=\\
&=(-1)^n\,\frac{n\,(n-1)\ldots 1}{(n+1)\,(n+2)\ldots 2n}\int_{-1}^{1}(x+1)^{2n}\,\mathrm{d}x=\\
&=(-1)^n\,\frac{(n!)^2}{(2n)!}\cdot\frac{2^{2n+1}}{2n+1}.
\end{aligned} \tag{1.8}$$

Таким образом, в силу формулы 1.7 находим

$$I_{nn}=(-1)^n\,\frac{(2n)!}{2^{2n}\,(n!)^2}\,(-1)^n\,\frac{(n!)^2}{(2n)!}\cdot\frac{2^{2n+1}}{2n+1}=\frac{2}{2n+1}.$$

Следовательно,

$$\int_{-1}^{1}P_n^2(x)\mathrm{d}x=\frac{2}{2n+1}\qquad(n=0,\,1,\,2,\,\ldots). \tag{1.9}$$

Под *нормой* действительной функции $f(x)$ на отрезке $[a,\,b]$ понимается число [Тол80]

$$\|f\|=\sqrt{\int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x}.$$

Поэтому можно написать

$$\|P_n(x)\|=\sqrt{\frac{2}{2n+1}}. \tag{1.10}$$

Разделив полином Лежандра $P_n(x)$ на его норму 1.10, получим нормированные полиномы Лежандра

$$\widetilde{P}_n(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x) \quad (n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)\,, \tag{1.11}$$

где

$$\int_{-1}^{1} \widetilde{P}_n(x)\widetilde{P}_m(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m \\ 1 & \text{при } n = m \end{cases} \tag{1.12}$$

Введя *символ Кронекера*

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0, & \text{если } n \neq m \\ 1, & \text{если } n = m \end{cases}$$

формулу 1.12 можно записать короче

$$\int_{-1}^{1} \widetilde{P}_n(x)\widetilde{P}_m(x)\mathrm{d}x = \delta_{nm}. \tag{12$'$}$$

1.5 Ряды Фурье-Лежандра

Пусть функция $f(x)$, непрерывная на отрезке $[-1,\, 1]$, разлагается в равномерно сходящийся ряд *Фурье-Лежандра*

$$f(x) = c_0P_0(x) + c_1P_1(x) + \dots + c_nP_n(x) + \dots. \tag{1.13}$$

Умножая на $P_n(x)$ обе части равенства 1.13 и интегрируя почленно по x в пределах от $x = -1$ до $x = 1$, будем иметь

$$\int_{-1}^{1} f(x)P_n(x)\mathrm{d}x = c_0 \int_{-1}^{1} P_0(x)P_1(x)\mathrm{d}x + \\ + c_1 \int_{-1}^{1} P_1(x)P_n(x)\mathrm{d}x + \dots + c_n \int_{-1}^{1} P_n^2(x)\mathrm{d}x + \dots.$$

Учитывая условие ортогональности 1.6 и формулу 1.9, получим

$$\int_{-1}^{1} f(x)P_n(x)\mathrm{d}x = c_n \frac{2}{2n+1}.$$

Следовательно, для *коэффициентов Фурье-Лежандра* ряда 1.13 получаем значения

$$c_n = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^{1} f(x)P_n(x)\mathrm{d}x \quad (n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)\,. \tag{1.14}$$

1.6 Дифференциальное уравнение Лежандра

Линейное дифференциальное уравнение второго порядка

$$\left(1-x^2\right)y''-2xy'+\lambda y=0, \tag{1.15}$$

где λ – числовой параметр, называется *дифференциальным уравнением Лежандра.*

Записав уравнение 1.15 в виде

$$y''-\frac{2x}{1-x^2}y'+\frac{\lambda}{1-x^2}y=0, \tag{15'}$$

обнаруживаем, что $x_1=-1$ и $x_2=1$ являются *особыми точками* уравнения 1.15. Обычно уравнение 1.15 рассматривают на интервале $(-1,\,1)$ (*основной интервал*).

Докажем, что при определённом выборе параметра λ полином Лежандра удовлетворяет уравнению Лежандра 1.15.

Пусть

$$u=\left(x^2-1\right)^n \tag{1.16}$$

и, следовательно,

$$P_n(x)=k_nu^{(n)}, \tag{1.17}$$

где

$$k_n=\frac{1}{2^nn!}.$$

Дифференцируя формулу1.16, будем иметь

$$u'=n\left(x^2-1\right)^{n-1}2x=\frac{2nx}{x^2-1}u;$$

отсюда

$$\left(1-x^2\right)u'+2nxu=0. \tag{1.18}$$

Дифференцируя формулу 1.18 $(n+1)$ раз по x, на основании правила Лейбница находим

$$\left(1-x^2\right)u^{(n+2)}+(n+1)\,u^{(n+1)}\,(-2x)+\frac{(n+1)\,n}{2}u^{(n)}\,(-2)+ \\ +\left[xu^{(n+1)}+(n+1)\,u^{(n)}\right]=0,$$

или

$$\left(1-x^2\right)u^{(n+2)}-2xu^{(n+1)}+n\,(n+1)\,u^{(n)}=0. \tag{1.19}$$

Так как полином Лежандра $P_n(x)$ лишь числовым множителем k_n отличается от $u^{(n)}$, то из формулы 1.19 получаем

$$\left(1-x^2\right)P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n\,(n+1)\,P_n(x) = 0. \tag{1.20}$$

Сравнивая равенство 1.20 с уравнением 1.15, заключаем, что полином Лежандра $P_n(X)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению Лежандра 1.15 при выборе параметра

$$\lambda = n\,(n+1) \quad (n = 0,\,1,\,2,\,\ldots)\,.$$

Для квантовой механики представляет интерес следующая *краевая задача*: найти нетривиальное решение $y = y(x)$ $[y(x) \not\equiv 0]$ дифференциального уравнения 1.15, ограниченное на основном интервале $(-1,\,1)$, т. е. такое, что

$$|y(x)| \leqslant c \quad \text{при} \quad -1 < x < 1,$$

где c – некоторая постоянная.

Теорема. *Дифференциальное уравнение Лежандра 1.15 имеет нетривиальное решение $y = y(x)$, ограниченное в основном интервале $(-1,\,1)$, тогда и только тогда когда параметр есть число вида*

$$\lambda = n\,(n+1) \quad (n = 0,\,1,\,\ldots)\,, \tag{1.21}$$

причём это ограниченное решение есть полином Лежандра $P_n(x)$ с точностью до коэффициента пропорциональности, т. е.

$$y = cP_n(x),$$

где c – произвольная постоянная, отличная от нуля.

Доказательство. 1°. Будем искать решение уравнения 1.15 в форме степенного ряда

$$y = \sum_{m=0}^{\infty} c_m x^m.$$

Отсюда

$$y' = \sum_{m=0}^{\infty} m c_m x^{m-1}$$

и

$$y'' = \sum_{m=0}^{\infty} m\,(m-1)\,c_m x^{m-2} = \sum_{m=0}^{\infty} (m+2)\,(m+1)\,c_{m+2} x^m.$$

Подставляя эти выражения в дифференциальное уравнение 1.15, получим

$$\sum_0^\infty (m+2)(m+1)\, c_{m+2} x^m - \sum_0^\infty m(m-1)\, c_m x^m - \sum_0^\infty 2m c_m x^m + \sum_0^\infty \lambda c_m x^m \equiv 0,$$

или

$$\sum_0^\infty \left\{ (m+2)(m+1)\, c_{m+2} + \left[\lambda - m(m+1)\, c_m\right] c_m \right\} x^m \equiv 0.$$

Отсюда

$$(m+2)(m+1)\, c_{m+2} + \left[\lambda - m(m+1)\, c_m\right] c_m = 0$$

следовательно,

$$c_{m+2} = \frac{m(m+1) - \lambda}{(m+1)(m+2)} c_m \quad (m = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots). \tag{1.22}$$

Давая в формуле 1.22 значения $m = 0,\, 2,\, 4,\, \ldots$, последовательно выводим:

$$c_2 = \tfrac{0-\lambda}{2!} c_0;$$
$$c_4 = \tfrac{2\cdot3-\lambda}{3\cdot4} c_2 = -\tfrac{\lambda(2\cdot3-\lambda)}{4!} c_0;$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

и т. д. Отсюда для дифференциального уравнения 1.15 находим частное решение

$$y_1 = c_0 \left[1 - \frac{\lambda}{2!} x^2 - \frac{\lambda(2\cdot3-\lambda)}{4!} x^4 + \ldots \right]. \tag{1.23}$$

Аналогично, полагая $m = 1,\, 3,\, 5,\, \ldots$ в формуле 1.22, последовательно получаем

$$c_3 = \tfrac{1\cdot2-\lambda}{3!} c_1;$$
$$c_5 = \tfrac{3\cdot4-\lambda}{4\cdot5} c_3 = \tfrac{(1\cdot2-\lambda)(3\cdot4-\lambda)}{5!} c_1;$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Отсюда для дифференциального уравнения 1.15 находим второе частное решение

$$y_2 = c_1 \left[x + \frac{1\cdot2-\lambda}{3!} x^3 + \frac{(1\cdot2-\lambda)(3\cdot4-\lambda)}{5!} x^5 + \ldots \right]. \tag{1.24}$$

Заметим, что решения y_1 и y_2 определяются начальными условиями:

$$y_1(0) = c_0; \quad y_1'(0) = 0 \tag{1.25}$$

и

$$y_2(0) = 0; \quad y_2'(0) = c_1, \tag{25'}$$

причём определитель Вронского

$$W(0) = \begin{vmatrix} y_1(0) & y_2(0) \\ y_1'(0) & y_2'(0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} c_0 & 0 \\ 0 & c_1 \end{vmatrix} = c_0 c_1.$$

Поэтому, если $c_0 \neq 0$ и $c_1 \neq 0$, то функции 1.23 и 1.24 образуют фундаментальную систему решений дифференциального уравнения 1.15.

2°. Возможны два случая: а) параметр λ есть число вида $n\,(n+1)$, где n – целое неотрицательное число; б) $\lambda \neq n\,(n+1)$, где $n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$.

Пусть сначала

$$\lambda = n\,(n+1)\,. \tag{1.26}$$

Тогда из формулы 1.22 получаем

$$c_{n+2} = c_{n+4} = \cdots = 0.$$

Следовательно, дифференциальное уравнение 1.15 допускает решение $Y = Y(x)$ в форме полинома, т.е. имеет решение, ограниченное на интервале $(-1,\ 1)$, причём

$$Y = y_1(x), \quad \text{если } n \text{ чётное}$$

и

$$Y = y_2(x), \quad \text{если } n \text{ нечётное.}$$

Нетрудно убедиться, что решение Y есть полином Лежандра $P_n(x)$, умноженный на некоторую постоянную c. Действительно, при выполнении условия 1.26 полином $P_n(x)$, как было установлено выше, является решением дифференциального уравнения 1.15. Если n – число чётное, то $P_n(x)$ – полином чётной степени, причём

$$P_n(0) \neq 0; \quad P_n'(0) = 0.$$

Решения

$$c_0 \frac{P_n(x)}{P_n(0)} \quad \text{и} \quad Y = y_1(x)$$

на основании формулы 1.25 имеют одинаковые начальные условия. В силу свойства единственности решений дифференциальных уравнений такие решения совпадают между собой, т. е.

$$Y(x) \equiv c P_n(x),$$

где

$$c = \frac{c_0}{P_n(0)}.$$

Аналогично, если n – нечётное число, то

$$Y(x) = cP_n(x),$$

где

$$c = \frac{c_1}{P'_n(0)}.$$

Если $\lambda \neq n\,(n+1)$, то можно доказать, что каждое нетривиальное решение уравнения 1.15 не ограничено на интервале $(-1,\,1)$ [Кур56]. □

1.7 Присоединённые функции Лежандра

Функция

$$P_n^m(x) = \left(1 - x^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left[P_n(x)\right] \tag{1.27}$$

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

где $P_n(x)$ – полином Лежандра степени n, носит название *присоединённой функции Лежандра степени n порядка m* [Лев56; TC04]. Для полинома Лежандра $P_n(x)$ степени n имеется $n+1$ присоединённых функций, причём $P_n^0(x) = P_n(x)$. Например, используя выражения функции Лежандра из §1.1:

$$\begin{gathered} P_0(x) = 1; \\ P_1(x) = x; \\ P_2(x) = \tfrac{3}{2}x^2 - \tfrac{1}{2}; \\ P_3(x) = \tfrac{5}{2}x^3 - \tfrac{3}{2}x, \end{gathered}$$

получаем:

$$\begin{gathered} P_0^0(x) = 1; \quad P_1^0(x) = x; \quad P_1^1(x) = \sqrt{1-x^2}; \\ P_2^0(x) = \tfrac{3}{2}x^2 - \tfrac{1}{2}; \quad P_2^1(x) = 3x\sqrt{1-x^2}; \\ P_2^2(x) = 3\left(1-x^2\right); \quad P_3^0(x) = \tfrac{5}{2}x^3 - \tfrac{3}{2}x; \\ P_3^1(x) = \tfrac{3}{2}\left(5x^2-1\right)\sqrt{1-x^2}; \quad P_3^2(x) = 15x\left(1-x^2\right); \\ P_3^3(x) = 15\left(1-x^2\right)^{\frac{3}{2}} \end{gathered}$$

и т. д.

1.8 Присоединённое дифференциальное уравнение Лежандра

Дифференциальное уравнение

$$\left[\left(1-x^2\right)y'\right]' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)y = 0, \tag{1.28}$$

где λ – числовой параметр и m – целое число, называется *присоединённым дифференциальным уравнением Лежандра*. При $m = 0$ получается дифференциальное уравнение Лежандра (§1.6).

Докажем, что при надлежащем выборе параметра λ присоединённые функции Лежандра P_n^m удовлетворяют уравнению (1.28).

Как известно (§1.6), полином Лежандра $z = P_n(x)$ является решением дифференциального уравнения Лежандра

$$\left(1-x^2\right) z'' - 2xz' + n\,(n+1)\,z = 0. \tag{1.29}$$

Дифференцируя m раз уравнение (1.29) по x, на основании правила Лейбница будем иметь

$$\left(1-x^2\right) z^{(m+2)} + m\,(-2x)\,z^{(m+1)} + \frac{m\,(m-1)}{2}\,(-2)\,z^{(m)} - \\ - 2\left[xz^{(m+1)} + mz^{(m)}\right] + n\,(n+1)\,z^{(m)} = 0$$

или

$$\left(1-x^2\right) z^{(m+2)} - 2\,(m+1)\,xz^{(m+1)} + \left[n\,(n+1) - m\,(m+1)\right] z^{(m)} = 0. \tag{1.30}$$

Умножая обе части равенства (1.30) на $(1-x^2)^m$ получаем

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)^{m+1} z^{(m+1)}\right] + \left[n\,(n+1) - m\,(m+1)\right]\left(1-x^2\right)^m z^{(m)} = 0. \tag{1.31}$$

Отсюда, учитывая что

$$z^{(m)} = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left[P_n(x)\right] = \left(1-x^2\right)^{-\frac{m}{2}} P_n^m(x),$$

будем иметь

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\left(1-x^2\right)^{m+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)^{-\frac{m}{2}} P_n^m(x)\right]\right\} + \\ + \left[n\,(n+1) - m\,(m+1)\right]\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}} P_n^m(x) = 0. \tag{1.32}$$

Так как

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\left(1-x^2\right)^{m+1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)^{-\frac{m}{2}}P_n^m(x)\right]\right\}=$$
$$=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}+1}\left[P_n^m(x)\right]'+mx\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}P_n^m(x)\right\}=$$
$$=\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}+1}\left[P_n^m(x)\right]''-(m+2)\,x\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}\left[P_n^m(x)\right]'+$$
$$+mx\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}\left[P_n^m(x)\right]'+\Big[m\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}-$$
$$-m^2x^2\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}-1}\Big]P_n^m(x)=\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}+1}\left[P_n^m(x)\right]''-$$
$$-2x\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}\left[P_n^m(x)\right]'+\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}\left(m-\frac{m^2x^2}{1-x^2}\right)P_n^m(x),$$

то из формулы (1.32) после сокращения на $(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$, получаем

$$\left(1-x^2\right)\left[P_n^m(x)\right]''-2x\left[P_n^m(x)\right]'+\left[n\,(n+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P_n^m(x)=0. \tag{1.33}$$

Сравнивая равенство (1.33) с присоединённым дифференциальным уравнением Лежандра (1.28), убеждаемся, что $P_n^m(x)$ удовлетворяет этому уравнению, если

$$\lambda=n\,(n+1)\,. \tag{1.34}$$

Можно доказать, что присоединённые полиномы Лежандра $P_n^m(x)$ с точностью до коэффициента пропорциональности являются единственными ограниченными решениями на интервале $(-1,\,1)$ присоединённого дифференциального уравнения Лежандра (1.28) [Кур56], причём параметр λ определяется по формуле (1.34).

1.9 Ортогональность присоединённых функций Лежандра

Теорема. *Присоединённые функции Лежандра $y=P_n^m(x)$ и $z=P_k^m(x)$ различных степеней $(k\neq n)$ и одинаковых порядков m ортогональны на отрезке $[-1,\,1]$.*

Доказательство. Так ка функции y и z удовлетворяют присоединённому уравнению Лежандра, то имеем:

$$\left[\left(1-x^2\right)y'\right]'+\left[n\,(n+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]y=0 \tag{1.35}$$

и

$$\left[\left(1-x^2\right)z'\right]' + \left[k\,(k+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]z = 0. \tag{1.36}$$

Умножая на z уравнение (1.35) и на y уравнение (1.36), после вычитания получим

$$z\left[\left(1-x^2\right)y'\right]' - y\left[\left(1-x^2\right)z'\right]' + \left[n\,(n+1) - k\,(k+1)\right]yz = 0,$$

или

$$\left[\left(1-x^2\right)\left(y'z - yz'\right)\right]' + (n-k)\,(n+k+1)\,yz = 0. \tag{1.37}$$

Отсюда, интегрируя равенство (1.37) по x в пределах от $x_1 = -1$ до $x_2 = 1$, находим

$$\left(1-x^2\right)\left(y'z - yz'\right)\Big|_{x=-1}^{x=1} + (n-k)\,(n+k+1)\int_{-1}^{1} yz\mathrm{d}x = 0.$$

Следовательно, имеем

$$\int_{-1}^{1} yz\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} P_n^m(x)P_k^m(x)\mathrm{d}x = 0, \tag{1.38}$$

если $n \neq k$. □

1.10 Нормировка присоединённых функций Лежандра

Положим

$$I_{nm} = \int_{-1}^{1}\left[P_n^m(x)\right]^2\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1}\left(1-x^2\right)^m\frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\cdot\frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\mathrm{d}x. \tag{1.39}$$

Интегрируя по частям правую часть формулы (1.39), находим

$$\begin{aligned} I_{nm} = \left[\left(1-x^2\right)^m\frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\cdot\frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\right]_{-1}^{1} - \\ -\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^{m-1}P_n(x)}{\mathrm{d}x^{m-1}}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)^m\frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\right]\mathrm{d}x = \\ = -\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^{m-1}P_n(x)}{\mathrm{d}x^{m-1}}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)^m\frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\right]\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{1.40}$$

В силу формулы (1.31) из §1.8, где

$$z^{(m)} = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_n(x),$$

заменяя m на $m-1$, будем иметь

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1-x^2\right)^m \frac{\mathrm{d}^m P_n(x)}{\mathrm{d}x^m}\right] = \\ = -\left[n\,(n+1)-(m-1)\,m\right]\left(1-x^2\right)^{m-1}\frac{\mathrm{d}^{m-1}P_n(x)}{\mathrm{d}x^{m-1}}.$$

Поэтому из формулы (1.40) получаем

$$I_{nm} = (n+m)\,(n-m+1)\int_{-1}^{1}\left(1-x^2\right)^{m-1}\left[\frac{\mathrm{d}^{m-1}P_n(x)}{\mathrm{d}x^{m-1}}\right]^2\mathrm{d}x = \\ = (n+m)\,(n-m+1)\,I_{n,m-1}. \quad (1.41)$$

Производя аналогичные преобразования m раз, приходим к формуле

$$I_{nm} = (n+m)\,(n-m+1)\,(n+m-1)\,(n-m+2)\ldots \\ \ldots(n+1)\,nI_{n0} = \frac{(n+m)!}{(n-m)!}I_{n0}, \quad (1.42)$$

где (1.9),

$$I_{n0} = \int_{-1}^{1}\left[P_n(x)\right]^2\mathrm{d}x = \frac{2}{2n+1}.$$

Поэтому из формулы (1.42) получаем

$$I_{nm} = \int_{-1}^{1}\left[P_n^m(x)\right]^2\mathrm{d}x = \frac{2}{2n+1}\cdot\frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (1.43)$$

($n = 0,\,1,\,2,\,\ldots;\; m = 0,\,1,\,2,\ldots,\,n$).

Из формулы (1.43) на основании §1.9 вытекает, что, полагая

$$\tilde{P}_n^m = \sqrt{\frac{2n+1}{2}\cdot\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}P_n^m(x), \quad (1.44)$$

получаем *нормированную систему присоединённых функций Лежандра*, удовлетворяющих условию

$$\int_{-1}^{1}\tilde{P}_n^m(x)\tilde{P}_k^m(x)\mathrm{d}x = \delta_{nk},$$

где δ_{kn} – символ Кронекера.

1.11 Оператор Лапласа в цилиндрических и сферических координатах

Пусть $u = u(x, y, z)$ – функция класса $C^{(2)}$, т. е. u имеет непрерывные частные производные до второго порядка включительно (в соответствующей области). Выражение

$$\Delta u \equiv \nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \tag{1.45}$$

называется *оператором Лапласа* (короче – *лапласианом*) функции u, а уравнение

$$\Delta u = 0 \tag{1.46}$$

– *уравнением Лапласа*. Функции класса $C^{(2)}$, удовлетворяющие уравнению Лапласа, называются *гармоническими*. Оператор Лапласа играет важную роль в физических приложениях.

Получим выражение оператора Лапласа Δu в цилиндрических координатах (r, φ, z), где

$$\left.\begin{array}{l} x = r\cos\varphi; \\ y = r\sin\varphi; \\ z = z \end{array}\right\} \tag{1.47}$$

(рис. 1.2). Из формул (1.47) имеем:

$$\left.\begin{array}{l} r = \sqrt{x^2+y^2}; \\ \varphi = \mathrm{Arctg}\frac{y}{x}. \end{array}\right\} \tag{1.48}$$

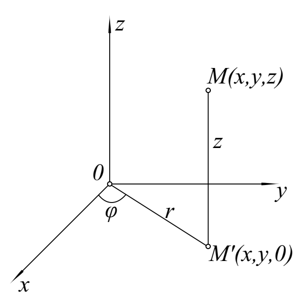

Рис. 1.2:

На основании правила дифференцирования сложной функции, используя формулы (1.48) и (1.47), получаем

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial r}\cdot\frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial \varphi}\cdot\frac{\partial \varphi}{\partial r} = \\ = \frac{\partial u}{\partial r}\cdot\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} + \frac{\partial u}{\partial \varphi}\cdot\frac{-\frac{y}{x^2}}{1+\left(\frac{y}{x}\right)^2} = \frac{\partial u}{\partial r}\cos\varphi - \frac{\partial u}{\partial \varphi}\cdot\frac{\sin\varphi}{r};$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial r}\cdot\frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \varphi}\cdot\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \\ = \frac{\partial u}{\partial r}\cdot\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} + \frac{\partial u}{\partial \varphi}\cdot\frac{\frac{1}{x}}{1+\left(\frac{y}{x}\right)^2} = \frac{\partial u}{\partial r}\cdot\sin\varphi + \frac{\partial u}{\partial \varphi}\cdot\frac{\cos\varphi}{r}.$$

Отсюда, применяя формулы Эйлера

$$\cos\varphi \pm \mathrm{i}\sin\varphi = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi},$$

где

$$\mathrm{i} = \sqrt{-1},$$

будем иметь

$$Du = \frac{\partial u}{\partial x} + \mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial y} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\mathrm{i}}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial\varphi}\right)$$

и

$$\overline{D}u = \frac{\partial u}{\partial x} - \mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial y} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\mathrm{i}}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial\varphi}\right).$$

Очевидно,

$$\overline{D}Du = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial y}\right) - \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2};$$

поэтому

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \overline{D}Du = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\frac{\partial}{\partial r}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\mathrm{i}}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial\varphi}\right)\right] - \\ - \frac{\mathrm{i}}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\mathrm{i}}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial\varphi}\right)\right] = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - \frac{\mathrm{i}}{r}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r\partial\varphi} + \frac{\mathrm{i}}{r}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}\right) = \\ = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} \qquad (1.49)\end{aligned}$$

Таким образом, для *оператора Лапласа в цилиндрических координатах* получаем выражение:

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}. \qquad (1.50)$$

Найдём теперь выражение для оператора Лапласа в *сферических координатах* (ρ, θ, φ), где

$$\left.\begin{aligned} x &= \rho\sin\theta\cos\varphi; \\ y &= \rho\sin\theta\sin\varphi; \\ z &= \rho\cos\theta \end{aligned}\right\} \qquad (1.51)$$

(рис. 1.3).

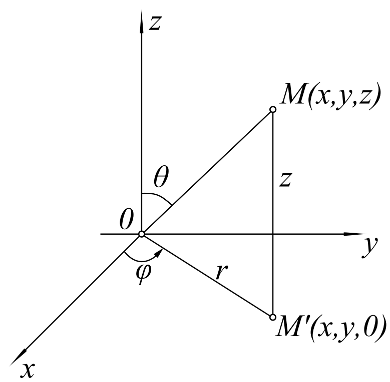

Рис. 1.3:

Положим

$$r = \rho \sin\theta. \tag{1.52}$$

Переход от декартовых координат x, y, z к сферическим ρ, θ, φ можно осуществить с помощью двух последовательных преобразований:

$$\left.\begin{aligned} x &= r\cos\varphi; \\ y &= r\sin\varphi; \\ z &= z \end{aligned}\right\} \tag{1.53}$$

и

$$\left.\begin{aligned} z &= \rho\cos\theta; \\ r &= \rho\sin\theta. \end{aligned}\right\} \tag{1.54}$$

Величины r, φ, z являются цилиндрическими координатами точки $M(x,\, y,\, z)$; поэтому на основании формулы 1.50 имеем

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}. \tag{1.55}$$

В силу формул (1.54) ρ и θ можно рассматривать как полярные координаты на плоскости $(z,\, r)$. Отсюда по аналогии с формулой (1.55) получаем

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2}. \tag{1.56}$$

Подставляя выражение (1.56) в формулу (1.55), находим

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\rho\sin\theta}\cdot\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{\rho^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}. \tag{1.57}$$

Остаётся выразить производную $\frac{\partial u}{\partial r}$ через сферические функции координаты $(\rho,\, \theta,\, \varphi)$.

Из формул (1.55) получаем:

$$\left.\begin{aligned} \rho &= \sqrt{z^2 + r^2}; \\ \theta &= \mathrm{Arctg}\tfrac{r}{2}. \end{aligned}\right\}$$

Отсюда

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial \rho}\cdot\frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial \theta}\cdot\frac{\partial \theta}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial \rho}\cdot\frac{r}{\sqrt{z^2+r^2}} + \frac{\partial u}{\partial \theta}\cdot\frac{z}{z^2+r^2} =$$
$$= \frac{\partial u}{\partial \rho}\cdot\sin\theta + \frac{\partial u}{\partial \theta}\cdot\frac{\cos\theta}{\rho}.$$

Подставляя это выражение в формулу (1.57), будем иметь

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \\ + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{\partial u}{\partial \theta} \cdot \frac{\mathrm{ctg}\theta}{\rho^2} + \frac{1}{\rho^2 \sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = \\ \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \cdot \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2 \sin\theta} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \sin\theta + \frac{\partial u}{\partial \theta} \cos\theta \right) + \\ + \frac{1}{\rho^2 \sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}.$$

Произведя несложные преобразования, получаем окончательное выражение *оператора Лапласа в сферических координатах*

$$\Delta u = \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial u}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin^2\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}. \tag{1.58}$$

1.12 Понятие о шаровых функциях

Полиномы, удовлетворяющие уравнению Лапласа

$$\Delta u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0,$$

называются *гармоническими*. Однородные гармонические полиномы носят название *шаровых функций*.

Определим число линейно независимых шаровых функций

$$P_n(x,\, y,\, z) = \sum_{\alpha+\beta+\gamma=n} c_{\alpha\beta\gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma \tag{1.59}$$

данной степени n.

Теорема. *Существует $2n+1$ линейно независимых шаровых функций данной степени n.*

Доказательство. Располагая полином $P_n(x,\, y,\, z)$ по убывающим степеням переменной z, будем иметь

$$P_n(x,\, y,\, z) = c_{00n} z^n + (c_{1,0,n-1} x + c_{0,1,n-1} y)\, z^{n-1} + \cdots + \\ + \left(c_{n00} x^n + c_{n-1,1,0} x^{n-1} y + \cdots + c_{0n0} y^n \right).$$

Отсюда общее число коэффициентов однородного полинома $P_n(x,\, y,\, z)$ степени n равно

$$N = 1 + 2 + \cdots + (n+1) = \frac{(n+1)\,(n+2)}{2}.$$

Если полином $P_n(x,\, y,\, z)$ гармонический, то

$$\Delta P_n(x,\, y,\, z) \equiv 0. \tag{1.60}$$

Очевидно, $\Delta P_n(x,\, y,\, z)$ есть однородный полином степени $n-2$ и, следовательно, содержит

$$N_1 = \frac{(n-1)\,n}{2}$$

коэффициентов. Таким образом, тождество (1.60) эквивалентно системе N_1 линейный соотношений между коэффициентами $c_{\alpha\beta\gamma}$. Если эти соотношения линейно независимы, то гармонический полином $P_n(x,\, y,\, z)$ будет содержать

$$N - N_1 = \frac{(n+1)\,(n+2)}{2} - \frac{(n-1)\,n}{2} = 2n+1$$

свободных коэффициентов. Если же указанные выше соотношения линейно зависимы, то число свободных коэффициентов полинома $P_n(x,\, y,\, z)$ будет больше $2n+1$. Во всяком случае, гармонический полином $P_n(x,\, y,\, z)$ имеет не меньше $2n+1$ независимых коэффициентов $c_{\alpha\beta\gamma}$.

Покажем, что при наличии соотношений (1.60) коэффициенты $c_{\alpha\beta\gamma}$ линейно выражаются через коэффициенты вида $c_{\alpha\beta 0}$ $(\alpha+\beta=n)$ и $c_{\alpha\beta 1}$ $(\alpha+\beta=n-1)$, число которых в точности равно $n+1+n=2n+1$. Действительно, в силу однородности полинома $P_n(x,\, y,\, z)$ при $(\alpha+\beta+\gamma=n)$ имеем

$$\frac{\partial^n P_n}{\partial x^\alpha \partial y^\beta \partial z^\gamma} = \alpha!\beta!\gamma! c_{\alpha\beta\gamma};$$

отсюда

$$c_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{\alpha!\beta!\gamma!} \cdot \frac{\partial^n P_n}{\partial x^\alpha \partial y^\beta \partial z^\gamma}. \tag{1.61}$$

Используя соотношение

$$\frac{\partial^2 P_n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P_n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P_n}{\partial z^2} = 0,$$

из формулы (1.61) при $\gamma \geqslant 2$ получаем

$$c_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{\alpha!\beta!\gamma!} \cdot \frac{\partial^{n-2}}{\partial x^\alpha \partial y^\beta \partial z^{\gamma-2}} \left(\frac{\partial^2 P_n}{\partial z^2}\right) =$$
$$= -\frac{1}{\alpha!\beta!\gamma!} \cdot \frac{\partial^{n-2}}{\partial x^\alpha \partial y^\beta \partial z^{\gamma-2}} \left(\frac{\partial^2 P_n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P_n}{\partial y^2}\right) =$$
$$= -\left[\frac{(\alpha+1)(\alpha+2)}{(\gamma-1)\gamma} c_{\alpha+2,\beta,\gamma-2} + \frac{(\beta+2)(\beta+1)}{\gamma(\gamma-1)} c_{\alpha,\beta+2,\gamma-2}\right].$$

Повторяя этот приём, мы в конце концов все коэффициенты $c_{\alpha\beta\gamma}$, где $\gamma \geqslant 2$, выразим через коэффициенты указанного выше вида $c_{\alpha\beta 0}$ и $c_{\alpha\beta 1}$, число которых $2n+1$, что и требовалось доказать.

Так как по доказанному выше число линейно независимых коэффициентов $c_{\alpha\beta\gamma}$ не может быть меньше $2n+1$, то число их в точности равно $2n+1$.

Итак, гармонический полином $P_n(x,\, y,\, z)$ степени n может быть записан в виде

$$P_n(x,\, y,\, z) = \sum_{\alpha+\beta=n} c_{\alpha\beta 0} P^{(n)}_{\alpha\beta 0}(x,\, y,\, z) + \sum_{\alpha+\beta=n-1} c_{\alpha\beta 1} P^{(n)}_{\alpha\beta 1}(x,\, y,\, z), \tag{1.62}$$

где коэффициенты $c_{\alpha\beta 0}$ и $c_{\alpha\beta 1}$ могут принимать любые допустимые значения; а $P^{(n)}_{\alpha\beta 0}(x,\, y,\, z)$ и $P^{(n)}_{\alpha\beta 1}(x,\, y,\, z)$ – конкретные гармонические полиномы степени n? не содержащие произвольных коэффициентов.

Заметим, что полином $P_n(x,\, y,\, z)$ (1.59) не имеет подобных членов; поэтому каждый из полиномов $P^{(n)}_{\alpha\beta\gamma}(x,\, y,\, z)$ $(\gamma = 0, 1)$ содержит член вида $kx^{\alpha'} y^{\beta'} z^{\gamma'}$, которого нет в других полиномах $P^{(n)}_{\alpha\beta\gamma}(x,\, y,\, z)$ $(\gamma = 0, 1)$. Отсюда ясно, что полиномы $P^{(n)}_{\alpha\beta\gamma}(x,\, y,\, z)$ $(\gamma = 0, 1)$ линейно независимы и, следовательно, существует точно $2n+1$ линейно независимых шаровых функций степени n. $\square$

Пример. Построить шаровые функции $P_0(x,\, y,\, z)$, $P_1(x,\, y,\, z)$ и $P_2(x,\, y,\, z)$.

Очевидно,

$$P_0(x,\, y,\, z) = a = \mathrm{const}$$

и

$$P_1(x,\, y,\, z) = ax + by + cx,$$

где a, b, c – произвольные постоянные. За основные гармонические полиномы первой степени можно принять

$$u_1 = x; \quad u_2 = y; \quad u_3 = z.$$

Пусть

$$P_2(x,\, y,\, z) = ax^2 + by^2 + cz^2 + dxy + exz + fyz.$$

Имеем

$$\frac{1}{2}\Delta P_2(x,\, y,\, z) = a + b + c = 0;$$

отсюда

$$c = -a - b$$

и, следовательно,

$$P_2(x,\, y,\, z) = a\left(x^2 - z^2\right) + b\left(y^2 - z^2\right) + dxy + exz + fyz.$$

За основные гармонические полиномы второй степени можно принять:

$$u_1 = x^2 - z^2; \quad u_2 = y^2 - z^2; \quad u_3 = xy; \quad u_4 = xz; \quad u_5 = yz.$$

1.13 Сферические функции

Пусть

$$u_n = \sum_{\alpha+\beta+\gamma=n} c_{\alpha\beta\gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma \tag{1.63}$$

есть шаровая функция степени n, не равная нулю тождественно.

Вводя сферические координаты ρ, θ, φ по формулам:

$$\left.\begin{aligned} x &= \rho\sin\theta\cos\varphi; \\ y &= \rho\sin\theta\sin\varphi; \\ z &= \rho\cos\theta, \end{aligned}\right\}$$

будем иметь

$$u_n = \rho^n Y_n(\theta,\, \varphi), \tag{1.64}$$

где

$$Y_n(\theta,\, \varphi) = \sum_{\alpha+\beta+\gamma=n} c_{\alpha\beta\gamma} \sin^{\alpha+\beta}\theta\cos^\gamma\theta\sin^\beta\varphi\cos^\alpha\varphi.$$

Функция $Y_n(\theta,\, \varphi)$ называется *сферической функцией* n-го порядка и представляет собой значения шаровой функции степени n на сфере радиуса единица с центром в начале координат. Заметим, что функция $Y_n(\theta,\, \varphi)$ периодическая по переменным θ и φ с периодом 2π.

Выведем дифференциальное уравнение для сферических функций $Y_n(\theta,\, \varphi)$. Шаровая функция u_n гармоническая и, следовательно, удовлетворяет уравнению Лапласа (1.58)

$$\frac{1}{\rho^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial u_n}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u_n}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\rho^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2 u_n}{\partial\varphi^2} = 0.$$

Так как на основании формулы (1.64)

$$\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial u_n}{\partial\rho}\right)=\frac{\partial}{\partial\rho}\left[\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^nY_n\right)\right]=\frac{\partial}{\partial\rho}\left(n\rho^{n+1}Y_n\right)=n\left(n+1\right)\rho^nY_n,$$

то получаем

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_n}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2Y_n}{\partial\varphi^2}+n\left(n+1\right)Y_n=0. \tag{1.65}$$

Для построения основной системы линейно независимых сферических функций порядка n применим метод разделения переменных. Положим

$$Y_n=\Phi_n(\varphi)\Theta_n(\theta).$$

Подставляя это выражение в дифференциальное уравнение (1.65), будем иметь

$$\frac{\Phi_n}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}\theta}\right)+\frac{\Theta_n}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\Phi_n}{\mathrm{d}\varphi^2}+n\left(n+1\right)\Phi_n\Theta_n=0.$$

Отсюда, разделяя переменные θ и φ, на основании обычного рассуждения [Тол80], получим

$$\frac{\frac{\mathrm{d}^2\Phi_n}{\mathrm{d}\varphi^2}}{\Phi_n}=-\frac{\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}\theta}\right)+n\left(n+1\right)\Theta_n}{\frac{\Theta_n}{\sin^2\theta}}=\mu, \tag{1.66}$$

где μ – некоторая постоянная величина. Таким образом, уравнение (1.66)распадается на два дифференциальных уравнения:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi_n}{\mathrm{d}\varphi^2}+\mu\Phi_n=0 \tag{1.67}$$

и

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}\theta}\right)+\left[n\left(n+1\right)-\frac{\mu}{\sin^2\theta}\right]\Theta_n=0. \tag{1.68}$$

Так как Y_n представляет собой полином, целый относительно $\sin\theta$, $\cos\theta$, $\sin\varphi$ и $\cos\varphi$, то функции Φ_n и Θ_n должны быть ограниченными и периодическими с периодом 2π.

Из теории линейных дифференциальных уравнений вытекает, что уравнение (1.67) имеет ограниченные нетривиальные решения лишь в том случае, когда $\mu\geqslant 0$; причём линейно независимые решения уравнения (1.67) можно записать в виде

$$\Phi_n=c\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\sqrt{\mu}\varphi}, \tag{1.69}$$

где c – произвольная постоянная, отличная от нуля и $\mathrm{i}=\sqrt{-1}$.

Функция Φ_n должна быть периодической с периодом 2π, поэтому справедливо тождество

$$\mathrm{e}^{\pm\sqrt{\mu}\,(\varphi + 2\pi)} \equiv \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\sqrt{\mu}\varphi};$$

отсюда

$$\mathrm{e}^{\pm 2\pi \mathrm{i}\sqrt{\mu}} \equiv 1.$$

Из последнего равенства следует, что $\sqrt{\mu}$ является некоторым целым числом m, т. е.

$$\mu = m^2. \tag{1.70}$$

Таким образом, интересующие нас решения Φ_n могут быть записаны в виде

$$\Phi_{nm} = c_{nm}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, \tag{1.71}$$

где $m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots$ и c_{nm} – произвольные постоянные.

Подставляя выражение (1.70) в уравнение (1.68), находим

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}\theta}\right) + \left[n\,(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta_n = 0. \tag{1.72}$$

Положим

$$\cos\theta = t; \quad \sin\theta\mathrm{d}\theta = -\mathrm{d}t.$$

Тогда, учитывая, что

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}\theta}\right) = \frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin^2\theta\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}\theta}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\left(1-t^2\right)\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}t}\right],$$

уравнение (1.72) приводим к виду

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\left(1-t^2\right)\frac{\mathrm{d}\Theta_n}{\mathrm{d}t}\right] + \left[n\,(n+1) - \frac{m^2}{1-t^2}\right]\Theta_n = 0.$$

Мы получили присоединённое уравнение Лежандра (§1.8), причём функция Θ_n представляет собой ограниченное на интервале $-1 < t < 1$ нетривиальное решение этого уравнения. Следовательно (см. §1.8), с точностью до коэффициента пропорциональности имеем

$$\Theta_{nm}(\theta) = P_n^{|m|}(t) = P_n^{|m|}(\cos\theta) \tag{1.73}$$

$$(m = 0,\ \pm 1,\ \ldots,\ ,\ \pm n; \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots),$$

где $P_n^{|m|}(t)$ – присоединённые функции Лежандра (§1.7).

Из формул (1.71) и (1.73) получаем полную систему линейно независимых сферических функций данного порядка n

$$Y_{nm}(\theta,\,\varphi) = c_{nm}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}P_n^{|m|}(\cos\theta) \tag{1.74}$$

($m = 0,\,\pm1,\,\pm2,\,\ldots,\,\pm n$), где c_{nm} – произвольные постоянные. Как и следовало ожидать, число их равно $2n+1$.

Используя формулу Эйлера

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = \cos m\varphi + \mathrm{i}\sin m\varphi,$$

можно также получить действительную систему сферических функций. Отсюда находим также выражения для полной совокупности линейно независимых шаровых функций степени n

$$u_{nm} = c_{nm}\rho^n\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}P_n^{|m|}(\cos\theta) \tag{1.75}$$

($m = 0,\,\pm1,\,\ldots,\,\pm n$).

1.14 Ортогональность и нормировка сферических функций

Докажем, что несовпадающие между собой сферические функции $Y_{nm}(\theta,\,\varphi)$ ортогональны на единичной сфере $S(\rho = 1)$, т. е.

$$\iint\limits_S Y_{nm}(\theta,\,\varphi)Y^*_{n'm'}(\theta,\,\varphi)\mathrm{d}S = 0 \tag{1.76}$$

при $|n-n'| + |m-m'| \neq 0$, где знак * обозначает комплексно сопряжённую функцию.

Действительно, на основании формулы (1.74) имеем

$$Y_{nm}(\theta,\,\varphi) = c_{nm}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}P_n^{|m|}(\cos\theta)$$

и

$$Y^*_{n'm'}(\theta,\,\varphi) = c^*_{n'm'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\varphi}P_{n'}^{|m'|}(\cos\theta).$$

Отсюда, учитывая, что элемент поверхности сферы

$$\mathrm{d}S = \sin\theta\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}\theta,$$

получаем

$$I_{nm;n'm'} = \iint\limits_S Y_{nm}(\theta,\,\varphi)Y^*_{n'm'}(\theta,\,\varphi)\mathrm{d}S =$$
$$= c_{nm}c^*_{n'm'}\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-m')\varphi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}P_n^{|m|}(\cos\theta)P_{n'}^{|m'|}(\cos\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta =$$
$$= c_{nm}c^*_{n'm'}\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-m')\varphi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}P_n^{|m|}(t)P_{n'}^{|m'|}(t)\mathrm{d}t. \quad (1.77)$$

Если $m' \neq m$, то, очевидно,

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-m')\varphi}\mathrm{d}\varphi = \left.\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-m')\varphi}}{\mathrm{i}\,(m-m')}\right|_0^{2\pi} = 0$$

и, следовательно

$$I_{nm;n'm'} = 0.$$

Если $m = m'$, но $n \neq n'$, то в силу ортогональности присоединённых многочленов Лежандра (§1.9) имеем

$$\int_{-1}^{1}P_n^{|m|}(t)P_{n'}^{|m'|}(t)\mathrm{d}t = 0$$

и, значит,

$$I_{nm;n'm'} = 0.$$

Таким образом, формула (1.76) доказана.

Пусть теперь $m' = m$ и $n' = n$.

На основании формулы (1.77), учитывая, что (§(1.10))

$$\int_{-1}^{1}\left[P_n^{|m|}(t)\right]^2\mathrm{d}t = \frac{2}{2n+1}\cdot\frac{(n+|m|)!}{(n-|m|)!}, \quad (1.78)$$

находим

$$I_{nm;nm} = |c_{nm}|^2\cdot\frac{4\pi}{2n+1}\cdot\frac{(n+|m|)!}{(n-|m|)!}.$$

Выберем коэффициенты c_{nm} так, чтобы

$$|c_{nm}| = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\cdot\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}}.$$

Отсюда получим простейшую *нормированную систему сферических функций*

$$\tilde{Y}_{nm}(\theta,\,\varphi) = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\cdot\frac{(n-|m|)!}{(n+|m|)!}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}P_n^{|m|}(\cos\theta) \quad (1.79)$$

$$(m = 0,\, \pm 1,\, \ldots,\, \pm n; \qquad n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots),$$

удовлетворяющую условиям *ортонормировки*:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \tilde{Y}_{nm}(\theta,\, \varphi) \tilde{Y}^*_{n'm'}(\theta,\, \varphi) \sin\theta \mathrm{d}\theta = \delta_{nn'} \cdot \delta_{mm'} \tag{1.80}$$

Пример. Определить нормированные сферические функции нулевого, первого и второго порядков.

Как известно (§(1.7)),

$$P_0^0(t) = 1; \quad P_1^0(t) = t; \quad P_1^1(t) = \sqrt{1 - t^2};$$

$$P_2^0(t) = \frac{1}{2}\left(3t^2 - 1\right); \quad P_2^1(t) = 3t\sqrt{1 - t^2};$$

$$P_2^2(t) = 3\left(1 - t^2\right).$$

Отсюда на основании формулы (1.79) получаем:

$$\tilde{Y}_{00}(\theta,\, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}};$$

$$\tilde{Y}_{10}(\theta,\, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta;$$

$$\tilde{Y}_{1,\,\pm 1}(\theta,\, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \sin\theta;$$

$$\tilde{Y}_{20}(\theta,\, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(3\cos^2\theta - 1\right);$$

$$\tilde{Y}_{2,\,\pm 1}(\theta,\, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \sin\theta \cos\theta;$$

$$\tilde{Y}_{2,\,\pm 2}(\theta,\, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \sin^2\theta.$$

1.15 Разложение по сферическим функциям

Пусть непрерывная функция $f(\theta,\, \varphi)$, заданная на единичной сфере

$$S\left\{\rho = 1,\ 0 \leqslant \theta \leqslant \pi,\ 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi\right\},$$

разложена в равномерно сходящийся ряд

$$f(\theta,\, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} a_{nm} \tilde{Y}_{nm}(\theta,\, \varphi), \tag{1.81}$$

где $\tilde{Y}_{nm}(\theta, \varphi)$ – нормированные сферические функции.

Умножая обе части равенства (1.81) на $\tilde{Y}^*_{n'm'}(\theta, \varphi)\sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$ и интегрируя почленно по сфере S, в силу условия ортогональности (1.80) будем иметь

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} f(\theta, \varphi)\tilde{Y}^*_{n'm'}(\theta, \varphi)\sin\theta \mathrm{d}\theta = a_{n'm'}.$$

Отсюда, заменяя n' на n и m' на m, для коэффициентов разложения (1.81) получим следующие выражения:

$$a_{nm} = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} f(\theta, \varphi)\tilde{Y}^*_{nm}(\theta, \varphi)\sin\theta \mathrm{d}\theta.$$

Упражнения к первой главе

1. Доказать рекуррентное соотношение для полиномов Лежандра

$$(n+1)\,P_{n+1}(x) - (2n+1)\,xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0$$

$$(n = 1,\, 2,\, \dots)\,.$$

Отсюда, зная $P_0(x)$ и $P_1(x)$ найти $P_2(x)$, $P_3(x)$, $P_4(x)$ и $P_5(x)$.

2. Доказать соотношение

$$P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x) = (2n+1)\,P_n(x).$$

3. Найти корни уравнений

$$P_n(x) = 0 \quad \text{и} \quad P'_n(x) = 0 \quad \text{при } n \leqslant 4.$$

4. Доказать, что

$$P'_n(0) = 0, \quad \text{если } n \text{ чётное},$$

и

$$P'_n(0) = nP_{n-1}(0), \quad \text{если } n \text{ нечётное}.$$

5. Доказать, что при $|r| < 1$ справедливо разложение

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2r\cos\theta + r^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos\theta) r^n$$

(*производящая функция полиномов Лежандра*).

6. Функцию $f(x) = x^2$ разложить по полиномам Лежандра.

7. Функцию $f(x) = |x|$ разложить в ряд Фурье-Лежандра.

8. Доказать, что если функция $f(x)$ разлагается на отрезке $[-1, 1]$ в равномерно сходящийся ряд Фурье-Лежандра с коэффициентами c_n, то
$$\int_{-1}^{1} f^2(x)\mathrm{d}x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{2n+1} c_n^2.$$

9. Построить нормированные присоединённые функции Лежандра $P_4^m(x)$ $(m = 0, 1, 2, 3, 4)$ и $P_5^m(x)$ $(m = 0, 1, 2, 3, 4, 5)$.

10. Найти гармонические функции вида $u = f(\rho)$; $u = f(\theta)$ и $u = f(\varphi)$, где ρ, θ, φ – сферические координаты. Записать эти функции в декартовых координатах x, y, z.

11. Найти нормированные сферические функции $Y_{nm}(\theta, \varphi)$ порядка $n = 3$.

12. Функцию $f(\theta, \varphi) = \sin\varphi\cos^2\theta$ разложить по нормированным сферическим функциям.

Глава 2

Полиномы Чебышёва-Эрмита и Чебышёва-Лагерра

2.1 Полиномы Чебышёва-Эрмита

Полиномы *Чебышёва-Эрмита* определяются формулой

$$H_n(x) = (-1)^n \, e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right) \tag{2.1}$$

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

Из формулы (2.1) последовательно получаем

$$H_0(x) = 1e^{x^2} e^{-x^2} = 1;$$

$$H_1(x) = -e^{x^2} \frac{d}{dx} \left(e^{-x^2} \right) = 2x;$$

$$H_2(x) = e^{x^2} \frac{d^2}{dx^2} \left(e^{-x^2} \right) = 4x^2 - 2$$

и т. д. (рис. 2.1).

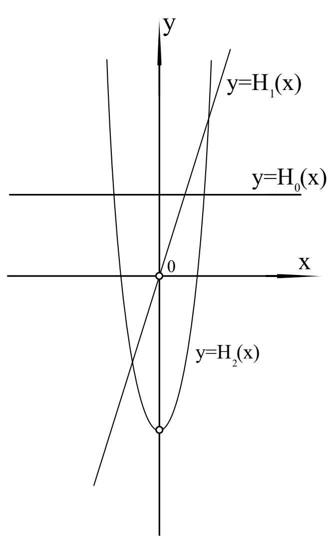

Рис. 2.1:

Выведем рекуррентную формулу для полиномов $H_n(x)$. Имеем

$$H_{n+1}(x) = (-1)^{n+1} \, e^{x^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} \left(e^{-x^2} \right) = (-1)^{n+1} \, e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(\frac{d}{dx} e^{-x^2} \right) =$$

$$= (-1)^{n+1} \, e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(-2x e^{-x^2} \right).$$

Применив формулу Лейбница, получим

$$H_{n+1}(x) = (-1)^n \, \mathrm{e}^{x^2} \left[2x \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(\mathrm{e}^{-x^2} \right) + 2n \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(\mathrm{e}^{-x^2} \right) \right].$$

Отсюда, используя формулу (2.1), находим *формулу понижения*

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \tag{2.2}$$

Например,

$$H_3(x) = 2xH_2(x) - 4H_1(x) = 2x \left(4x^2 - 2 \right) - 4 \cdot 2x = 8x^3 - 12x$$

и т. д.

Заметим, что из формулы (2.1) имеем

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(\mathrm{e}^{-x^2} \right) = (-1)^n \, \mathrm{e}^{-x^2} H_n(x). \tag{2.3}$$

2.2 Ортогональность полиномов Чебышёва-Эрмита

Определение. Две действительные функции $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ называются *ортогональными с весом* (нагрузкой) $p(x)$, где $p(x) > 0$ на данном промежутке $(a,\, b)$, если

$$\int_a^b p(x)\varphi(x)\psi(x)\mathrm{d}x = 0. \tag{2.4}$$

Если положить

$$\tilde{\varphi}(x) = \sqrt{p(x)}\varphi(x); \quad \tilde{\psi}(x) = \sqrt{p(x)}\psi(x),$$

то равенство (2.4) принимает следующий вид:

$$\int_a^b \tilde{\varphi}(x)\tilde{\psi}(x)\mathrm{d}x = 0. \tag{2.5}$$

Таким образом, при наличии соотношения (2.4) функции $\tilde{\varphi}(x)$ и $\tilde{\psi}(x)$ ортогональны в обычном смысле на промежутке $(a,\, b)$.

Теорема. *Полиномы Чебышёва-Эрмита $H_n(x)$ и $H_m(x)$ различных степеней ортогональны с весом $p(x) = \mathrm{e}^{-x^2}$ на интервале $(-\infty,\, +\infty)$, т. е.*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} H_m(x)H_n(x)\mathrm{d}x = 0 \tag{2.6}$$

при $m \neq n$.

Доказательство. Пусть для определённости $m > n$. Имеем

$$I_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} H_m(x) H_n(x) \mathrm{d}x = (-1)^m \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left(\mathrm{e}^{-x^2}\right) \mathrm{d}x. \tag{2.7}$$

Полагая

$$u = H_n(x); \quad \mathrm{d}v = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left(-\mathrm{e}^{-x^2}\right) \mathrm{d}x$$

и интегрируя по частям правую часть формулы (2.7), получим

$$I_{mn} = (-1)^m \left[H_n(x) \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(\mathrm{e}^{-x^2}\right) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \\ - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} H_n(x) \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(\mathrm{e}^{-x^2}\right) \mathrm{d}x \Bigg]. \tag{2.8}$$

Как известно, при $x \to \pm\infty$ показательная функция e^{x^2} растёт быстрее любого полинома $Q(x)$, т. е. $\lim\limits_{x\to\pm\infty} \dfrac{Q(x)}{\mathrm{e}^{x^2}} = \lim\limits_{x\to\pm\infty} Q(x)\mathrm{e}^{-x^2} = 0$. Поэтому, учитывая формулу (2.3), имеем

$$H_n(x) \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(\mathrm{e}^{-x^2}\right) \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} = \frac{(-1)^{m-1} H_n(x) H_{m-1}(x)}{\mathrm{e}^{x^2}} \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} = 0.$$

Следовательно, формула (2.8) принимает следующий вид:

$$I_{mn} = (-1)^{m+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} H_n(x) \frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}x^{m-1}} \left(\mathrm{e}^{-x^2}\right) \mathrm{d}x.$$

Таким образом, после m-кратного интегрирования по частям, получим

$$I_{mn} = (-1)^{m+n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} H_n(x) \mathrm{d}x. \tag{2.9}$$

Отсюда, учитывая, что

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} H_n(x) = 0 \quad \text{при } m > n, \text{ будем иметь } I_{mn} = 0.$$

$\square$

2.3 Нормировка полиномов Чебышёва-Эрмита

Полагая $m = n$ в формуле (2.9) предыдущего параграфа, используя известный интеграл Эйлера-Пуассона

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$$

и учитывая, что $\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} H_n(x)$ есть постоянная, получим

$$I_{nn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} H_n^2(x) \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} H_n(x) \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} H_n(x) \sqrt{\pi}. \tag{2.10}$$

Но очевидно,

$$H_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(\mathrm{e}^{-x^2} \right) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2} \left[\mathrm{e}^{-x^2} (-2x)^n + \ldots \right] = (2x)^n + \ldots,$$

где точками обозначены члены полинома более низких степеней. Поэтому

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} H_n(x) = 2^n \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} (x^n) = 2^n n!$$

Подставив этот результат в формулу (2.10), будем иметь

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} H_n^2(x) \mathrm{d}x = 2^n n! \sqrt{\pi}. \tag{2.11}$$

Отсюда, если положить

$$\tilde{H}_n(x) = \frac{H_n(x)}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}}}, \tag{2.12}$$

получим нормированные полиномы Эрмита, удовлетворяющие условию

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} \tilde{H}_m(x) \tilde{H}_n(x) \mathrm{d}x = \delta_{mn},$$

где δ_{mn} – символ Кронекера.

Наконец, полагая

$$h_n(x) = \mathrm{e}^{-\dfrac{x^2}{2}} \tilde{H}_n(x) = \frac{H_n(x) \mathrm{e}^{-\dfrac{x^2}{2}}}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}}}, \tag{2.13}$$

будем иметь ортогональную систему функций на интервале $(-\infty, +\infty)$ (*функции Чебышёва-Эрмита*)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h_m(x) h_n(x) \mathrm{d}x = \delta_{mn}.$$

2.4 Дифференциальное уравнение Эрмита

Дифференциальное уравнение второго порядка

$$y'' - 2xy' + \lambda y = 0, \tag{2.14}$$

где λ – числовой параметр, называется *уравнением Эрмита.*

Покажем, что полиномы Чебышёва-Эрмита $H_n(x)$ удовлетворяют дифференциальному уравнению Эрмита (2.14).

Пусть

$$u = \mathrm{e}^{-x^2};$$

тогда

$$u' = \mathrm{e}^{-x^2}(-2x) = -2xu,$$

т. е.

$$u' + 2xu = 0.$$

Дифференцируя это равенство $n+1$ раз, на основании формулы Лейбница будем иметь

$$u^{(n+2)} + 2xu^{(n+1)} + 2\,(n+1)\,u^{(n)} = 0. \tag{2.15}$$

Из определения полиномов Чебышёва-Эрмита (§(2.1)) следует, что

$$H_n(x) = (-1)^n\,\mathrm{e}^{x^2}u^{(n)};$$

отсюда

$$u^{(n)} = (-1)^n\,\mathrm{e}^{-x^2}H_n(x).$$

Подставляя это выражение в формулу (2.15) и сокращая все члены её на постоянный множитель $(-1)^n$, получим

$$\left[\mathrm{e}^{-x^2}H_n(x)\right]'' + 2x\left[\mathrm{e}^{-x^2}H_n(x)\right]' + (2n+2)\,\mathrm{e}^{-x^2}H_n(x) = 0.$$

Выполняя дифференцирование, находим

$$\mathrm{e}^{-x^2}H_n''(x) + 2\mathrm{e}^{-x^2}(-2x)\,H_n'(x) + \mathrm{e}^{-x^2}\left(4x^2-2\right)H_n(x) + \\ + 2x\left[\mathrm{e}^{-x^2}H_n'(x) + \mathrm{e}^{-x^2}(-2x)\,H_n(x)\right] + (2n+2)\,\mathrm{e}^{-x^2}H_n(x)$$

или после сокращения обеих частей последнего равенства на e^{-x^2} и выполнения элементарных преобразований окончательно будем иметь

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0. \tag{2.16}$$

Отсюда вытекает, что полином Чебышёва-Эрмита $H_n(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению Эрмита (2.14), если параметр λ имеет значение

$$\lambda = 2n \quad (n = 0,\,1,\,2,\,\ldots). \tag{2.17}$$

2.5 Краевая задача для полиномов Чебышёва-Эрмита

Рассмотрим дифференциальное уравнение Эрмита

$$y'' - 2xy' + \lambda y = 0. \tag{2.18}$$

Для квантовой механики представляют интерес те нетривиальные решения $y = y(x) \not\equiv 0$ уравнения (2.18), которые имеют полиномиальный порядок роста при $|x| \to \infty$, т. е. такие, что при некотором натуральном числе N справедливо предельное соотношение

$$\lim_{|x|\to\infty} \frac{y(x)}{x^N} = 0. \tag{2.19}$$

Оказывается, что уравнение Эрмита допускает решения, удовлетворяющие условию (2.19) лишь при строго определённых значениях параметра λ (*собственные значения задачи*); а именно, значения λ определяются формулой (2.17), причём соответствующая функция (*собственная функция задачи*) является полиномом Чебышёва-Эрмита с точностью до множителя пропорциональности.

Теорема. *Дифференциальное уравнение Эрмита (2.18) имеет нетривиальные решения $y = y(x)$, удовлетворяющие условию (2.19) тогда и только тогда, когда выполнено условие*

$$\lambda = 2n \quad (n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)\,, \tag{2.20}$$

причём

$$y = cH_n(x),$$

где c $(c \neq 0)$ – постоянный множитель.

Доказательство. Будем искать нужное решение уравнения Эрмита (2.18) в форме степенного ряда

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k. \tag{2.21}$$

Дифференцируя формулу (2.21) почленно, находим

$$y' = \sum_{k=0}^{\infty} k c_k x^{k-1}$$

и

$$y'' = \sum_{k=0}^{\infty} k\,(k-1)\,c_k x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)\,(k+1)\,c_{k+2} x^k.$$

Подставляя выражения для y, y' и y'' в левую часть дифференциального уравнения (2.18), получим

$$\sum_{0}^{\infty} (k+2)\,(k+1)\,c_{k+2} x^k - \sum_{0}^{\infty} 2k c_k x^k + \sum_{0}^{\infty} \lambda c_k x^k \equiv 0$$

или

$$\sum_{0}^{\infty} \left[(k+2)\,(k+1)\,c_{k+2} - (2k-\lambda)\,c_k\right] x^k \equiv 0.$$

Отсюда для определения коэффициентов c_k ряда (2.21) получаем бесконечную систему уравнений

$$\begin{gathered} (k+2)\,(k+1)\,c_{k+2} - (2k-\lambda)\,c_k = 0 \\ (k = 0,\, 1,\, 2,\, \dots), \end{gathered}$$

т. е.

$$c_{k+2} = \frac{2k-\lambda}{(k+1)\,(k+2)} c_k \quad (k = 0,\, 1,\, 2,\, \dots). \tag{2.22}$$

Пусть $c_0 = 1$. Из рекуррентной формулы (2.22) последовательно получаем:

$$\begin{aligned} & c_2 = -\tfrac{\lambda}{2!}; \\ & c_4 = \tfrac{4-\lambda}{3\cdot 4} c_2 = -\tfrac{\lambda(4-\lambda)}{4!}; \\ & \dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{aligned}$$

Следовательно, дифференциальное уравнение (2.18) имеет частное решение вида

$$y_1(x) = 1 - \frac{\lambda}{2!} x^2 - \frac{\lambda\,(4-\lambda)}{4!} x^4 - \dots, \tag{2.23}$$

являющееся ЧЁТНОЙ ФУНКЦИЕЙ.

Аналогично полагая $c_1 = 1$, из формулы (2.22) будем иметь:

$$\begin{aligned} & c_3 = -\tfrac{2-\lambda}{3!}; \\ & c_5 = \tfrac{6-\lambda}{4\cdot 5} c_3 = \tfrac{(2-\lambda)(6-\lambda)}{5!}; \\ & \dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{aligned}$$

Отсюда для дифференциального уравнения (2.18) получаем второе частное решение

$$y_2(x) = x + \frac{2-\lambda}{3!} x^3 + \frac{(2-\lambda)\,(6-\lambda)}{5!} x^5 + \dots, \tag{2.24}$$

представляющие собой НЕЧЁТНУЮ ФУНКЦИЮ.

Применяя признак сходимости Даламбера, нетрудно убедиться, что ряды (2.23) и (2.24) сходятся на всей числовой оси $-\infty < x < +\infty$. Докажем, что решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ линейно независимы. Действительно, рассмотрим детерминант Вронского

$$W(x) = \begin{vmatrix} y_1(x) & y_2(x) \\ y_1'(x) & y_2'(x) \end{vmatrix}.$$

При $x = 0$ на основании формул (2.23) и (2.24) имеем

$$W(0) = \begin{vmatrix} y_1(0) & y_2(0) \\ y_1'(0) & y_2'(0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \neq 0.$$

Следовательно, в силу известной теоремы из теории дифференциальных уравнений, решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ линейно независимы. Поэтому общее решение дифференциального уравнения (2.18), включающее ВСЕ решения этого уравнения, имеет вид

$$y = Ay_1(x) + By_2(x), \tag{2.25}$$

где A и B – произвольные постоянные.

Рассмотрим отдельно два случая. □

Случай 1. Пусть

$$\lambda = 2n, \tag{2.26}$$

где n – целое неотрицательное число. Тогда, если $\lambda = 4m$ ($m = 0, 1, 2, \dots$), то ряд (2.23) обрывается; если же $\lambda = 4m+2$ ($m = 0, 1, 2, \dots$), то обрывается ряд (2.24). Таким образом, в этом случае дифференциальное уравнение Эрмита имеет полиномиальное решение $Y = (x)$. Что касается второго линейно независимого решения $Z = Z(x)$, выражаемого соответственно необрывающимся рядом (2.23) или (2.24), то оно при $|x| \to \infty$ растёт быстрее любой степенной функции x^N, т. е.

$$\lim_{|x|\to\infty} \left| \frac{Z(x)}{x^N} \right| = \infty.$$

Действительно, из рекуррентного соотношения (2.22) следует, что для любого λ при достаточно большом значении k ($k \geqslant N$) коэффициенты c_k необрывающегося ряда (2.23) или (2.24) сохраняют один и тот же знак. Поэтому

$$|Z(x) - Q_N(x)| \geqslant |c_{N+2}|\,|x|^{N+2}, \tag{2.27}$$

где $Q_N(x)$ – полином, представляющий собой первые первые члены до степени x^N включительно, ряда (2.23) или соответственно ряда (2.24). Из неравенства (2.27) получаем

$$|Z(x)| = |[Z(x) - Q_N(x)] + Q_N(x)| \geqslant |Z(x) - Q_N(x)| - \\ - |Q_N(x)| \geqslant |c_{N+2}|\, |x|^{N+2} - |Q_N(x)| = |x|^{N+2} \left\{ |c_{N+2}| - \frac{Q_N(x)}{|x|^{N+2}} \right\}.$$

Так как, очевидно,

$$\lim_{|x| \to \infty} \frac{|Q_N(x)|}{|x|^{N+2}} = 0,$$

то из последнего неравенства имеем

$$|Z(x)| \geqslant \frac{1}{2} |c_{N+2}|\, |x|^{N+2} \qquad (2.28)$$

при $|x| \geqslant X$, где $c_{N+2} \neq 0$, и N – натуральное число, которое можно считать любым достаточно большим.

Таким образом, решение $Z(x)$ при $|x| \to \infty$ растёт быстрее любой степени $|x|^N$ и, следовательно, соотношение (2.19) не может быть выполнено ни при каком натуральном N.

На основании формулы (2.25) заключаем, что всякое решение дифференциального уравнения (2.18), имеющее полиномиальный рост при $|x| \to \infty$, пропорционально полиному $Y(x)$.

Выше (§2.5) мы видели, что при наличии соотношения (2.26) полином Чебышёва-Эрмита $H_n(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению (2.18). Так как сейчас показано, что решение $Y = Y(x)$ в форме полинома единственно с точностью до коэффициента пропорциональности, то

$$Y = cH_n(x),$$

где c – произвольная постоянная, отличная от нуля.

Случай 2. Пусть

$$\lambda \neq 2n,$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$ Тогда оба решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ выражаются бесконечными рядами с ненулевыми коэффициентами c_k, сохраняющими постоянный знак, начиная с некоторого места. Совершенно аналогично тому, как это было сделано в случае 1, доказывается, что оба решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ при $|x| \to \infty$ растут быстрее любой степени $|x|^N$, где N – произвольное натуральное число.

Рассмотрим теперь произвольное нетривиальное решение $y = y(x)$, выражаемое формулой (2.25) ($|A| + |B| \neq 0$). Так как $y_1(x)$ не меняет знака при замене x на $-x$, а $y_2(x)$ меняет свой знак на обратный при замене x на $-x$, то один из степенных рядов $y(x)$ или $y(-x)$ относительно переменой x, начиная с некоторого места, будет обладать коэффициентами неизменного знака, причём по меньшей мере или чётные или нечётные коэффициенты этого ряда отличны от нуля. Отсюда следует, что любое нетривиальное решение $y(x)$ дифференциального уравнения Эрмита в случае 2 или при $x \to +\infty$, или при $x \to -\infty$ растёт быстрее произвольной степени $|x|^N$, и значит в этом случае нет решений, кроме тривиального, удовлетворяющих условию (2.19).

Итак, полиномы Чебышёва-Эрмита являются единственными с точностью до коэффициента пропорциональности нетривиальными решениями дифференциального уравнения Эрмита (2.18), имеющими полиномиальный рост при $|x| \to \infty$, т. е. удовлетворяющими условию (2.19).

2.6 Краевая задача для функций Чебышёва-Эрмита

Рассмотрим функции Чебышёва-Эрмита, определяемые формулой (2.13) (§2.4):

$$h_n(x) = k_n \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \tag{2.29}$$

где

$$k_n = \frac{1}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}}} \quad (n = 0,\ 1,\ 2,\ \dots).$$

Выведем дифференциальное уравнение, которому удовлетворяют функции $h_n(x)$. Из формулы (2.29) имеем

$$H_n(x) = \frac{1}{k_n} \mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}} h_n(x). \tag{2.30}$$

Как известно (§2.5), полиномы Чебышёва-Эрмита $H_n(x)$ удовлетворяют дифференциальному уравнению Эрмита

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0.$$

На основании формулы (2.30) после сокращения на числовой множитель k_n^{-1} получим

$$\left[\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}} h_n(x)\right]'' - 2x\left[\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}} h_n(x)\right]' + 2n\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}} h_n(x) = 0.$$

Выполняя дифференцирование и сокращая обе части полученного равенства на общий множитель $\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}}$, будем иметь

$$h_n''(x) + 2xh_n'(x) + \left(x^2+1\right) h_n(x) - \\ - 2x\left[h_n'(x) + xh_n(x)\right] + 2nh_n(x) = 0$$

или

$$h_n''(x) + \left(2n + 1 - x^2\right) h_n(x) = 0. \tag{2.31}$$

Таким образом, функции Чебышёва-Эрмита $h_n(x)$ удовлетворяет *модифицированному дифференциальному уравнению Эрмита*

$$y'' + \left(\mu - x^2\right) y = 0, \tag{2.32}$$

если

$$\mu = 2n + 1 \quad (n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)\,. \tag{2.33}$$

Функции Эрмита $h_n(x)$ ограничены на интервале $(-\infty,\, +\infty)$ и обладают единичной нормой (§(2.4))

$$\|h_n(x)\| = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} h_n^2(x)\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = 1. \tag{2.34}$$

Можно доказать, что функция $y = c \cdot h_n(x)$, где c – ненулевая произвольная постоянная, являются единственными нетривиальными решениями модифицированного дифференциального уравнения Эрмита (2.32), обладающими конечной нормой:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y^2\mathrm{d}x < +\infty,$$

причём параметр μ имеет значения вида (2.33).

2.7 Полиномы Чебышёва-Лагерра

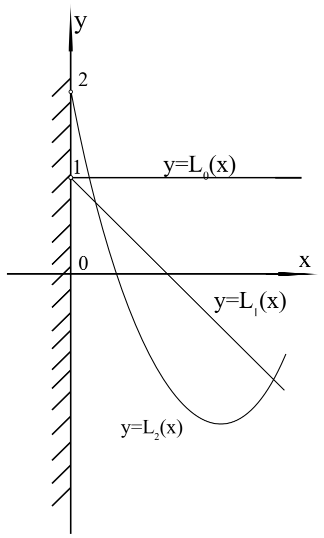

Рис. 2.2:

Полиномы Чебышёва-Лагерра могут быть определены формулой

$$L_n(x) = \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(x^n \mathrm{e}^{-x} \right) \quad (n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots\,). \tag{2.35}$$

Отсюда последовательно получаем:

$$L_0(x) = 1;$$

$$L_1(x) = \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(x\mathrm{e}^{-x} \right) = 1 - x;$$

$$L_2(x) = \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \left(x^2 \mathrm{e}^{-x} \right) = 2 - 4x + x^2;$$

$$L_3(x) = \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}x^3} \left(x^3 \mathrm{e}^{-x} \right) = 6 - 18x + 9x^2 - x^3$$

и т. д. (рис. 2.2).

Вообще, применяя формулу Лейбница, из формулы (2.35) будем иметь

$$L_n(x) = (-1)^n x^n + \frac{n}{1!} (-1)^{n-1} n x^{n-1} + \\ + \frac{n\,(n-1)}{2!} (-1)^{n-2} n\,(n-1)\, x^{n-2} + \dots + \frac{n!}{n!} n!$$

или

$$L_n(x) = (-1)^n \left[x^n - n^2 x^{n-1} + \frac{n^2\,(n-1)^2}{2!} + \dots + (-1)^n\, n! \right]. \tag{2.36}$$

Отсюда, в частности, получаем

$$L_n(0) = n!$$

Можно доказать, что все корни полинома $L_n(x)$ $(n \geqslant 1)$ действительны и расположены на интервале $(0,\, +\infty)$.

2.8 Ортогональность полиномов Чебышёва-Лагерра

Теорема. *Полиномы Чебышёва-Лагерра $L_m(x)$ и $L_n(x)$ различных степеней $(m \neq n)$ ортогональны с весом $p(x) = \mathrm{e}^{-x}$ на основном промежутке $0 \leqslant x < +\infty$, т. е.*

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{e}^{-x} L_m(x) L_n(x) \mathrm{d}x = 0 \tag{2.37}$$

при $m \neq n$.

Доказательство. Пусть

$$I_{mn} = \int_0^{+\infty} \mathrm{e}^{-x} L_m(x) L_n(x) \mathrm{d}x = \int_0^{+\infty} L_m(x) \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(x^n \mathrm{e}^{-x} \right) \mathrm{d}x, \tag{2.38}$$

причём для определённости положим $n > m$.

Интегрируя по частям правую часть формулы (2.38) и учитывая, что

$$\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^n \mathrm{e}^{-x} \right) \Big|_0^\infty = 0 \quad \text{при } n \geqslant 1,$$

будем иметь

$$I_{mn} = L_m(x) \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^n \mathrm{e}^{-x} \right) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_m(x) \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^n \mathrm{e}^{-x} \right) \mathrm{d}x =$$
$$= - \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_m(x) \frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}} \left(x^n \mathrm{e}^{-x} \right) \mathrm{d}x.$$

Повторяя в формуле (2.38) операцию интегрирования по частям последовательно n раз, находим

$$I_{mn} = (-1)^n \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} L_m(x) x^n \mathrm{e}^{-x} \mathrm{d}x. \tag{2.39}$$

Но согласно предположению $n > m$, поэтому

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} L_m(x) = 0,$$

так как порядок производной n выше степени полинома $L_m(x)$. Следовательно, из формулы (2.39) получаем

$$I_{mn} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} L_m(x) L_n(x) \mathrm{d}x = 0$$

при $n > m$.

Теорема доказана. □

Замечание. Из условия ортогональности (2.37) полиномов Чебышёва-Лагерра следует, что

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^m L_n(x)\mathrm{d}x = 0 \tag{2.40}$$

при $m = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots, n-1$ $(m < n)$.

Действительно, разделив степень x^m на полином $L_m(x)$, получаем

$$x^m = A_0 L_m(x) + Q_{m-1}(x),$$

где A_0 - постоянная и $Q_{m-1}(x)$ – полином степени $m-1$. Деля полученный остаток $Q_{m-1}(x)$ на $L_{m-1}(x)$ и повторяя этот процесс дальше, в итоге будем иметь

$$x^m = A_0 L_m(x) + A_1 L_{m-1}(x) + A_2 L_{m-2}(x) + \ldots A_m L_0(x),$$

где A_0, A_1, . . ., A_m – постоянные величины. Отсюда

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^m L_n(x)\mathrm{d}x = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} \sum_{k=0}^{m} A_k L_{m-k}(x) L_n(x)\mathrm{d}x =$$

$$= \sum_{k=0}^{m} A_k \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} L_{m-k}(x) L_n(x)\mathrm{d}x = 0,$$

если только $m < n$.

2.9 Нормировка полиномов Чебышёва-Лагерра

Полагая $m = n$ в формуле (2.39) предыдущего параграфа, будем иметь

$$I_{nn} = (-1)^n \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} L_n(x) x^n \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x.$$

На основании формулы (2.36) из §2.8 получаем

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} L_n(x) = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[(-1)^n x^n + \ldots\right] = (-1)^n n!$$

Поэтому

$$I_{nn} = n! \int_0^\infty x^n \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x = n!\Gamma(n+1),$$

где $\Gamma(n+1)$ – известный эйлеров интеграл,

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x = n!$$

Таким образом,

$$I_{nn} = \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-x} \left[L_n(x)\right]^2 \mathrm{d}x = (n!)^2 \tag{2.41}$$

$(n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)$, где, как всегда, $0! = 1$.

Из формулы (2.41) получаем, что *функции Чебышёва-Лагерра*

$$l_n(x) = \frac{1}{n!}\mathrm{e}^{-\frac{x}{2}} L_n(x) \tag{2.42}$$

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

образуют нормированную ортогональную систему на интервале $(0, +\infty)$, т. е.

$$\int_0^{\infty} l_m(x) l_n(x) \mathrm{d}x = \delta_{mn},$$

где δ_{mn} – символ Кронекера.

2.10 Присоединённые полиномы Чебышёва-Лагерра

Полином $L_n^m(x)$, определяемые формулой

$$L_n^m(x) = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left[L_n(x)\right], \tag{2.43}$$

где $L_n(x)$ – полином Чебышёва-Лагерра и $m = 0,\, 1,\, \dots,\, n$, называется *присоединённым полиномом Чебышёва-Лагерра порядка m.*

Так как (см. §2.8)

$$L_m(x) = (-1)^m \left[x^n - \frac{n^2}{1!}x^{n-1} + \frac{n^2\,(n-1)^2}{2!}x^{n-2} + \dots + (-1)^n\, n!\right],$$

то

$$L_n^m(x) = (-1)^n \left[\frac{n!}{(n-m)!}x^{n-m} - \frac{n^2}{1!}\frac{(n-1)!}{(n-m-1)!}x^{n-m-1} + \right.$$
$$\left. \frac{n^2\,(n-1)^2}{2!} \cdot \frac{(n-2)!}{(n-m-2)!}x^{n-m-2} + \dots\right]. \tag{2.44}$$

Например, для полинома

$$L_2(x) = x^2 - 4x + 2$$

получаем:

$$L_2^0(x) = x^2 - 4x + 2;$$
$$L_2^1(x) = 2x - 4;$$
$$L_2^2(x) = 2.$$

2.11 Ортогональность присоединённых полиномов Чебышёва-Лагерра

Теорема. *Присоединённые полиномы Чебышёва-Лагерра $L_k^m(x)$ и $L_n^m(x)$ одного и того же порядка m и различных степеней $(k \neq m)$ ортогональны с весом $p_m(x) = x^m \mathrm{e}^{-x}$ на основном интервале $(0, +\infty)$, т. е.*

$$\int_0^\infty x^m \mathrm{e}^{-x} L_k^m(x) L_n^m(x) \mathrm{d}x = 0$$

при $k \neq n$.

Доказательство. Пусть $m > 0$ и

$$I_{kn} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^m L_k^n(x) L_n^m(x) \mathrm{d}x = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^m L_k^m(x) \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_n(x) \mathrm{d}x, \qquad (2.45)$$

причём для определённости предположим, что $k < n$. Интегрируя по частям m раз правую часть формулы (2.45) и учитывая, что внеинтегральные члены

$$\frac{\mathrm{d}^s}{\mathrm{d}x^s} \left[\mathrm{e}^{-x} x^m L_k^m(x) \right] \Big|_0^\infty = 0$$

$(s = 0,\, 1,\, \ldots,\, m - 1)$, будем иметь

$$I_{kn} = (-1)^n \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\mathrm{e}^{-x} x^m L_k^m(x) \right] L_n(x) \mathrm{d}x. \qquad (2.46)$$

На основании формулы Лейбница выражение

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\mathrm{e}^{-x} x^m L_k^m(x) \right]$$

представляет собой произведение показательной функции e^{-x} на некоторый полином степени k, т. е.

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\mathrm{e}^{-x} x^m L_k^m(x) \right] = \mathrm{e}^{-x} \sum_{p=0}^{k} A_p x^p,$$

где A_p $(p = 0,\, \ldots,\, k)$ – постоянные коэффициенты. В силу замечания из §2.9 имеем

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^p L_n(x) \mathrm{d}x = 0 \qquad \text{при } p < n.$$

Так как согласно допущению $p \leqslant k < n$, то из формулы (2.46) выводим

$$I_{kn} = (-1)^m \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} \sum_{p=0}^{k} A_p x^p L_n(x) \mathrm{d}x =$$

$$= (-1)^m \sum_{p=0}^{k} A_p \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^p L_n(x) \mathrm{d}x = 0,$$

что и требовалось доказать. □

2.12 Нормировка присоединённых полиномов Чебышёва-Лагерра

Полагая $k = n$ в формуле (2.46) предыдущего параграфа, будем иметь

$$I_{nm} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^m \left[L_n^m(x)\right]^2 \mathrm{d}x = (-1)^n \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\mathrm{e}^{-x} x^m L_n^m(x)\right] L_n(x) \mathrm{d}x =$$
$$= (-1)^m \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} Q_n(x) L_n(x) \mathrm{d}x, \quad (2.47)$$

где $Q_n(x)$ – полином степени n. Путём последовательного деления полином $Q_n(x)$ можно разложить по полиномам Чебышёва-Лагерра, т. е. представить этот полином в виде

$$Q_n(x) = B_0 L_n(x) + B_1 L_{n-1}(x) + \cdots + B_n L_0(x),$$

где B_0, B_1, ..., B_n – постоянные коэффициенты. Отсюда, используя ортогональность полиномов Чебышёва-Лагерра (§2.9) и величины их нормы [формула (2.41)], на основании формулы (2.47) получаем

$$I_{nn} = (-1)^m B_0 \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} \left[L_n(x)\right]^2 \mathrm{d}x = (-1)^m B_0 \left(n!\right)^2. \quad (2.48)$$

Коэффициент B_0 можно найти, если разделить старший коэффициента полинома $Q_n(x)$ на старший коэффициент полинома $L_n(x)$.

Так как (§2.11)

$$L_n(x) = (-1)^n x^n + \dots$$

и

$$L_n^m(x) = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_n(x) = (-1)^n \frac{n!}{(n-m)!} x^{n-m} + \dots,$$

то в силу формулы Лейбница имеем

$$Q_n(x) = \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\mathrm{e}^{-x} x^m L_n^m(x)\right] = (-1)^m (-1)^n \frac{n!}{(n-m)!} x^n.$$

Подставляя это выражение в формулу (2.48), окончательно получим

$$I_{nn} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^m \left[L_n^m(x)\right]^2 \mathrm{d}x = \frac{(n!)^2}{(n-m)!} \tag{2.49}$$

$$(m = 0,\, 1,\, \ldots,\, n)\,.$$

Из формулы (2.49) следует, что *присоединённые функции Чебышёва-Лагерра*

$$l_n^m(x) = \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n!)^3}} \mathrm{e}^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{m}{2}} L_n^m(x) \tag{2.50}$$

$$(m = 0,\, 1,\, \ldots,\, n; \quad n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots)$$

образуют ортогональную и нормированную систему функций в интервале $(0, +\infty)$.

2.13 Дифференциальное уравнение Лагерра

Дифференциальное уравнение

$$xy'' + (1-x)\,y' + \lambda y = 0, \tag{2.51}$$

где λ – числовой параметр, называется *уравнением Лагерра*. Уравнение (2.51) обладает регулярной особой точкой $x = 0$ [Сми74].

Покажем, что полиномы Чебышёва-Лагерра

$$y = L_n(x) \equiv \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(x^n \mathrm{e}^{-x}\right)$$

удовлетворяют дифференциальному уравнению (2.51).

Пусть

$$u = x^n \mathrm{e}^{-x} \tag{2.52}$$

и, следовательно,

$$L_n(x) = \mathrm{e}^x u^{(n)}. \tag{2.53}$$

Дифференцируя равенство (2.52), находим

$$u' = nx^{n-1}\mathrm{e}^{-x} = x^n \mathrm{e}^{-x} = \left(\frac{n}{x} - 1\right) u.$$

Отсюда
$$xu' + (x - n)\,u = 0.$$

Продифференцируя последнее уравнение $(n+1)$ раз, на основании формулы Лейбница будем иметь

$$xu^{(n+2)} + (n+1)\,u^{(n+1)} + (x-n)\,u^{(n+1)} + (n+1)\,u^{(n)} = 0.$$

или
$$xu^{(n+2)} + (1+x)\,u^{(n+1)} + (n+1)\,u^{(n)} = 0. \tag{2.54}$$

Так как в силу формулы (2.53)

$$u^{(n)} = \mathrm{e}^{-x} L_n(x),$$

то получаем

$$x\left[\mathrm{e}^{-x} L_n(x)\right]'' + (1+x)\left[\mathrm{e}^{-x} L_n(x)\right]' + (n+1)\,\mathrm{e}^{-x} L_n(x) = 0$$

или, выполняя дифференцирование в этом уравнении и сокращая обе части полученного уравнения на e^{-x}, то будем иметь

$$x\left[L_n''(x) - 2L_n'(x) + L_n(x)\right] + (1+x)\left[L_n'(x) - L_n(x)\right] + (n+1)\,L_n(x) = 0$$

или
$$xL_n''(x) + (1-x)\,L_n'(x) + nL_n(x) = 0. \tag{2.55}$$

Таким образом, функция $y = L_n(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению Лагерра при значениях параметра

$$\lambda = n \qquad (n = 0,\,1,\,2,\,\ldots\,). \tag{2.56}$$

Если продифференцировать m раз дифференциальное уравнение Лагерра (2.51), то будем иметь

$$xy^{(m+2)} + my^{(m+1)} + (1-x)\,y^{(m+1)} - my^{(m)} + \lambda y^{(m)} = 0$$

или
$$xy^{(m+2)} + (m+1-x)\,y^{(m+1)} + (\lambda - m)\,y^{(m)} = 0.$$

Отсюда, полагая
$$y^{(m)} = z,$$

получим *присоединённое дифференциальное уравнение Лагерра*

$$xz'' + (m+1-x)\,z' + (\lambda - m)\,z = 0, \tag{2.57}$$

где m – неотрицательное целое число и λ – произвольный параметр.

Так как полиномы Чебышёва-Лагерра $L_n(x)$ удовлетворяют дифференциальному уравнению Лагерра (2.51), то присоединённые полиномы Чебышёва-Лагерра

$$L_n^m(x) = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_n(x)$$

будут при $\lambda = n$ и $m \leqslant n$ удовлетворять присоединённому уравнению Лагерра (2.57), т. е.

$$x\,[L_n^m(x)]'' + (m+1-x)\,[L_n^m(x)]' + (n-m)\,L_n^m(x) = 0. \tag{2.58}$$

Выведем ещё дифференциальное уравнение для присоединённых функций Чебышёва-Лагерра [формула (2.50)]

$$l_n^m(x) = k_n \mathrm{e}^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{m}{2}} L_n^m(x), \tag{2.59}$$

где

$$k_n \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n!)^3}}.$$

Из формулы (2.59) имеем

$$L_n^m(x) = \frac{1}{k_n} \mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x).$$

Подставляя эту функцию в дифференциальное уравнение (2.58), после сокращения на отличный от нуля числовой множитель k_n^{-1} получим

$$x\left[\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x)\right] + (m+1-x)\left[\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x)\right]' + \\ + (n-m)\,\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x) = 0. \tag{2.60}$$

Имеем

$$\left[\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x)\right]' = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}}\,[l_n^m(x)]' + \\ + \left(\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x) + \frac{m}{2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}-1} l_n^m(x)\right) l_n^m(x)$$

и

$$\left[\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} l_n^m(x)\right]'' = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}}\,[l_n^m(x)]'' + 2\left(\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} - \right. \\ \left. -\frac{m}{2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}-1}\right)[l_n^m(x)]' + \left[\frac{1}{4}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}} - \frac{m}{2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}-1} + \right. \\ \left. + \frac{m}{2}\left(\frac{m}{2}+1\right)\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{m}{2}-2}\right] l_n^m(x).$$

Подставляя эти выражения в дифференциальное уравнение (2.60) и сокращая обе части полученного равенства на $\mathrm{e}^{\frac{x}{2}} x^{-\frac{x}{2}}$, находим

$$x\left\{[l_n^m(x)]'' + \left(1 - \frac{m}{x}\right)[l_n^m(x)]' + \left[\frac{1}{4} - \frac{m}{2x} + \frac{m\,(m+2)}{4x^2}\right] l_n^m(x)\right\} + \\ + (m+1-x)\left\{[l_n^m(x)] + \left(\frac{1}{2} - \frac{m}{2x}\right) l_n^m(x)\right\} + (n-m)\, l_n^m(x) = 0$$

или

$$x\,[l_n^m(x)]'' + [l_n^m(x)]' + \left(\frac{1-m}{2} + n - \frac{x}{4} - \frac{m^2}{4x}\right) l_n^m(x) = 0. \tag{2.61}$$

Таким образом, присоединённые функции Чебышёва-Лагерра

$$v = l_n^m(x) \equiv k_n \mathrm{e}^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{x}{2}} L_n^m(x),$$

где

$$L_n^m(x) = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_n(x) \equiv \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\left[\mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^n \mathrm{e}^{-x}\right)\right],$$

удовлетворяет *модифицированному дифференциальному уравнению Лагерра*

$$(xv')' + \left(\frac{1-m}{2} + \lambda - \frac{x}{4} - \frac{m^2}{4x}\right) v = 0, \tag{2.62}$$

где

$$\lambda = n, \tag{2.63}$$

причём n – целое число, большее или равное m ($m = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$).

2.14 Краевая задача для присоединённых полиномов Чебышёва-Лагерра

Рассмотрим присоединённое уравнение Лагерра

$$xy'' + (m+1-x)\,y' + (\lambda - m)\,y = 0, \tag{2.64}$$

где m – целое неотрицательное число и λ – числовой параметр. Присоединённые полиномы Чебышёва-Лагерра $L_n^m(x)$ с точностью до коэффициента пропорциональности могут быть определены как нетривиальные решения y уравнения (2.64), конечные при $x = 0$ и имеющие степенной рост при $x \to +\infty$, т. е. функции

$$y(x) = cL_n^m(x) \qquad (c \neq 0)$$

являются единственными решениями дифференциального уравнения (2.64), удовлетворяющими следующим краевым условиям:

$$y(0) \neq \infty; \qquad \lim_{x \to +\infty} \frac{y(x)}{x^N} = 0, \tag{2.65}$$

где N – некоторое натуральное число, причём

$$\lambda = n \geqslant m$$

(*собственные значения задачи*).

Дадим намётку доказательства этого утверждения [Кур56]. Так как дифференциальное уравнение (2.64) имеет регулярную особую точку $x = 0$, то согласно теории Фукса [Сми74] это дифференциальное уравнение допускает решение в форме обобщённого степенного ряда

$$y = x^\sigma \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k, \tag{2.66}$$

где σ – некоторое постоянное число, не обязательно целое и $c_0 \neq 0$. Отсюда

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{k+\sigma}. \tag{2.67}$$

Дифференцируя почленно ряд (2.67), будем иметь

$$y' = \sum_{k=0}^{\infty} (k+\sigma)\, c_k x^{k+\sigma-1} = \sum_{k=-1}^{\infty} (k+\sigma+1)\, c_{k+1} x^{k+\sigma}$$

и

$$y'' = \sum_{k=-1}^{\infty} (k+\sigma)\,(k+\sigma+1)\, c_{k+1} x^{k+\sigma-1}.$$

Подставляя эти выражения в дифференциальное уравнение (2.64) и выделяя отдельно члены, соответствующие индексу $k = -1$, получим

$$[(\sigma-1)\,\sigma + (m+1)\,\sigma]\, c_0 x^{\sigma-1} + \sum_0^{\infty} (k+\sigma)\,(k+\sigma+1)\, c_{k+1} x^{k+\sigma} +$$

$$+ \sum_0^{\infty} (m+1)\,(k+\sigma+1)\, c_{k+1} x^{k+\sigma} - \sum_0^{\infty} (k+\sigma)\, c_k x^{k+\sigma} +$$

$$+ \sum_0^{\infty} (\lambda - m)\, c_k x^{k+\sigma} \equiv 0$$

или

$$\sigma\left(\sigma+m\right)c_0x^{\sigma-1}+\sum_0^\infty\left[\left(k+\sigma+1\right)\left(k+\sigma+m+1\right)c_{k+1}+\right.$$
$$\left.+\left(\lambda-m-k-\sigma\right)c_k\right]x^{k+\sigma}\equiv 0. \quad (2.68)$$

Отсюда, приравнивая к нулю коэффициент при $x^{\sigma-1}$ и учитывая, что $c_0\neq 0$, находим *определяющее уравнение*

$$\sigma\left(\sigma+m\right)=0.$$

Следовательно, $\sigma=\sigma_{1,2}$, где

$$\sigma_1=0;\qquad \sigma_2=-m. \quad (2.69)$$

Если $m>0$, то решение $y=y_2(x)$, соответствующее показателю $\sigma=\sigma_2=-m$, как видно из формулы (2.66), обращается в бесконечность порядка m при $x=0$. В силу первого из условий (2.65) функция $y_2(x)$ не является решением нашей краевой задачи.

Если $m=0$, то тогда

$$\sigma_1=\sigma_2=0.$$

В этом случае первое решение $y=y_1(x)$ дифференциального уравнения (2.64) представляет собой степенной ряд (2.66), а второе линейно независимое решение имеет более сложный вид [Сми74]

$$y_2(x)=\ln x\sum_{k=0}^\infty c'_kx^k\qquad \left(c'_0\neq 0\right).$$

Отсюда

$$y_2(0)=\infty.$$

Таким образом, остаётся рассмотреть лишь случай

$$\sigma=0.$$

Приравнивая к нулю все коэффициенты ряда (2.68) при $\sigma=0$, находим бесконечную систему соотношений

$$\left(k+1\right)\left(k+m+1\right)c_{k+1}+\left(\lambda-m-k\right)c_k=0 \quad (2.70)$$

$$\left(k=0,\,1,\,2,\,\ldots\right).$$

Отсюда для коэффициентов степенного ряда (2.66) получаем *рекуррентную формулу*

$$c_{k+1} = \frac{m+k-\lambda}{(k+1)\,(k+m+1)} c_k \tag{2.71}$$

$$(k = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)\,,$$

где коэффициент c_0 является произвольным.

Из формулы (2.71) последовательно выводим

$$c_1 = \frac{m-\lambda}{1\,(m+2)} c_0;$$

$$c_2 = \frac{m+1-\lambda}{2\,(m+2)} c_1 = \frac{(m-\lambda)\,(m+1-\lambda)}{2!\,(m+1)\,(m+2)} c_0;$$

$$\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot$$

Отсюда

$$y = c_0 \left[1 + \frac{m-\lambda}{m+1} \cdot \frac{x}{1!} + \frac{(m-\lambda)\,(m+1-\lambda)}{(m+1)\,(m+2)} \cdot \frac{x^2}{2!} + \dots \right]. \tag{2.72}$$

Применяя известный признак сходимости Даламбера, получим

$$\lim_{k\to\infty} \left| \frac{c_{k+1}x^{k+1}}{c_k x^k} \right| = |x| \lim_{k\to\infty} \left| \frac{m+k-\lambda}{(k+1)\,(k+m+1)} \right| =$$

$$= |x| \lim_{x\to\infty} \frac{\frac{1}{k} \left| \frac{m}{k} + 1 - \frac{\lambda}{k} \right|}{\left(1+\frac{1}{k}\right)\left(1+\frac{m+1}{k}\right)} = 0.$$

Следовательно, ряд (2.72) сходится и притом абсолютно на всей оси $-\infty < x < +\infty$ и представляет собой решение дифференциального уравнения (2.64).

Рассмотрим два случая.

Случай 1. Пусть

$$\lambda = n \geqslant m, \tag{2.73}$$

где n – целое неотрицательное число. Тогда из формулы (2.71), очевидно, получаем

$$c_{n-m+1} = c_{n-m+2} = \dots = 0$$

и значит решение y представляет собой полином

$$y = c_0 \left[1 + \frac{m-n}{m+1} \cdot \frac{x}{1!} + \frac{(m-n)\,(m-n+1)}{(m+1)\,(m+2)} \cdot \frac{x^2}{2!} + \dots + \right.$$

$$\left. + \frac{(m-n)\,(m-n+1)\dots(-1)}{(m+1)\,(m+2)\dots n} \cdot \frac{x^{n-m}}{(n-m)!} \right]$$

степени $(n-m)$.

Так как при условии (2.73) присоединённый полином Чебышёва-Лагерра $L_n^m(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению (2.64) и y есть единственное решение этого уравнения в форме полинома, то

$$y = cL_n^m(x), \tag{2.74}$$

где c – отличная от нуля произвольная постоянная. Очевидно, полином y является решением нашей краевой задачи.

Случай 2. Пусть

$$\lambda \neq n \qquad (n = m,\, m+1,\, m+2,\, \dots)\,. \tag{2.75}$$

Тогда ряд (2.72) – необрывающийся, причём все коэффициенты c_k его отличны от нуля.

Для фиксированного λ выберем натуральное число p такое, что

$$p > \lambda. \tag{2.76}$$

Тогда при $k > p+1$ все коэффициенты ряда (2.72),

$$c_k = \frac{c_0}{k!} \cdot \frac{(m-\lambda)\,(m+1-\lambda)\dots(m+k-1-\lambda)}{(m+1)\,(m+2)\dots(m+k)} \tag{2.77}$$

будут сохранять постоянный знак.

Производя оценку по модулю, имеем

$$\begin{aligned} |c_k| = ||c_0|\,(m-\lambda)\,(m+1-\lambda)\dots(m+p-\lambda)| \times \\ \times\, \frac{(m+p+1-\lambda)\dots(m+k-p-1)}{(m+1)\,(m+2)\dots(m+k)} \cdot \frac{1}{k!} > \\ > b(\lambda)\frac{(m+1)\,(m+2)\dots(m+k-p-1)}{(m+1)\,(m+2)\dots(m+k)} \cdot \frac{1}{k!} = \\ = \frac{b(\lambda)}{(m+k-p)\dots(m+k)} \cdot \frac{1}{k!} \end{aligned} \tag{2.78}$$

$$(k = p+2,\, p+3,\, \dots)\,,$$

где

$$b(\lambda) = |c_0|\,|(m-\lambda)\,(m+1-\lambda)\dots(m+p-\lambda)| \neq 0.$$

Из формулы (2.72), учитывая постоянство знаков коэффициентов c_k при $k > p+1$, а также оценку (2.78), для $0 \leqslant x < +\infty$ находим

$$|y - Q_{p+1}(x)| \geqslant b(\lambda) \sum_{k=p+2}^{\infty} \frac{x^k}{(m+k-p)\dots(m+k)\,k!}, \tag{2.79}$$

где $Q_{p+1}(x)$ – полином степени $p+1$.

Без нарушения общности рассуждения можно предполагать, что

$$p > m.$$

Тогда, учитывая что $p-m+1>0$, при $k>p+1$ имеем

$$\frac{1}{(m+k-p)\dots(m+k)\,k!} = \\ = \frac{1}{[(k+1)-(p-m+1)]\dots[(k+p+1)-(p-m+1)]\,k!} \geqslant \\ \geqslant \frac{1}{(k+1)\dots(k+p+1)\,k!} = \frac{1}{(k+p+1)!}.$$

Следовательно,

$$|y-Q_{p+1}(x)| \geqslant b(\lambda)\sum_{k=p+2}^{\infty}\frac{x^k}{(x+p+1)!} = \\ = \frac{b(\lambda)}{x^{p+1}}\sum_{k=p+2}^{\infty}\frac{x^{k+p+1}}{(k+p+1)!} = \frac{b(\lambda)}{x^{p+1}}\sum_{k=2p+3}^{\infty}\frac{x^k}{k!}.$$

Отсюда на основании известного разложения

$$\mathrm{e}^x = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^k}{k!}$$

получаем

$$|y-Q_{p+1}(x)| \geqslant \frac{b(\lambda)}{x^{p+1}}\left[\mathrm{e}^x - R_{2p+2}(x)\right], \tag{2.80}$$

где $R_{2p+2}(x) = \sum\limits_{k=0}^{2p+2}\frac{x^k}{k!}$
– полином степени $2p+2$. Из формулы (2.80) находим

$$|y| = |[y-Q_{p+1}(x)] + Q_{p+1}(x)| \geqslant |y-Q_{p+1}(x)| - \\ - |Q_{p+1}(x)| \geqslant \frac{b(\lambda)}{x^{p+1}}\left[\mathrm{e}^x - R_{2p+2}(x)\right] - |Q_{p+1}(x)| = \\ = \frac{\mathrm{e}^x}{x^{p+1}}\left[b(\lambda) - \frac{b(\lambda)R_{2p+2}(x) + x^{p+1}\,|Q_{p+1}(x)|}{\mathrm{e}^x}\right]. \tag{2.81}$$

Так как

$$\frac{b(\lambda)R_{2p+2}(x) + x^{p+1}\,|Q_{p+1}(x)|}{\mathrm{e}^x} \to 0$$

при $x \to +\infty$, то из формулы (2.81) вытекает, что

$$|y| \geqslant \frac{b(\lambda)}{2} \cdot \frac{\mathrm{e}^x}{x^{p+1}} \quad \text{при } x \geqslant x_0 > 0; \tag{2.82}$$

причём $b(\lambda) > 0$.

Поэтому во втором случае решение y допускает по меньшей мере показательный рост и значит при $x \to +\infty$, растёт быстрее любой степени x^N. Таким образом, краевая задача (2.64)–(2.65), в случае 2, не имеет решения.

Итак, доказано, что полиномы

$$y = cL_n^m(x)$$

являются единственными решениями задачи (2.64)–(2.65).

2.15 Краевая задача для присоединённых функций Чебышёва-Лагерра

Рассмотрим модифицированное дифференциальное уравнение Лагерра [формула (2.62)]

$$(xz')' + \left(\frac{1-m}{2} + \lambda - \frac{x}{4} - \frac{m^2}{4x}\right) z = 0, \tag{2.83}$$

где m – целое нетривиальное число и λ – параметр.

Теорема. *Дифференциальное уравнение (2.83) имеет нетривиальное решение $z = z(x)$, ограниченное при $x = 0$ и обладающее конечной нормой*

$$\|z\| = \left(\int_0^\infty z^2 \mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}} < +\infty$$

тогда и только тогда, когда

$$\lambda - n \geqslant m \tag{2.84}$$

(собственные значения задачи), где n – целое число; причём

$$z = cl_n^m(x) \equiv c\mathrm{e}^{-\dfrac{x}{2}} x^{\dfrac{m}{2}} L_n^m(x) \qquad (c \neq 0)\,. \tag{2.85}$$

Доказательство. Дифференциальное уравнение (2.83) получается из дифференциального уравнения Лагерра (2.64) (§2.15) при помощи замены

$$z(x) = c\mathrm{e}^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{m}{2}} y(x). \tag{2.86}$$

Из условия конечности $z(0)$ вытекает, что решение $y(x)$ должно быть целой функцией, т. е. представлять собой степенной ряд с бесконечным радиусом сходимости (§2.14).

Если выполнено условие (2.84), то, как было доказано в §2.14,

$$y(x) = cL_n^m(x),$$

и следовательно, справедлива формула (2.85). При этом очевидно, что $\|z(x)\|$ конечна.

Если же условие (2.84) не выполнено, то в силу формулы (2.82) (§2.14) имеет место неравенство

$$|y(x)| \geqslant k\frac{\mathrm{e}^x}{x^p} \quad \text{при} \quad x \geqslant x_0 > 0,$$

где k и p – некоторые положительные постоянные. Отсюда на основании формулы (2.86) получаем

$$|z(x)| \geqslant k\mathrm{e}^{\frac{x}{2}}x^{\frac{m}{2}-p} \quad \text{при} \quad x \geqslant x_0$$

и значит $z(x)$ не обладает конечной нормой.

Теорема доказана. □

Упражнения к второй главе

1. Найти полиномы Чебышёва-Эрмита $H_4(x)$ и $H_5(x)$.
   Ответ. $H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$;
   $$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x.$$

2. Проверить на первых членах разложения, что
   $$\mathrm{e}^{2tx-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$
   (*производящая функция полиномов Чебышёва-Эрмита*).

3. Доказать, что
   $$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x).$$

4. Вычислить нормированные функции Чебышёва-Эрмита $h_n(x)$ для $n = 0, 1, 2, 3, 4$.

5. Найти полиномы Чебышёва-Лагерра $L_n(x)$ $n = (4,\, 5)$.
   Ответ.
$$L_4(x) = 24 - 96x + 72x^2 - 16x^3 + x^4;$$
$$L_5(x) = 120 - 600x + 600x^2 - 200x^3 + 25x^4 - x^5.$$

6. Проверить на первых членах разложения, что
$$\frac{\mathrm{e}^{-\dfrac{xt}{1-t}}}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)\frac{t^n}{n!}$$
   (*производящая функция полиномов Чебышёва-Лагерра*).

7. Вывести рекуррентную формулу
$$L_{n+1}(x) = (2n + 1 - x)\, L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x).$$

8. Вычислить присоединённые полиномы Чебышёва-Лагерра $L_n^m(x)$ $(n = 3, 4; \quad m = 0,\, 1,\, \ldots,\, n)$.

9. Найти нормированные функции Чебышёва-Лагерра
$$l_n^m(x) \quad (n = 0,\, 1,\, 2,\, 3; \quad m = 0,\, 1,\, \ldots,\, n)\,.$$

10. Доказать формулу
$$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-x} x^{m+1} \left[L_n^m(x)\right]^2 \mathrm{d}x = \frac{(2n - m + 1)\,(n!)^3}{(n-m)!}.$$

Глава 3

Элементы функционального анализа

3.1 Линейное функциональное пространство

Пусть R – представляет собой множество функций

$$f = f(x_1, x_2, \ldots, x_n), \tag{3.1}$$

определённых в некоторой общей области Ω действительного пространства E^n и принимающих, вообще говоря, комплексные значения

$$f(x_1, \ldots, x_n) = \varphi(x_1, \ldots, x_n) + \mathrm{i}\psi(x_1, \ldots, x_n), \tag{3.2}$$

где

$$\mathrm{i} = \sqrt{-1}$$

и

$$\varphi(x_1, \ldots, x_n) = \mathrm{Re} f(x_1, \ldots, x_n);$$
$$\psi(x_1, \ldots, x_n) = \mathrm{Im} f(x_1, \ldots, x_n)$$

– действительные функции.

Определение 3.1.1. Совокупность R функций f называется *линейным функциональным пространством* [Вул67; КФ89], если выполнены следующие условия:

1. если $f \in R$ и α – любое комплексное число, то $\alpha f \in R$;

2. если $f \in R$ и $f \in R$, то $(f + g) \in R$, где операции умножения функции на число и сложение функций понимаются в обычном смысле.

Каждая функция $f \in R$ называется *точкой* (*вектором*) или *элементом* пространства R.

Из условий 1 и 2 вытекает, что если $f \in R$ и $g \in R$, то

$$\alpha f + \beta g \in R, \tag{3.3}$$

где α и β – произвольные комплексные числа. Например, $(f - g) \in R$ $(\alpha = 1;\ \beta = -1)$.

Пример 3.1.1. Совокупность R всех полиномов

$$P(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_n \quad (-\infty < x < +\infty)\,,$$

где a_0, a_1, …, a_n – произвольные комплексные числа, есть линейное функциональное пространство.

Действительно, произведение любого числа на полином и сумма двух полиномов есть также полиномы.

Для простоты предполагалось, что элементы f функционального пространства R есть функции декартовых координат $x_1, \ldots, x_n$ в пространстве E^n. Очевидно, определение 1 может быть дословно перенесено и на тот случай, когда f есть функция криволинейных координат $q_1, \ldots, q_k$ в E^k $(k \leqslant n)$, где

$$q_j = \varphi_j(x_1, \ldots, x_n) \quad (j = 1, \ldots, k)$$

и φ_j – известные функции.

В дальнейшем под f будут пониматься функции любых переменных.

Определение 3.1.2. Линейное функциональное пространство R называется *нормированным* [Вул67; КФ89], если каждому элементу $f \in R$ ставится в соответствие неотрицательное число (функционал) $\|f\|$ – норма этого элемента, удовлетворяющее следующим требованиям (аксиомам):

1. $\|f\| = 0$ тогда и только тогда, когда $f \equiv 0$;

2. $\|\alpha f\| = |\alpha|\,\|f\|$, где α – произвольное число;

3. если $f \in R$ и $g \in R$, то

$$\|f + g\| \leqslant \|f\| + \|g\|\,.$$

Под нулевой функцией $f = 0$ здесь для простоты понимается функция, тождественно равная нулю в Ω. Однако в некоторых случаях удобно расширить понятие нулевой функции. Например, при интегрировании можно не различать функцию, тождественно равную нулю, и функцию, отличающуюся от нуля лишь в конечном числе точек, и считать их нулевыми.

В дальнейшем в тексте будет указываться, в каком смысле понимается нулевая функция; при этом две функции, разность которых есть нулевая функция, должны считаться одинаковыми (совпадающими).

В нормированном линейном пространстве R можно определить *расстояние* ρ между его элементами f и g, полагая

$$\rho(f,\, g) = \|f - g\|\,. \tag{3.4}$$

Из условий (1)–(3) вытекают следующие свойства расстояния:

1. $\rho(f,\, g) \geqslant 0$, причём $\rho(f,\, g) = 0$ тогда и только тогда, когда $f = g$ (*свойство дефинитности*);
2. $\rho(f,\, g) = \rho(g,\, f)$ (*свойство симметрии*);
3. $\rho(f,\, g) \leqslant \rho(f,\, h) + \rho(h,\, g)$ (*неравенство треугольника*).

Функциональное пространство, в котором введено расстояние ρ со свойствами 1–3, называется ***метрическим***.

В нормированном линейном пространстве вводится *сходимость по норме*

$$f_n \to f,$$

если

$$\|f_n - f\| \to 0.$$

Пример 3.1.2. Пусть $C\,[a,\, b]$ – множество функций $f(x)$, непрерывных на отрезке $a \leqslant x \leqslant b$.

Очевидно, $C\,[a,\, b]$ есть линейное функциональное пространство в смысле определения 1.

Под нормой функции $f = f(x) \in C\,[a,\, b]$ будем понимать число

$$\|f\| = \max_{a \leqslant x \leqslant b} |f(x)|\,, \tag{3.5}$$

т. е. $\|f\|$ есть наибольшее значение функции на отрезке $[a,\, b]$.

Легко убедиться, что все условия (1–3) выполнены. Таким образом, $C\,[a,\, b]$ с нормой (3.5) является линейным нормированным функциональным пространством.

Определение 3.1.3. Функции $f_1,\, f_2,\, \ldots,\, f_m$ из R, определённые в области Ω, называются *линейно независимыми*, если существуют постоянные $\alpha_1,\, \alpha_2,\, \ldots,\, \alpha_m$, не все равные нулю $\left(\sum\limits_{j=1}^{m} |a_j| \neq 0\right)$, такие, что

$$\sum_{j=1}^{m} \alpha_j f_j \equiv 0 \text{ в } \Omega, \tag{3.6}$$

где 0 – понимается в смысле нулевой функции пространства R. В противном случае функции $f_1,\, f_2,\, \ldots,\, f_m$ называются *линейно независимыми.*

Заметим, что если функции $f_1,\, \ldots,\, f_m$ – линейно независимы, то ни одна из них НЕ ЯВЛЯЕТСЯ НУЛЕВОЙ. Действительно, если $f_k = 0$ $(k = 1,\, \ldots,\, m)$, то, очевидно, справедливо тождество

$$0 \cdot f_1 + \cdots + 1 f_k + \cdots + 0 \cdot f_m = 0$$

и, следовательно, функции $f_1,\, \ldots,\, f_m$ линейно зависимы, вопреки предположению.

Для линейного пространства R возможны два случая:

1. В пространстве R имеется самое большее r линейно независимых функций; тогда пространство R называется *конечно-мерным* (r-мерным), а максимальное число r линейно независимых его элементов называется *размерностью* этого пространства:

$$r = \dim R;$$

2. Для каждого натурального числа N найдётся в R система линейно независимых функций $f_1,\, \ldots,\, f_N$; в таком случае пространство R называется *бесконечно-мерным* и условно полагается

$$\dim R = +\infty.$$

В квантовой механике, как правило, приходится рассматривать бесконечномерные линейные функциональные пространства.

Определение 3.1.4. Система функций $\varphi_1,\, \ldots,\, \varphi_m$ конечно-мерного пространства R называется *базисом* этого пространства, если каждый элемент $f \in R$ можно представить в виде линейной комбинации

$$f = c_1\varphi_1 + \cdots + c_m\varphi_m, \tag{3.7}$$

где $c_1,\, \ldots,\, c_m$ – некоторые числа (*координаты функции* f в данном базисе), причём представление (3.7) единственно.

Теорема. *В линейном пространстве R размерности r любая совокупность линейно независимых элементов $\varphi_1,\, \ldots,\, \varphi_r$, число которых равно размерности пространства, образует базис этого пространства.*

Доказательство. Пусть

$$f \in R.$$

Так как в пространстве R размерности r может содержаться самое большее r линейно независимых элементов, то элементы f, $\varphi_1, \ldots, \varphi_r$, число которых равно $r+1$, линейно зависимы. Следовательно,

$$\alpha_0 f + \alpha_1\varphi_1 + \cdots + \alpha_r\varphi_r \equiv 0, \tag{3.8}$$

где

$$\sum_{j=0}^{r} |\alpha_j| \neq 0. \tag{3.9}$$

Постоянная α_0 отлична от нуля. Действительно, если $\alpha_0 = 0$, то в силу формул (3.8) и (3.9) имеем

$$\alpha_1\varphi_1 + \ldots \alpha_r\varphi_r \equiv 0, \tag{8$'$}$$

где

$$\sum_{j=1}^{r} |\alpha_j| \neq 0. \tag{9$'$}$$

Отсюда следует, что элементы $\varphi_1, \ldots, \varphi_r$ линейно зависимы, что противоречит условию теоремы. Таким образом, $\alpha_0 \neq 0$.

Из формулы (3.8) вытекает, что

$$f = c_1\varphi_1 + \cdots + c_r\varphi_r, \tag{3.10}$$

где

$$c_1 = -\frac{\alpha_1}{\alpha_0}, \ldots, c_r = -\frac{\alpha_r}{\alpha_0}.$$

Представление (3.10) единственно, так как если

$$f = c_1'\varphi_1 + \cdots + c_r'\varphi_r, \tag{10$'$}$$

то вычитая из формулы (3.10) формулу (10$'$), получим

$$0 = (c_1 - c_1')\,\varphi_1 + \cdots + (c_r - c_r')\,\varphi_r.$$

Отсюда, учитывая линейную независимость функций $\varphi_1, \ldots, \varphi_r$, имеем

$$c_1 = c_1', \ \ldots, \ c_r = c_r'.$$

Теорема доказана. □

Пример 3.1.3. Пусть R – совокупность всех функций $y = y(x)$, где $a < x < b$, являющихся решениями однородного линейного дифференциального уравнения

$$y^{(n)} + p_1(x)y^{(n-1)} + \cdots + p_n(x)y = 0, \tag{3.11}$$

причём коэффициенты $p_j(x)$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$ непрерывны в интервале (a, b). Тогда совокупность $y_1(x), \ldots, y_n(x)$ линейно независимых решений уравнения (3.11) (так называемая *фундаментальная система решений*) образует базис пространства решений, т. е. каждое решение $y = y(x)$ может быть единственным способом представлено в виде

$$y = \sum_{j=1}^{n} c_j y_j(x),$$

где c_j – некоторые постоянные.

Если нормированное линейное функциональное пространство бесконечномерно, то под базисом этого пространства понимается счётная система[1] функций $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$, такая, что любая функция $f \in R$ единственным способом может быть записана в виде

$$f = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j, \tag{3.12}$$

где c_j $(j = 1, 2, \ldots)$ – постоянные величины, и ряд (3.12) сходится по норме, т. е.

$$\lim_{r\to\infty} \left\| f - \sum_{j=1}^{r} c_j \varphi_j \right\| = 0.$$

3.2 Скалярное произведение функций

Если $c = a + \mathrm{i}b$ (a и b действительны) есть комплексное число или функция, то

$$c^* = a - \mathrm{i}b$$

будет обозначать *сопряжённую величину*. Легко доказываются следующие свойства сопряжённых величин:

1. $c^{**} = c$;
2. $(c_1 + c_2)^* = c_1^* + c_2^*$;
3. $(c_1 c_2)^* = c_1^* c_2^*$.

[1]Система функций $\{\varphi\}$ называется счётной, если все элементы её можно пронумеровать с помощью натурального ряда чисел 1, 2, 3, …, т. е. функции этой системы допускают запись в виде последовательности $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots$ Существуют несчётные бесконечные системы функций; такова, например, совокупность всех непрерывных функций $f(x)$ на отрезке $[a, b]$.

Кроме того, имеем

$$c + c^* = 2\mathrm{Re}c; \quad c - c^* = 2\mathrm{i}\mathrm{Im}c;$$
$$|c^*| = |c|\,; \qquad cc^* = |c|^2\,.$$

Рассмотрим линейное функциональное пространство $R = \{f\}$, комплексно-значных функций.

Определение 3.2.1. Говорят, что в пространстве R определено *скалярное произведение*, если каждой упорядоченной паре функций $f,\, g \in R$ поставлено в соответствие число $(f,\, g)$, вообще говоря, комплексное, называемое их скалярным произведением и удовлетворяющее следующим условиям (аксиомам):

1. при перестановке сомножителей скалярное произведение переходит в сопряжённое
$$(g,\, f) = (f,\, g)^*$$
(*свойство эрмитовой симметрии*);

2. числовой множитель, стоящий на первом месте скалярного произведения можно выносить за знак скалярного произведения
$$(\alpha f,\, g) = \alpha\,(f,\, g)\,;$$

3. $(f_1 + f_2,\, g) = (f_1,\, g) + (f_2,\, g)$ (*свойство дистрибутивности*);

4. скалярное произведение функции на саму себя неотрицательно и равно нулю тогда и только тогда, когда функция нулевая:
$$(f,\, f) > 0 \text{ при } f \neq 0; \ (f,\, f) = 0$$
лишь при $f = 0$ (*свойство дефинитности*).

Заметим, что если $(f,\, g)$ действительно, то из условия 1 имеем просто

$$(g,\, f) = (f,\, g)\,.$$

Следствие 3.2.1. *Числовой множитель, стоящий на втором месте скалярного произведения, можно выносить за знак этого произведения, заменяя его сопряжённым. В самом деле, на основании аксиом 1 и 2, учитывая, что сопряжённая величина произведения равна произведению сопряжённых величин сомножителей, имеем*

$$(f,\, \alpha g) = (\alpha g,\, f)^* = [\alpha\,(g,\, f)]^* = \alpha^*\,(g,\, f)^* = \alpha^*\,(f,\, g)\,.$$

Следствие 3.2.2. *Свойство дистрибутивности выполнено также для функции, стоящей на втором месте в скалярном произведении.*

Действительно, используя аксиомы 1 и 3 и учитывая, что сопряжённая величина суммы равна сумме сопряжённых величин слагаемых, имеем

$$(f,\, g_1 + g_2) = (g_1 + g_2,\, f)^* = [(g_1,\, f) + (g_2,\, f)]^* = \\ = (g_1,\, f)^* + (g_2,\, f)^* = (f,\, g_1) + (f,\, g_2)\,.$$

Более общий результат следующий:

$$\left(\sum_j \alpha_j f_j,\, \sum_k \beta_k g_k\right) = \sum_{j,\,k} \alpha_j \beta_k^* \,(f_j,\, g_k)$$

(α_j, β_k – произвольные числа).

В пространстве R со скалярным произведением можно ввести норму, полагая

$$\|f\| = \sqrt{(f,\, f)}. \tag{3.13}$$

где $\|f\|$ играет роль ДЛИНЫ ВЕКТОРА.

Очевидно, в силу условия 4,

$$\|f\| = 0 \text{ лишь при } f = 0.$$

Кроме того, для произвольного числа α в силу условия 2 имеем

$$\|\alpha f\| = \sqrt{(\alpha f,\, \alpha f)} = \sqrt{\alpha \alpha^* \,(f,\, f)} = |\alpha|\, \|f\|\,.$$

Чтобы доказать третье свойство нормы (§3.1), предварительно докажем, что для скалярного произведения $(f,\, g)$ имеет место неравенство *Коши-Буняковского*

$$|(f,\, g)| \leqslant \|f\|\, \|g\|\,. \tag{3.14}$$

Действительно, запишем число $(f,\, g)$ в показательной форме

$$(f,\, g) = r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}, \tag{3.15}$$

где $r = |(f,\, g)|$ – модуль числа, а $\varphi = \arg\,(f,\, g)$ – его аргумент. В силу эрмитовой симметрии скалярного произведения получаем

$$(g,\, f) = r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}. \tag{3.16}$$

Так как скалярное произведение одинаковых сомножителей неотрицательно, то при любом действительном λ имеем

$$\left(\lambda f + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} g,\, \lambda f + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} g\right) = \lambda^2\,(f,\, f) + \lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\,(f,\, g) + \lambda \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,(g,\, f) + \\ + (g,\, g) = \lambda^2\,(f,\, f) + 2r\lambda + (g,\, g) \geqslant 0. \tag{3.17}$$

Таким образом, квадратный трёхчлен относительно λ допускает лишь неотрицательные значения. Это возможно тогда и только тогда, когда корни этого трёхчлена или комплексные, или равные между собой, т. е. дискриминант его должен быть неположительным:

$$r^2 - \|f\|^2 \|g\|^2 \leqslant 0.$$

Отсюда

$$r = |(f,\, g)| \leqslant \|f\| \, \|g\| \,,$$

что и требовалось доказать.

Теперь легко установить третье свойство нормы. В самом деле, учитывая, что

$$(f,\, g) + (g,\, f) = 2\mathrm{Re}\,(f,\, g) \leqslant 2\,|(f,\, g)|$$

и используя неравенство Коши-Буняковского (3.14), находим

$$\begin{aligned} \|f+g\|^2 = (f+g,\, f+g) = (f,\, f) + (f,\, g) + (g,\, f) + (g,\, g) = \\ = \|f\|^2 + 2\mathrm{Re}\,(f,\, g) + \|g\|^2 \leqslant \|f\|^2 + 2\,|(f,\, g)| + \|g\|^2 \leqslant \\ \leqslant \|f\|^2 + 2\,\|f\|\,\|g\| + \|g\|^2 = (\|f\| + \|g\|)^2 \,. \end{aligned}$$

Отсюда получаем нужное неравенство

$$\|f+g\| \leqslant \|f\| + \|g\| \,. \tag{3.18}$$

Таким образом, выражение (3.13) удовлетворяет всем аксиомам нормы и, следовательно, функции $f \in R$ при наличии соотношения (3.13) образуют нормированное линейное функциональное пространство. Обычным приёмом определяется расстояние между функциями f и g в этом пространстве

$$\rho(f,\, g) = \|f-g\| \,. \tag{3.19}$$

Используя аналогию между абстрактным скалярным произведением $(f,\, g)$ и скалярным произведением в евклидовом трёхмерном пространстве, полагают

$$(f,\, g) = \|f\|\,\|g\| \cos\theta,$$

где θ – угол между векторами f и g.

Отсюда, если векторы f и g ненулевые, то

$$\cos\theta = \frac{(f,\, g)}{\|f\|\,\|g\|}. \tag{3.20}$$

Что касается нулевого вектора $f = 0$, то можно считать, что он образует произвольный угол с любым другим вектором. Из формулы Коши-Буняковского следует, что если $(f,\, g)$ действительно, то угол θ между векторами f и g также действителен.

Отметим важное определение: две функции f и g называются ортогональными, если соответствующие векторы взаимно перпендикулярны, т. е.

$$(f,\, g) = 0. \tag{3.21}$$

Заметим, что из формулы (3.21) следует

$$(g,\, f) = (f,\, g)^* = 0.$$

3.3 Понятие о пространстве Гильберта

Пусть

$$f = f(q_1,\, \ldots,\, q_k) \tag{3.22}$$

– комплексно-значные функции криволинейных координат $q_1,\, \ldots,\, q_k$, определённые в некоторой области Ω. Предполагается, что декартовы координаты $x_1,\, \ldots,\, x_n$ $(k \leqslant n)$ действительного евклидова пространства E^n выражаются через криволинейные (цилиндрические, сферические и т. п.) с помощью некоторых, непрерывно дифференцируемых соотношений

$$x_j = x_j(q_1,\, \ldots,\, q_k) \quad (j = 1,\, \ldots,\, n)\,, \tag{3.23}$$

причём Ω представляет собой соответствующий прообраз всего пространства E^n или некоторой его части (*фазовое пространство криволинейных координат*). В частном случае $q_1,\, \ldots,\, q_n$ могут являться обычными декартовыми координатами пространства E^n.

Для краткости будем пользоваться сокращённым обозначением

$$q = (q_1,\, \ldots,\, q_k)\,,$$

где q можно рассматривать как k-мерный вектор в Ω. Тогда функция f коротко записывается так:

$$f = f(q). \tag{3.24}$$

Введём *скалярное произведение* функций $f = f(x)$ и $g = g(x)$, полагая

$$(f,\, g) = \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} f(q)g^*(q)\mathrm{d}\Omega, \tag{3.25}$$

где $g^*(q)$ – сопряжённая по отношению к $g(q)$ функция и $\mathrm{d}\Omega$ – элементарный объём фазового пространства.

Если $q_1, \ldots, q_k$ – декартовы координаты, то имеем

$$\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}q_1 \ldots \mathrm{d}q_k.$$

В случае, если функции $f(q)$ и $g(q)$ есть функции от декартовых координат соответственно $f(x)$ и $g(x)$ $(x = (x_1, \ldots, x_n))$, связанные с декартовыми координатами $x_1, \ldots, x_n$ соотношениями (3.23) $(k = n)$, то

$$\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_n = \left|\frac{D(x_1, \ldots, x_n)}{D(q_1, \ldots, q_n)}\right| \mathrm{d}q_1 \ldots \mathrm{d}q_n,$$

где

$$\frac{D(x_1, \ldots, x_n)}{D(q_1, \ldots, q_n)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial q_1} & \ldots & \frac{\partial x_1}{\partial q_n} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{\partial x_n}{\partial q_1} & \ldots & \frac{\partial x_n}{\partial q_n} \end{vmatrix}$$

– *якобиан* (функциональный определитель) переменных $x_1, \ldots, x_n$ по переменным $q_1, \ldots, q_n$. В случае $k < n$ выражение для $\mathrm{d}\Omega$ более сложно.

Относительно функций $f(q)$ и $g(q)$ будем предполагать, что они непрерывны во всём пространстве Ω, за исключением, быть может, конечного числа особых точек, где эти функции могут обращаться в бесконечность не слишком высокого порядка, так, чтобы интеграл (3.25) оставался сходящимся. Из формулы (3.25) получаем, что *норма функции* $f(q)$ может быть выражена формулой

$$\|f\| = \left\{ \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int |f(q)|^2 \, \mathrm{d}\Omega \right\}^{\frac{1}{2}}, \tag{3.26}$$

где

$$|f(q)|^2 = f(q) f^*(q).$$

Докажем, что для функций $f = f(q)$ и $g = g(q)$, обладающих конечной нормой, выражение (3.25) удовлетворяет всем аксиомам 1–4 скалярного произведения (§3.2), если не различать функций, имеющих различные значения лишь на множестве меры нуль в Ω. Например, с этой точки зрения функции

$$f(q) \text{ и } f_1(q) = \begin{cases} 0, & q \neq 0 \\ 1, & q = 0 \end{cases}$$

должны считаться одинаковыми.

Прежде всего заметим, что если

$$\|f\| < +\infty \text{ и } \|g\| < +\infty, \tag{3.27}$$

то на основании элементарного неравенства

$$|fg^*| \leqslant |f|\,|g| \leqslant \frac{1}{2}\left(|f|^2 + |g|^2\right)$$

имеем

$$\int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int |fg^*|\,\mathrm{d}\Omega \leqslant \frac{1}{2}\left\{\int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int |f|^2\,\mathrm{d}\Omega + \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int |g|^2\,\mathrm{d}\Omega\right\} < +\infty.$$

Поэтому для f и g с конечной нормой интеграл (3.25) абсолютно сходится и произведение $(f,\,g)$ имеет конечное значение.

Далее последовательно находим:

1. при выполнении условия (3.27), учитывая, что

$$\int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int f^*\mathrm{d}\Omega = \left[\int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int f\mathrm{d}\Omega\right]^*,$$

имеем

$$(g,\,f) = \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int gf^*\mathrm{d}\Omega = \left[\int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int (fg^*)\,\mathrm{d}\Omega\right]^* = (f,\,g)^*\,;$$

2. если α – любое комплексное число, то

$$(\alpha f,\,g) = \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int \alpha fg^*\mathrm{d}\Omega = \alpha\int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int fg^*\mathrm{d}\Omega = \alpha\,(f,\,g)\,;$$

3. при $\|f_1\| < +\infty$ и $\|f_2\| < +\infty$ получаем

$$(f_1 + f_2,\,g) = \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int (f_1 + f_2)\,g^*\mathrm{d}\Omega = \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int f_1 g^*\mathrm{d}\Omega + \\ + \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int f_2 g^*\mathrm{d}\Omega = (f_1,\,g) + (f_2,\,g)\,;$$

4. наконец,

$$(f,\,f) = \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int |f(q)|^2\,\mathrm{d}\Omega \geqslant 0;$$

причём, если $(f,\,f) = 0$, то $f(q) = 0$ во всех точках непрерывности, т. е. почти всюду. Если такую функцию считать нулевой, то аксиома 4 для скалярного произведения будет также удовлетворена.

Теорема. *Совокупность всех абсолютно интегрируемых в Ω функций*[2] $f(q)$ *с конечной нормой (3.26), т. е. таких, что*

$$\int \cdots \int_{\Omega} |f(q)|^2 \, \mathrm{d}\Omega < +\infty, \tag{3.28}$$

образует нормированное линейное пространство H, если отождествить функции, различающихся в Ω лишь на множестве нулевой меры.

Доказательство. 1°. Сначала докажем, что пространство H линейно. Действительно, если α – произвольное число и

$$f \in H,$$

т. е.

$$\int \cdots \int_{\Omega} |f|^2 \, \mathrm{d}\Omega < +\infty,$$

то имеем

$$\int \cdots \int_{\Omega} |\alpha f|^2 \, \mathrm{d}\Omega = \int \cdots \int_{\Omega} |f|^2 \, \mathrm{d}\Omega < +\infty.$$

Следовательно, $\alpha f \in H$.

Пусть теперь $f \in H$ и $g \in H$.

Имеем

$$|f+g|^2 = (f+g)(f^* + g^*) = ff^* + fg^* + gf^* + gg^* = \\ = |f|^2 + 2\mathrm{Re} fg^* + |g|^2 \leqslant |f|^2 + 2|f||g| + |g|^2. \tag{3.29}$$

Очевидно,

$$2|f||g| \leqslant |f|^2 + |g|^2. \tag{3.30}$$

Поэтому из неравенства (3.29) получаем

$$|f+g|^2 \leqslant 2\left(|f|^2 + |g|^2\right).$$

Таким образом,

$$\int \cdots \int_{\Omega} |f+g|^2 \, \mathrm{d}\Omega \leqslant \left\{ \int \cdots \int_{\Omega} |f|^2 \, \mathrm{d}\Omega + \int \cdots \int_{\Omega} |g|^2 \, \mathrm{d}\Omega \right\} < +\infty$$

и, значит, $(f+g) \in H$.

[2] Иначе говоря, *функций с интегрируемым квадратом модуля.*

2°. Докажем, что функционал (3.26) удовлетворяет всем аксиомам нормы.

Если $f(q) = 0$, то очевидно

$$\|f(q)\| = 0;$$

обратно из равенства

$$\|f(q)\|^2 = \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} |f(q)|^2 \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{3.31}$$

вытекает, что $f(q) = 0$ почти всюду в Ω. В частности, если функция $f(q)$ непрерывна, то $f(q) \equiv 0$. Таким образом, согласно нашей договорённости можно считать, что $f(q) = 0$.

Пусть α – число. Тогда, очевидно, имеем

$$\|\alpha f\| = \left\{ \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} |\alpha f|^2 \, \mathrm{d}\Omega \right\}^{\frac{1}{2}} = |\alpha| \left\{ \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} |f|^2 \, \mathrm{d}\Omega \right\}^{\frac{1}{2}} = |\alpha| \, \|f\| \, .$$

Наконец, если $f \in H$ и $g \in H$, то

$$\|f + g\| = \left\{ \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} (f+g)\,(f^* + g^*) \, \mathrm{d}\Omega \right\}^{\frac{1}{2}} =$$

$$= \left\{ \|f\|^2 + \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} (fg^* + gf^*) \, \mathrm{d}\Omega + \|g\|^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \leqslant$$

$$\leqslant \left\{ \|f\|^2 + 2\,|(f,\, g)| + \|g\|^2 \right\}^{\frac{1}{2}} . \tag{3.32}$$

На основании неравенства Коши-Буняковского [§3.2, (3.14)] имеем

$$|(f,\, g)| \leqslant \|f\| \, \|g\| \, ;$$

поэтому из неравенства (3.32) выводим

$$\|f + g\| \leqslant \|f\| + \|g\| \, . \tag{3.33}$$

Пространство H с нормой (3.26) представляет собой так называемое *комплексное пространство Гильберта* [КФ89; Хин51]. Под *нулевой функцией* здесь понимается всякая функция, норма которой равна нулю. □

3.4 Процесс ортогонализации функций

Рассмотрим бесконечно-мерное (§3.1) гильбертово комплексное пространство H.

Определение. Система функций в H

$$\varphi_1(q),\, \varphi_2(q),\, \ldots,\, \varphi_n(q),\, \ldots \tag{3.34}$$

называется *ортогональной*, если элементы этой системы попарно ортогональны между собой, т. е.

$$(\varphi_m,\, \varphi_n) = \int\!\!\cdots\!\!\int_\Omega \varphi_m(q)\varphi_n^*(q)\mathrm{d}\Omega = 0$$

при $m \neq n$.

Ортогональная система функций (3.34) называется *нормированной* (короче *ортонормированной*), если для каждой функции выполнено условие

$$(\varphi_n,\, \varphi_n) = \|\varphi_n\|^2 = 1.$$

Таким образом, для ортонормированной системы функций выполнено соотношение

$$(\varphi_m,\, \varphi_n) = \delta_{mn},$$

где δ_{mn} – символ Кронекера.

Теорема 3.4.1. *Всякую ортогональную систему функций $\{\varphi_n\}$ (3.34), не содержащую функций с нулевой нормой, т. е. такую, что*

$$\|\varphi_n\| > 0,$$

можно нормировать путём умножения каждой функции на некоторый числовой множитель.

Доказательство. Положим

$$\psi_n(q) = \frac{\varphi_n(q)}{\|\varphi_n(q)\|} \quad (n = 1,\, 2,\, \ldots).$$

Тогда, очевидно, имеем

$$(\psi_m,\, \psi_n) = \left(\frac{\varphi_m}{\|\varphi_m\|},\, \frac{\varphi_n}{\|\varphi_n\|}\right) = \frac{1}{\|\varphi_m\|\,\|\varphi_n\|}\,(\varphi_m,\, \varphi_n) = \delta_{mn}.$$

Следовательно, система функций $\{\psi_n\}$ ортонормирована. □

Теорема 3.4.2. *В пространстве H существуют счётные системы*

$$\varphi_1(q),\,\varphi_2(q),\,\ldots,\,\varphi_n(q),\,\ldots$$

попарно ортогональных между собой функций с положительной нормой, т. е. такие, что

$$(\varphi_m,\,\varphi_n)=\int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega}\varphi_m(q)\varphi_n^*(q)\mathrm{d}\Omega=0$$

при $m\neq n$ и

$$\|\varphi_n\|^2=(\varphi_n,\,\varphi_n)>0\quad(n=1,\,2,\,\ldots).$$

Доказательство. Так как пространство H бесконечно-мерно, то в этом пространстве найдётся последовательность функций

$$g_1(q),\,g_2(q),\,\ldots,\,g_n(q),\,\ldots,$$

элементы которой линейно независимы в любой конечной совокупности (§(3.1)).

Построим последовательность ортогональных функций $\varphi_n(q)$ $(n=1,\,2,\,\ldots)$ с помощью следующих соотношений:

$$\left.\begin{array}{ll}\gamma_1=g_1; & \varphi_1=\frac{\gamma_1}{\|\gamma_1\|};\\ \gamma_2=g_2-(g_2,\,\varphi_1)\,\varphi_1; & \varphi_2=\frac{\gamma_2}{\|\gamma_2\|};\\ \gamma_3=g_3-(g_3,\,\varphi_1)\,\varphi_1-(g_3,\,\varphi_2)\,\varphi_2; & \varphi_3=\frac{\gamma_3}{\|\gamma_3\|};\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\end{array}\right\}\tag{3.35}$$

Докажем прежде всего, что все функции $\gamma_1,\,\gamma_2,\,\ldots,\,\gamma_n,\,\ldots$ ненулевые (с положительной нормой) и, следовательно, конструкция (3.35) возможна.

Действительно, пусть

$$\gamma_r=g_r-\sum_{s=1}^{r-1}(g_r,\,\varphi_s)\,\varphi_s=0,\tag{3.36}$$

где 0 понимается в смысле нулевой функции пространства H. Так как в силу (3.35) в окончательном итоге каждая функция φ_s представляет собой линейную комбинацию функций $g_1,\,g_2,\,\ldots,\,g_{s-1}$, то из равенства (3.36) получаем

$$g_r+\sum_{s=1}^{r-1}c_sg_s=0,$$

где c_s – некоторые постоянные, что противоречит линейной независимости функций $g_1,\,g_2,\,\ldots,\,g_r$. Следовательно, все функции $\gamma_1,\,\gamma_2,\,\ldots,\gamma_n,\,\ldots$ ненулевые и значит

$$\|\varphi_n\|>0\quad(n=1,\,2,\,\ldots).$$

Докажем теперь, что система $\{\varphi_n\}$ ортогональна. Для доказательства применим метод математической индукции.

Для первого шага, используя формулы (3.35), имеем

$$(\varphi_2,\, \varphi_1) = \|\gamma_2\|\,\|\gamma_1\|\,(\gamma_2,\, \gamma_1) = \|\gamma_2\|\,\|\gamma_1\|\,(g_2 - (g_2,\, \varphi_1)\,\varphi_1,\, g_1) =$$
$$= \|\gamma_2\|\,\|\gamma_1\|\,[(g_2,\, g_1) - (g_2,\, \varphi_1)\,(\varphi_1,\, g_1)] =$$
$$= \|\gamma_2\|\,\|\gamma_1\| \left[(g_2,\, g_1) - \frac{(g_2,\, g_1)}{\|g_1\|} \cdot \frac{(g_1,\, g_1)}{\|g_1\|}\right] = 0.$$

Пусть теперь

$$(\varphi_r,\, \varphi_s) = (\varphi_s,\, \varphi_r) = 0 \quad \text{при} \quad r < s < n.$$

Полагая $m < n$ и учитывая, что $(\varphi_m,\, \varphi_m) = 1$, имеем

$$(\varphi_n,\, \varphi_m) = \frac{1}{\|\gamma_n\|} \left(g_n - \sum_{s=1}^{n-1} (g_n,\, \varphi_s)\,\varphi_s,\, \varphi_m\right) =$$
$$= \frac{1}{\|\gamma_n\|} \left[(g_n, \varphi_m) - \sum_{s=1}^{n-1} (g_n,\, \varphi_s)\,(\varphi_s,\, \varphi_m)\right] =$$
$$= \frac{1}{\|\gamma_n\|}\,[(g_n,\, \varphi_m) - (g_n,\, \varphi_m)\,(\varphi_m,\, \varphi_m)] = 0.$$

Таким образом, система (3.35) ортогональная. Заметим, эта система нормированная

$$\|\varphi_n\| = (\varphi_n,\, \varphi_n)^{\frac{1}{2}} = 1$$
$$(n = 1,\, 2,\, \ldots);$$

следовательно,

$$(\varphi_m,\, \varphi_n) = \delta_{mn},$$

где δ_{mn} – символ Кронекера.

Процесс ортогонализации (3.35) аналогичен переходу от косоугольной системы координат к прямоугольной. Произведя над системой (3.34) линейные преобразования, сохраняющие углы между векторами φ_m и φ_n («поворот системы координат»), получим новые ортогональные системы в пространстве H. □

Замечание. Процесс ортогонализации функций, очевидно, применим также к любой конечной системе линейно независимых функций.

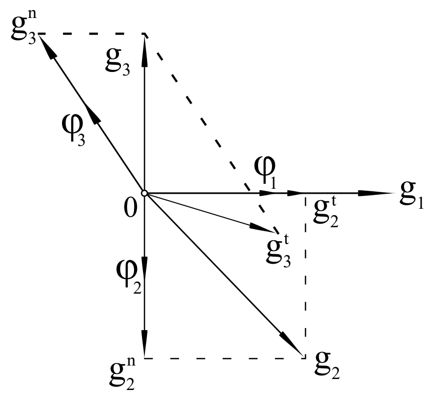

Рис. 3.1:

Пример 3.4.1. Пусть мы имеем три линейно независимые функции g_1, g_2, g_3, которые мы будем рассматривать как векторы трёхмерного пространства.

Ортогонализируем эти функции, пользуясь схемой (3.35).

Имеем

$$\gamma_1 = g_1; \quad \varphi_1 = \frac{\gamma_1}{\|\gamma_1\|}.$$

Очевидно, φ_1 есть орт (единичный вектор) вектора g_1 (рис. 3.1).

Скалярное произведение $(g_2,\, \varphi_1)$ представляет собой проекцию вектора g_2 на вектор φ_1. Разлагая вектор g_2 на тангенциальный компонент g_2^t, направленный по φ_1, и нормальный компонент g_2^t, перпендикулярный (ортогональный) к φ_1, будем иметь

$$g_2 = g_2^t + g_2^n,$$

где

$$g_2^t = (g_2,\, \varphi_1)\, \varphi_1; \; g_2^n = g_2 - g_2^t = g_2 - (g_2,\, \varphi_1)\, \varphi_1;$$

причём $g_2^n \neq 0$ ввиду линейной независимости векторов g_1 и g_2. Отсюда, полагая

$$\gamma_2 = g_2^n; \quad \varphi_2 = \frac{\gamma_2}{\|\gamma_2\|},$$

получим, что φ_2 есть единичный вектор (орт), ортогональный к φ_1.

Аналогично разлагая вектор g_3 на тангенциальный компонент g_3^t, расположенный в плоскости ортов φ_1 и φ_2, и нормальный компонент g_3^n, перпендикулярный к этой плоскости, получим

$$g_3 = g_3^t + g_3^n,$$

где
$$g_3^t = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2.$$
Отсюда, умножая g_3 последовательно на φ_1 и φ_2 и учитывая ортонормированность этих векторов, будем иметь

$$(g_3,\, \varphi_1) = c_1\,(\varphi_1,\, \varphi_1) + c_2\,(\varphi_2,\, \varphi_1) + (g_3^n,\, \varphi_1) = c_1$$

и
$$(g_3,\, \varphi_2) = c_1\,(\varphi_1,\, \varphi_2) + c_2\,(\varphi_2,\, \varphi_2) + (g_3^n,\, \varphi_2) = c_2.$$
Следовательно,
$$g_3^t = (g_3,\, \varphi_1)\,\varphi_1 + (g_3,\, \varphi_2)\,\varphi_2$$
и
$$g_3^n = g_3 - g_3^t = g_3 - (g_3,\, \varphi_1)\,\varphi_1 - (g_3,\, \varphi_2)\,\varphi_2;$$
причём $g_3^n \neq 0$, так как в противном случае векторы g_3, g_1 и g_2 являлись бы линейно зависимыми.

Полагая
$$\gamma_3 = g_3^n; \quad \varphi_3 = \frac{\gamma_3}{\|\gamma_3\|},$$
получим единичный вектор φ_3, ортогональный к φ_1 и φ_2.

Таким образом, построенные векторы φ_1, φ_2 и φ_3 образуют нормированную ортогональную систему векторов в нашем пространстве.

Пример 3.4.2. Пусть H – семейство функций $f(x) \in C[0,\, 1]$, т. е. непрерывных на отрезке $0 \leqslant x \leqslant 1$. Ортогонализовать систему функций

$$g_1 = 1;\ g_2 = x;\ g_3 = x^2.$$

Пользуясь процессом ортогонализации (3.35), последовательно находим:

$$\gamma_1 = g_1 = 1;$$

$$\|\gamma_1\| = \left(\int_0^1 1^2 \mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}} = 1;$$

$$\varphi_1 = \frac{\gamma_1}{\|\gamma_1\|} = 1;$$

$$\gamma_2 = g_2 - (g_2,\, \varphi_1)\,\varphi_1 = x - \int_0^1 x \cdot 1 \mathrm{d}x \cdot 1 = x - \frac{1}{2};$$

$$\|\gamma_2\| = \left[\int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 \mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{12}};$$

$$\varphi_2 = \frac{\gamma_2}{\|\gamma_2\|} = \sqrt{3}\,(2x-1)\,;$$

$$\gamma_3 = g_3 - (g_3,\,\varphi_1)\,\varphi_1 - (g_3,\,\varphi_2)\,\varphi_2 = x^2 - 1\int_0^1 x^2\cdot 1\mathrm{d}x -$$
$$-\sqrt{3}\,(2x-1)\int_0^1 x^2\sqrt{3}\,(2x-1)\,\mathrm{d}x = x^2 - x + \frac{1}{6};$$

$$\|\gamma_3\| = \left[\int_0^1 \left(x^2 - x + \frac{1}{6}\right)^2 \mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{180}};$$

$$\varphi_3 = \frac{\gamma_3}{\|\gamma_3\|} = 6\sqrt{5}\left(x^2 - x + \frac{1}{6}\right).$$

Таким образом, функции

$$\varphi_1 = 1; \quad \varphi_2 = \sqrt{3}\,(2x-1)\,; \quad \varphi_3 = \sqrt{5}\left(6x^2 - 6x + 1\right)$$

образуют ортогональную и нормированную систему функций на отрезке $[0,\,1]$.

Теорема 3.4.3. *Пусть*

$$\varphi_1,\,\varphi_2,\,\ldots,\,\varphi_n,\,\ldots$$

ортогональная система функций с положительной нормой. Тогда каждая конечная совокупность этих функций линейно независима, т. е. состоит из линейно независимых функций.

Доказательство. Действительно, пусть функции $\varphi_{n_1},\,\varphi_{n_2},\,\ldots,\,\varphi_{n_r}$ линейно зависимы и, следовательно,

$$\alpha_1\varphi_{n_1} + \alpha_2\varphi_{n_2} + \cdots + \alpha_r\varphi_{n_r} = 0,$$

где, например, $\alpha_1 \neq 0$. Умножая это равенство справа на φ_{n_1}, получим

$$\alpha_1\,(\varphi_{n_1},\,\varphi_{n_1}) + \alpha_2\,(\varphi_{n_2},\,\varphi_{n_1}) + \cdots + \alpha_r\,(\varphi_{n_r},\,\varphi_{n_1}) = 0$$

Отсюда, учитывая ортогональность функций φ_m и φ_n при $m \neq n$, будем иметь

$$\alpha_1\,(\varphi_{n_1},\,\varphi_{n_1}) = 0.$$

Так как

$$(\varphi_{n_1},\,\varphi_{n_1}) = \|\varphi_{n_1}\|^2 > 0,$$

то $\alpha_1 = 0$, что противоречит предположению.

Теорема доказана. □

3.5 Ряды Фурье

Рассмотрим ортонормированную систему функций $\{\psi_n(q)\}$ $(n = 1, 2, \dots)$ в пространстве H, т. е.

$$(\psi_m, \psi_n) = \int \cdots \int_\Omega \psi_m(q)\psi_n^*(q)\mathrm{d}\Omega = \delta_{mn}. \tag{3.37}$$

Определение 3.5.1. Если $f(q) \in H$, то числа

$$c_n = (f, \psi_n) = \int \cdots \int_\Omega f(q)\psi_n^*(q)\mathrm{d}\Omega \quad (n = 1, 2, \dots) \tag{3.38}$$

называются *коэффициентами Фурье* для функции $f(q)$ относительно системы $\{\psi(q)\}$, а формальный ряд

$$f(q) \sim \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(q) \tag{3.39}$$

называется соответствующим *рядом Фурье* функции $f(q)$.

Если функция $f(q)$ разлагается в ряд вида (3.39) равномерно в Ω, т. е.

$$f(q) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(q), \tag{3.40}$$

то, умножая обе части равенства (3.40) на $\psi_n^*(q)$ и интегрируя почленно в области Ω, учитывая, условие (3.37), будем иметь

$$\int \cdots \int_\Omega f(q)\psi_n^*(q)\mathrm{d}\Omega = \sum_{m=1}^{\infty} c_m (\psi_m, \psi_n) = c_n;$$

отсюда получаем

$$c_n = (f, \psi_n) \quad (n = 1, 2, \dots).$$

Таким образом, в этом случае коэффициенты Фурье c_n представляют собой коэффициенты разложения функции $f(q)$ по ортогональной системе функций $\{\psi_n(q)\}$. Однако, в общем случае коэффициенты Фурье, определяемые формулой (3.38), имеют смысл и тогда, когда ряд (3.39) не является сходящимся, или сумма его не равна производящей функции $f(q)$.

Определение 3.5.2. Говорят, что ортонормированная система $\{\psi_n(q)\}$ *полная* в H [КФ89; ЛС65], если для любой функции $f(q) \in H$ выполнено равенство

$$f(q) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(q), \tag{3.41}$$

где сходимость ряда (3.41) понимается как *сходимость в среднем*, т. е.

$$\lim_{N\to\infty}\left\|f(q)-\sum_{n=1}^{N}c_n\psi_n(q)\right\|^2=\lim_{N\to\infty}\int\limits_{\Omega}\!\!\cdots\!\!\int\left|f(q)-\sum_{n=1}^{N}\psi_n(q)\right|^2\mathrm{d}\Omega=0. \tag{3.42}$$

Иными словами, система $\{\psi_n(q)\}$ полная, если она образует БАЗИС ПРОСТРАНСТВА H (§(3.1)). В этом случае коэффициенты Фурье c_n можно рассматривать как координаты вектора $f(q)$ относительно единичных векторов (ортов) $\psi_n(q)$ $(n=1,\,2,\,\ldots)$.

Доказана полнота следующих систем [Кур56]: нормированная тригонометрическая система $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{inx}$ $(n=0,\,\pm1,\,\pm2,\,\ldots)$ полна на отрезке $-\pi\leqslant x\leqslant\pi$; нормированные полиномы Лежандра $\tilde{P}_n(x)$ $(n=0,\,1,\,2,\,\ldots)$ (гл. 1, §1.1) образуют полную ортогональную систему на отрезке $-1\leqslant x\leqslant 1$; нормированные функции Чебышёва-Эрмита $h_n(x)=\mathrm{e}^{-\frac{x}{2}}H_n(x)$ $(n=0,\,1,\,2,\,\ldots)$ (гл. 2, §2.3) образуют полную ортогональную систему на интервале $-\infty<x<+\infty$; ортогональная система нормированных функций Чебышёва-Лагерра $l_n^m(x)=k_nx^{\frac{m}{2}}L_n^m(x)$ $(m=0,\,1,\,2,\,\ldots,\,n;\;n=0,\,1,\,2,\,\ldots)$ полна на промежутке $0\leqslant x<+\infty$ (гл. 2, §2.12); нормированные сферические функции (гл. 1, §1.14)

$$\tilde{S}_n^m(\theta,\,\varphi)\;\;(m=0,\,\pm1,\,\ldots,\,\pm n;\;n=0,\,1,\,2,\,\ldots)$$

представляют собой полную ортогональную систему на единичной сфере

$$\{\rho=1;\;0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi;\;0\leqslant\theta\leqslant\pi\}$$

и др.

Каждую из таких систем можно рассматривать как базис соответствующего гильбертова пространства.

Рассмотрим величину (*квадратичное уклонение функции* $f(q)$ *от её полинома Фурье*)

$$\Delta_N=\left\|f(q)-\sum_{n=1}^{N}c_n\psi_n(q)\right\|^2=\left(f(q)-\sum_{n=1}^{N}c_n\psi_n(q),\;f(q)-\right.$$
$$\left.-\sum_{m=1}^{N}c_m\psi_m(q)\right)\geqslant 0,$$

где c_n – коэффициенты Фурье (3.36) функции $f(q)$. Используя свойства скалярного произведения и ортонормированность системы $\{\psi_n(q)\}$, находим

$$\Delta_N = (f(q),\, f(q)) - \sum_{n=1}^{N} c_n\,(\psi_n(q),\, f(q)) - \\ - \sum_{m=1}^{N} c_m^*\,(f(q),\, \psi_m(q)) + \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} c_n c_m^*\,(\psi_n(q),\, \psi_m(q)) = \\ = \|f(q)\|^2 - 2\sum_{n=1}^{N} c_n c_n^* + \sum_{n=1}^{N} c_n c_n^* = \|f(q)\|^2 - \sum_{n=1}^{N} |c_n|^2 \geqslant 0. \quad (3.43)$$

Отсюда

$$\sum_{n=1}^{N} |c_n|^2 \leqslant \|f(q)\|^2 .$$

Переходя к пределу при $N \to \infty$ в последнем неравенстве, получим *неравенство Бесселя*

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \leqslant \|f(q)\|^2 .$$

В частности, отсюда получаем, что $c_n \to 0$ при $n \to \infty$.

Если система $\{\psi_n(q)\}$ полная, то из условия (3.42) на основании формулы (3.43) имеем

$$\lim_{N\to\infty} \Delta_N = \lim_{N\to\infty} \left[\|f(q)\|^2 - \sum_{n=1}^{N} |c_n|^2 \right] = \|f(q)\|^2 - \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 0. \quad (3.44)$$

Обратно, если для любой функции $f(q) \in H$ имеет место равенство (3.44), то система $\{\psi_n(q)\}$ полная.

Таким образом, ортонормированная система $\{\psi_n(q)\}$ является полной тогда и только тогда, когда для любой функции $f(q) \in H$ выполнено *условие полноты*

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \|f(q)\|^2 .$$

Отметим важное свойство полной ортонормированной системы функций.

Теорема. *Если система ортонормированных функций $\{\varphi_n\}$ полная, то не существует ненулевой функции, ортогональной ко всем функциям нашей системы.*

Доказательство. Пусть φ – ненулевая функция, такая, что

$$(\varphi_n,\, \varphi_n) = 0 \quad (n = 1,\, 2,\, \dots)\,. \tag{3.45}$$

Так как система $\{\varphi_n\}$ полная, то функцию φ можно разложить в ряд Фурье

$$\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n.$$

В силу соотношений (3.45) все коэффициенты Фурье c_n равны нулю, так как

$$c_n = (\varphi,\, \varphi_n) = 0 \quad (n = 1,\, 2,\, \dots)\,.$$

Отсюда на основании условия полноты будем иметь

$$\|\varphi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 0$$

и, следовательно,

$$\varphi = 0,$$

что противоречит нашему предположению.

Теорема доказана. □

3.6 Алгебра операторов

Определение 3.6.1. Под *оператором* $\hat{A}$ в функциональном пространстве X со значениями в функциональном пространстве Y понимается правило (инструкция), с помощью которого ставится в соответствие элемент $\hat{A}x = y \in Y$. Связь между функциями x и y коротко записывается в виде формулы

$$y = \hat{A}x,$$

где оператор $\hat{A}$ рассматривается как символический множитель. Наглядно можно представлять себе, что функция y есть результат воздействия оператора $\hat{A}$ на функцию x, т. е. y получается в результате преобразования $\hat{A}$, выполненного над x [Бау37; КФ89; Ней64].

Пример 3.6.1. Пусть $C^{(1)}$ – совокупность функций $f(x)$ непрерывно дифференцируемых на интервале $-\infty < x < +\infty$, а C – совокупность непрерывных функций на $(-\infty,\, +\infty)$.

Операция дифференцирования каждой функции $f(x) \in C^{(1)}$ по определённым правилам ставит в соответствие функцию $f'(x) \in C$. Например, $1 \to 0$; $x^2 \to 2x$, $\mathrm{e}^x \to \mathrm{e}^x$ и т. д.

Это соответствие есть оператор, в нашем смысле слова.

Можно записать

$$f'(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x),$$

где $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \hat{D}$ называется *оператором дифференцирования.*

Определи основные действия над операторами (алгебру операторов), предполагая, что соответствующие операции имеют смысл.

1. Оператор $\hat{A} = \hat{1}$, оставляющий любую функцию f неизменной, называется *единичным*, т. е.

$$\hat{1} f = f.$$

Под оператором $\alpha\hat{A}$, где α – любое комплексное число, понимается оператор, определяемый соглашением

$$\left(\alpha\hat{A}\right) f = \alpha\left(\hat{A} f\right).$$

Например, если

$$\hat{A} f(x) = x^2 f(x),$$

то

$$2\hat{A} f(x) = 2x^2 f(x)$$

и т. п.

3. Под *суммой операторов* $\hat{A}$ и $\hat{B}$ понимается такой оператор $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, который каждой функции f ставит в соответствие сумму функций $\hat{A}f$ и $\hat{B}f$, т. е.

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f = \hat{A} f + \hat{B} f.$$

Например, если

$$\hat{A} f(x) = x f(x) \text{ и } \hat{B} f(x) = f'(x),$$

то

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f(x) = x f(x) + f'(x).$$

Из формулы (3.44) следует, что

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}.$$

4. Аналогично определяется *разность операторов* $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$\left(\hat{A} - \hat{B}\right) f = \hat{A} f - \hat{B} f.$$

Очевидно,

$$\hat{A} - \hat{B} = \hat{A} + (-1)\,\hat{B}.$$

5. Под произведением операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в указанном порядке понимается оператор $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, определяемый формулой:

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right) f = \hat{A}\left(\hat{B} f\right).$$

Аналогично

$$\left(\hat{B}\hat{A}\right) f = \hat{B}\left(\hat{A} f\right).$$

В общем случае

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A},$$

т. е. операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не перестановочны (может даже случиться, что один из операторов $\hat{A}\hat{B}$ имеет смысл, а другой $\hat{B}\hat{A}$ смысла не имеет). Если выполнено равенство

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A},$$

то операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называются *перестановочными* или *коммутативными*.

Пример 3.6.2. Пусть

$$\hat{A} f(q) = 1 f(q) \text{ и } \hat{B} f(q) = f'(q).$$

Тогда

$$\hat{A}\hat{B} f(q) = \hat{A} f'(q) = q f'(q)$$

и

$$\hat{B}\hat{A} f(q) = \hat{B} q f(q) = q f'(q) + f(q).$$

Следовательно,

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}, \text{ если } f(q) \neq 0,$$

т. е. операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутативны.

Отметим, что очевидно

$$\hat{1}\hat{A} = \hat{A}.$$

Под произведением трёх операторов $\hat{A}$, $\hat{B}$ и $\hat{C}$ понимается оператор

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} f = \hat{A}\left(\hat{B}\left(\hat{C} f\right)\right).$$

Произведение трёх операторов $\hat{A}$, $\hat{B}$ и $\hat{C}$ обладает *свойством ассоциативности*

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right) = \left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C}.$$

6. На основании правила умножения операторов естественно последовательно определяются *степени* данного оператора $\hat{A}$:

$$\hat{A}^2 = \hat{A}\hat{A};$$
$$\hat{A}^3 = \hat{A}\left(\hat{A}^2\right);$$
$$\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot$$

Пользуясь операциями умножения на число, сложением, умножением и возведением в натуральную степень операторов, можно строить *полиномы операторов*. Например, если $\hat{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ есть оператор дифференцирования, то однозначно определяется такой оператор:

$$\hat{A}^2 - 2\hat{A} + \hat{1}$$

и т. п.

7. Оператор $\hat{A}^{-1}$ называется *обратным* для данного оператора $\hat{A}$, если выполнено условие

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1}. \tag{3.46}$$

Обратный оператор имеется не всегда.

Пример 3.6.3. Пусть $C^{(1)}\,[0, +\infty)$ – совокупность всех функций $y = y(x)$, непрерывно дифференцируемых в промежутке $[0, +\infty)$ и таких, что $y(0) = 0$. Тогда для оператора дифференцирования $D = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, определённого в $C^{(1)}$, обратным является

$$D^{-1}y = \int_0^x y(\xi)\mathrm{d}\xi.$$

Действительно, имеем:

$$DD^{-1}y = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\int_0^x y(\xi)\mathrm{d}\xi = y(x);$$

$$D^{-1}Dy = \int_0^x y'(\xi)\mathrm{d}\xi = y(x) - y(0) = y(x).$$

Для существования обратного оператора $\hat{A}^{-1}$ для данного оператора $\hat{A}$, действующего из пространства $X = \{f\}$ в пространство $Y = \{g\}$, достаточно, чтобы операторное уравнение

$$\hat{A}f = g \tag{3.47}$$

для каждого $g \in Y$ имело единственное решение $f = \hat{A}^{-1}g \in X$.

Действительно, из уравнения (3.47) имеем

$$\hat{A}\left(\hat{A}^{-1}g\right) = \hat{A}f = g.$$

Далее пусть

$$\hat{A}f = h \in Y$$

и

$$\hat{A}^{-1}\left(\hat{A}f\right) = f_1,$$

т. е.

$$\hat{A}f_1 = \hat{A}f = h.$$

Следовательно, уравнение $\hat{A}x = h$ допускает два решения:

$$x = f \text{ и } x_1 = f_1.$$

На основании предположенного свойства единственности эти решения совпадают, т. е.

$$\hat{A}^{-1}\left(\hat{A}f\right) = f_1 = f.$$

Таким образом, обратный оператор $\hat{A}^{-1}$ существует и действует из Y в X.

Пользуясь свойством ассоциативности операторного умножения, легко доказать, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют обратные операторы, то операторы $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$ также имеют обратные операторы, причём

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$$

и

$$\left(\hat{B}\hat{A}\right)^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{B}^{-1}.$$

Для данного оператора $\hat{A}$, имеющего обратный $\hat{A}^{-1}$, можно определить целые отрицательные степени

$$\hat{A}^{-n} = \left(\hat{A}^{-1}\right)^{n} \quad (n > 0)\,.$$

В этом случае для любых действительных чисел k и l будет справедливо *правило умножения степеней*

$$\hat{A}^{k}\hat{A}^{l} = \hat{A}^{k+l},$$

где $\hat{A}^{0} = \hat{1}$.

Определение 3.6.2. Оператор $\hat{A}$ называется *линейным*, если он определён в линейном функциональном пространстве $R = \{f(q)\}$ и имеет значения $\hat{A}f(q)$, принадлежащие также линейному функциональному пространству (R или другому R_1), причём выполнены условия (аксиомы):

1. $\hat{A}\left(\alpha f\right) = \alpha\hat{A}f$ (α – любое комплексное число);

2. $\hat{A}\,(f+g)=\hat{A}f+\hat{A}g.$

В частности, $\hat{A}0=0$.

Например, оператор дифференцирования $\hat{A}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ (пример 1) линейный.

Из условий 1 и 2 получаем

$$\hat{A}\,(\alpha f+\beta g)=\hat{A}\,(\alpha f)+\hat{A}\,(\beta g)=\alpha\hat{A}f+\beta\hat{A}g$$

(α, β – произвольные числа), т. е. *линейный оператор от линейной комбинации функций равен такой же линейной комбинации от операторов этих функций.*

Оператор $\hat{A}$, для которого условия 1 и 2 не соблюдаются, называется *нелинейным.*

Например, пусть $\hat{A}$ есть операция возведения функции f в квадрат, т. е.

$$\hat{A}f=f^2.$$

Так как

$$\hat{A}\,(f+g)=(f+g)^2=f^2+g^2+2fg\neq\hat{A}f+\hat{A}g,$$

если только $fg\neq 0$, то оператор $\hat{A}$ нелинейный.

3.7 Эрмитовы операторы

Пусть $\hat{A}$ – линейный оператор, определённый в комплексном гильбертовом пространстве $H=\{f\}$ и имеющий значения в этом же пространстве, т. е. если $f\in H$, то

$$\hat{A}f\in H. \tag{3.48}$$

Для любой пары функций f и g пространства H определено *скалярное произведение*

$$\left(\hat{A}f,\,g\right)=\int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} g^*\hat{A}f\mathrm{d}\Omega.$$

Если выполнено соотношение

$$\left(\hat{A}f,\,g\right)=\left(f,\,\hat{A}^*g\right), \tag{3.49}$$

то оператор $\hat{A}^*$ называется *сопряжённым* с оператором $\hat{A}$ [КФ89; ЛС65; Ней64].

Определение. Линейный оператор $\hat{A}$ называется *самосопряжённым* или *эрмитовым*, если он совпадает со своим сопряжённым, т. е.

$$\hat{A} = \hat{A}^*. \tag{3.50}$$

Из формулы (3.49) получаем

$$\left(\hat{A}f,\, g\right) = \left(f,\, \hat{A}g\right), \tag{3.51}$$

т. е.

$$\int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} g^* \hat{A} f \,\mathrm{d}\Omega = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} f \left(\hat{A}g\right)^* \mathrm{d}\Omega. \tag{51$'$}$$

Таким образом, в *скалярном произведении (3.51) эрмитов оператор $\hat{A}$ можно переставлять с первого места на второе.*

Пример 3.7.1. Пусть $C^{(1)}\,(-\infty,\, +\infty)$ – пространство непрерывно дифференцируемых на оси функций $y = y(x)$, обращающихся в нуль на бесконечности, т. е. таких, что

$$y(\pm\infty) = \lim_{x\to\pm\infty} y(x) = 0. \tag{3.52}$$

Тогда оператор

$$\hat{A} = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{3.53}$$

является ЭРМИТОВЫМ в пространстве $C^{(1)}$.

Действительно, для любых функций $f \in C^{(1)}$ и $g \in C^{(1)}$ имеем

$$\left(\hat{A}f,\, g\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} g^* \hat{A} f \,\mathrm{d}x = \frac{1}{\mathrm{i}} \int_{-\infty}^{+\infty} g^* \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f \,\mathrm{d}x.$$

Применяя интегрирование по частям и используя условие (3.52), находим

$$\left(\hat{A}f,\, g\right) = \frac{1}{\mathrm{i}} \left\{ g^* f|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} f \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} g^* \mathrm{d}x \right\} =$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} f \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{1}{\mathrm{i}} g\right)\right]^* \mathrm{d}x = \left(f,\, \hat{A}g\right).$$

Таким образом, оператор $\hat{A}$ (3.53) эрмитов. Этот результат имеет важное значение для квантовой механики. Заметим, что если в выражении (3.53) отсутствовал бы мнимый множитель $\frac{1}{\mathrm{i}}$, то соответствующий оператор не был бы эрмитовым.

Пример 3.7.2. Пусть $C^{(2)}(E^3)$ – пространство дважды интегрируемых функций $u = u(x,\, y,\, z)$ в евклидовом пространстве

$$E^3 = \{-\infty < x < +\infty,\ -\infty < y < +\infty,\ -\infty < z < +\infty\}\,;$$

причём функции u РЕГУЛЯРНЫ НА БЕСКОНЕЧНОСТИ, т. е. обращаются на бесконечности в нуль вместе со всеми своими частными производными первого порядка, которые имеют кратность нуля не ниже двух.

Докажем, что *оператор Лапласа*

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

эрмитов в пространстве $C^{(2)}$.

Для любых функций $f \in C^{(2)}$ и $g \in C^{(2)}$ имеем

$$\big(\nabla^2 f,\, g\big) = \iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} g^* \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

и

$$\big(\nabla^2 f,\, g\big) - \big(f,\, \nabla^2 g\big) = \iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(g^* \frac{\partial f}{\partial x} - f \frac{\partial g^*}{\partial x}\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{\partial}{\partial y}\left(g^* \frac{\partial f}{\partial y} - f \frac{\partial g^*}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(g^* \frac{\partial f}{\partial z} - f \frac{\partial g^*}{\partial z}\right)\right] \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z. \quad (3.54)$$

Пусть S_ρ – гладкая простая поверхность диаметра ρ, ограничивающая объём V_ρ, который при $\rho \to \infty$ заполняет всё пространство E^3; $\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$ – направляющие косинусы внешней нормали к поверхности S_ρ.

Тогда

$$\iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} = \lim_{\rho\to\infty} \iiint\limits_{V_\rho}\,.$$

Применяя известную формулу Остроградского [Лев56] и учитывая регулярность функций f и g^* на бесконечности, получаем

$$\big(\nabla^2 f,\, g\big) - \big(f,\, \nabla^2 g\big) = \lim_{\rho\to\infty} \iint\limits_{S_\rho} \left[\left(g^* \frac{\partial f}{\partial x} - f \frac{\partial g^*}{\partial x}\right)\cos\alpha + \right.$$
$$\left. + \left(g^* \frac{\partial f}{\partial y} - f \frac{\partial g^*}{\partial y}\right)\cos\beta + \left(g^* \frac{\partial f}{\partial z} - f \frac{\partial g^*}{\partial z}\right)\cos\gamma\right] \mathrm{d}S_\rho = 0.$$

Следовательно,
$$\left(\nabla^2 f,\, g\right) = \left(f,\, \nabla^2 g\right).$$
Таким образом, оператор Лапласа ∇^2 – эрмитов.

Укажем некоторые свойства эрмитова оператора.

1. *Единичный оператор* $\hat{1}$, очевидно, эрмитов.

2. *Произведение* $k\hat{A}$ эрмитова оператора на действительную постоянную k есть также эрмитов оператор.

В самом деле, имеем
$$\left(k\hat{A}f,\, g\right) = k\left(\hat{A}f,\, g\right) = k\left(f,\, \hat{A}g\right) = \left(f,\, k\hat{A}g\right),$$
так как $k^* = k$.

3. *Сумма* $\hat{A} + \hat{B}$ двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ есть также эрмитов оператор.

Действительно, используя линейность операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, получаем
$$\left(\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f,\, g\right) = \left(\hat{A}f + \hat{B}f,\, g\right) = \left(\hat{A}f,\, g\right) + \left(\hat{B}f,\, g\right) =$$
$$= \left(f,\, \hat{A}g\right) + \left(f,\, \hat{B}g\right) = \left(f,\, \hat{A}g + \hat{B}g\right) = \left(f,\, \left(\hat{A} + \hat{B}\right) g\right),$$
т. е. $\hat{A} + \hat{B}$ – эрмитов оператор.

Так как
$$\hat{A} - \hat{B} = \hat{A} + (-1)\,\hat{B},$$
то *разность* $\hat{A} - \hat{B}$ двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ есть также эрмитов оператор.

4. *Произведение* $\hat{A}\hat{B}$ двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ есть эрмитов оператор тогда и только тогда, когда операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ перестановочны (коммутируют), т. е.
$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}. \tag{3.55}$$

Действительно, если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовы, то имеем
$$\left(\left(\hat{A}\hat{B}\right) f,\, g\right) = \left(\hat{A}\left(\hat{B}f\right),\, g\right) = \left(\hat{B}f,\, \hat{A}g\right) =$$
$$= \left(f,\, \hat{B}\left(\hat{A}g\right)\right) = \left(f,\, \left(\hat{B}\hat{A}\right) g\right).$$
Отсюда получаем, что для эрмитовости оператора $\hat{A}\hat{B}$ необходимо и достаточно, чтобы было выполнено условие (3.55).

Как следствие, вытекает, что целые положительные степени
$$\hat{A}^2 = \hat{A}\hat{A};\ \hat{A}^3 = \hat{A}\left(\hat{A}^2\right),\ \ldots$$

эрмитова оператора $\hat{A}$ есть также эрмитовы операторы.

5. Если эрмитов оператор $\hat{A}$ обратим, то обратный оператор $\hat{A}^{-1}$ есть также эрмитов.

Действительно, если $\hat{A}$ эрмитов оператор, то имеем

$$\left(\hat{A}^{-1}f,\, g\right) = \left(\hat{A}^{-1}f,\, \hat{A}\hat{A}^{-1}g\right) = \left(\hat{A}\hat{A}^{-1}f,\, \hat{A}^{-1}g\right) = \left(f,\, \hat{A}^{-1}g\right).$$

Следовательно, оператор $\hat{A}^{-1}$ эрмитов.

3.8 Собственные значения линейных операторов

Пусть H – комплексное гильбертово пространство и $\hat{A}$ – линейный оператор, определённый в H.

Определение. Все те числа λ комплексной плоскости, при которых операторное уравнение

$$\hat{A}\varphi = \lambda\varphi \tag{3.56}$$

имеет ненулевые решения $\varphi \in H$ $(\|\varphi\| \neq 0)$, называются *собственными значениями* оператора $\hat{A}$, а соответствующие функции φ называются *собственными функциями* этого оператора, отвечающими параметру λ.

Совокупность всех собственных значений оператора $\hat{A}$ обычно называется его *спектром.* Спектр оператора $\hat{A}$ может быть как ДИСКРЕТНЫМИ, т. е. состоящим из отдельных точек комплексной плоскости, так и СПЛОШНЫМ, охватывающим целые области этой плоскости. Возможны также случаи СМЕШАННОГО спектра: частично дискретного, частично сплошного.

Если ψ есть нормированная $(\|\psi\| = 1)$ собственная функция оператора $\hat{A}$, соответствующая собственному значению λ, то из формулы (3.56) имеем

$$\left(\hat{A}\psi,\, \psi\right) = \lambda\left(\psi,\, \psi\right);$$

отсюда

$$\lambda = \left(\hat{A}\psi,\, \psi\right). \tag{3.57}$$

Если φ есть собственная функция линейного оператора $\hat{A}$, соответствующая собственному значению λ, и число $c \neq 0$, то $c\varphi$ также собственная функция оператора $\hat{A}$, соответствующая тому же значению λ. Действительно, в силу линейности оператора $\hat{A}$имеем

$$\hat{A}\left(c\varphi\right) = c\hat{A}\varphi = \lambda\left(c\varphi\right).$$

Пусть $R_\lambda = \{\varphi\}$ – совокупность всех собственных функций линейного оператора $\hat{A}$, отвечающих одному и тому же собственному значению λ.

Лемма. *Множество функций R_λ с присоединённой нулевой функцией $f = 0$ образует линейное функциональное пространство $R = R_\lambda \cup \{0\}$.*

Действительно, если $\varphi \in R$ и c – любое число, то или $c\varphi = 0$ или $c\varphi \in R_\lambda$, т. е. $c\varphi \in R$.

Далее, если $\varphi_1 \in R$ и $\varphi_2 \in R$, то, учитывая, что

$$\hat{A}0 = \lambda 0,$$

для любой линейной комбинации

$$\varphi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$$

имеем

$$\hat{A}\varphi = c_1\hat{A}\varphi_1 + c_2\hat{A}\varphi_2 = c_1\lambda\varphi_1 + c_2\lambda\varphi_2 = c\varphi. \tag{3.58}$$

Следовательно, $\varphi \in R$.

Таким образом, функциональное пространство $R = R_\lambda \cup \{0\}$ линейное (§3.1).

Число линейно независимых собственных функций, соответствующих данному собственному значению λ (размерность пространства $R = R_\lambda \cup \{0\}$) называется *степенью вырождения* этого собственного значения. Если размерность пространства конечна и равна m, то в R_λ существуют ровно m линейно независимых собственных функций $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_m$; причём всякая собственная функция $\varphi \in R_\lambda$ есть нетривиальная линейная комбинация этих функций, т. е.

$$\varphi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \cdots + c_m\varphi_m,$$

где

$$|c_1| + |c_2| + \cdots + |c_m| \neq 0.$$

Пример. Найти собственные значения и собственные функции оператора

$$\hat{A} = \frac{1}{\mathrm{i}} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \tag{3.59}$$

определённого в пространстве $C^{(1)}(-\infty, +\infty)$ непрерывно дифференцируемых функций $y = y(x)$, ограниченных на оси $-\infty < x < +\infty$.

Для определения собственных функций $\psi(x) \in C^{(1)}$ в силу формулы (3.56) имеем дифференциальное уравнение

$$\frac{1}{\mathrm{i}} \cdot \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = \lambda\psi. \tag{3.60}$$

Отсюда получаем собственные функции

$$\psi(x) = c\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x} \quad (c \neq 0).$$

Из условия ограниченности на интервале $(-\infty, +\infty)$ решений $\psi(x)$ вытекает, что λ – любое действительное число. Следовательно, оператор (3.59) имеет сплошной спектр
$$-\infty < \lambda < +\infty.$$

Отметим основные свойства собственных значений и собственных функций эрмитовых операторов.

Теорема 3.8.1. *Все собственные значения эрмитова оператора действительны.*

Доказательство. Пусть λ – некоторое собственное значение эрмитова оператора $\hat{A}$ и φ – соответствующая собственная функция

$$\hat{A}\varphi = \lambda\varphi, \tag{3.61}$$

где $\varphi \neq 0$. На основании определения эрмитова оператора имеем

$$\left(\hat{A}\varphi,\, \varphi\right) = \left(\varphi,\, \hat{A}\varphi\right).$$

Отсюда, используя равенство (3.61), находим

$$(\lambda\varphi,\, \varphi) = (\varphi,\, \lambda\varphi)$$

или
$$\lambda\,(\varphi,\, \varphi) = \lambda^*\,(\varphi,\, \varphi)\,.$$

Так как $(\varphi, \varphi) \neq 0$, то из последнего равенства получаем

$$\lambda = \lambda^*,$$

т. е. λ – действительное число. $\square$

Теорема 3.8.2. *Собственные функции эрмитова оператора $\hat{A}$, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны между собой.*

Доказательство. Пусть

$$\hat{A}\varphi = \lambda\varphi \text{ и } \hat{A}\psi = \mu\psi, \tag{3.62}$$

где
$$\lambda \neq \mu \quad \text{и} \quad \varphi \neq 0, \quad \psi \neq 0.$$

Имеем
$$\left(\hat{A}\varphi,\, \psi\right) = \left(\varphi,\, \hat{A}\psi\right)$$

или

$$(\lambda\varphi,\, \psi) = (\varphi,\, \mu\psi)\,.$$

Так как λ и μ – действительные числа, то из последнего равенства получаем

$$\lambda\,(\varphi,\, \psi) = \mu\,(\varphi,\, \psi)$$

и, следовательно,

$$(\lambda - \mu)\,(\varphi,\, \psi) = 0.$$

Учитывая, что $\lambda - \mu \neq 0$, окончательно имеем

$$(\varphi,\, \psi) = \int\!\!\cdots\!\!\int_{\Omega} \varphi\psi^* \mathrm{d}\Omega = 0,$$

т. е. функции φ и ψ ортогональны (§3.2). □

Замечание. В случае вырождения собственного значения λ эрмитова оператора $\hat{A}$ нельзя гарантировать, что ЛЮБЫЕ соответствующие собственные функции его ортогональны.

Однако, если собственному значению λ отвечает конечное или счётное множество линейно независимых собственных функций

$$\varphi_1,\, \varphi_2,\, \ldots,$$

то процессом ортогонализации (§3.4) можно построить соответствующую ортогональную систему собственных функций

$$\psi_1,\, \psi_2,\, \ldots,$$

где

$$(\psi_m,\, \psi_n) = 0 \quad \text{при } m \neq n.$$

3.9 Линейные операторы в конечно-мерном гильбертовом пространстве

Предположим, что линейный оператор $\hat{A}$ действует из конечно-мерного гильбертова пространства H_m размерности m в это же пространство. В H_m любая совокупность m линейно независимых функций $\varphi_1,\, \ldots,\, \varphi_m$ из H_m образует базис пространства H_m. Для простоты будем предполагать, что этот базис ОРТОНОРМИРОВАННЫЙ (см. §3.4). Чтобы задать оператор $\hat{A}$ в пространстве H_m, достаточно указать, во что переходят при преобразовании $\hat{A}$ базисные функции $\hat{A}\varphi_1, \ldots, \hat{A}\varphi_m$, т. е. достаточно определить функции $\hat{A}\varphi_1, \ldots, \hat{A}\varphi_m$. Так как, по предположению,

$$\hat{A}\varphi_i =\in H_m \quad (i = 1, \ldots, m)\,,$$

то

$$\hat{A}\varphi_i = \sum_{k=1}^{m} a_{ik}\varphi_k \quad (i = 1, \ldots, m)\,, \tag{3.63}$$

где a_{ik} $(k = 1, \ldots, m)$ – координаты функции $\hat{A}\varphi_i$ в данном базисе. Умножая скалярно обе части равенства (3.63) на φ_j $(j = 1, \ldots, m)$ и используя свойства скалярного произведения, будем иметь

$$\left(\hat{A}\varphi_i,\, \varphi_j\right) = \sum_{k=1}^{m} a_{ik}\left(\varphi_k,\, \varphi_j\right).$$

Отсюда, учитывая, что

$$(\varphi_k,\, \varphi_j) = \delta_{kj},$$

получим

$$a_{ij} = \left(\hat{A}\varphi_i,\, \varphi_j\right). \tag{3.64}$$

В общем случае, если базис $\varphi_1, \ldots, \varphi_m$ не является ортонормированными, то a_{ij} представляют собой j-тую координату функции $\hat{A}\varphi_i$ в представлении (3.63).

Матрица

$$A = (a_{ij}) \tag{3.65}$$

называется *матрицей оператора* $\hat{A}$ в базисе (в представлении) $\varphi_1, \ldots, \varphi_m$. Эта матрица полностью определяет оператор $\hat{A}$, так как если f – произвольная функция из H_m с координатами $c_1, \ldots, c_m$, то

$$f = \sum_{i=1}^{m} c_i\varphi_i$$

и

$$\hat{A}f = \sum_{i=1}^{m} c_i\hat{A}\varphi_i = \sum_{i=1}^{m} c_i \sum_{j=1}^{m} a_{ij}\varphi_j = \sum_{j=1}^{m} c_i a_{ij}.$$

Таким образом, $\hat{A}f$ есть функция с координатами

$$\left(\hat{A}f\right)_j = \sum_{i=1}^{m} c_i a_{ij} \quad (j = 1, \ldots, m)\,. \tag{3.66}$$

Обратно, каждой матрице A соответствует вполне определённый линейный оператор $\hat{A}$ в пространстве H_m с базисом $\varphi_1, \ldots, \varphi_m$.

Легко проверить, что в алгебре операторов (§3.6) соответствует такая же алгебра матриц.

Определим собственные векторы

$$\psi = \sum_{j=1}^{m} c_j \varphi_j \tag{3.67}$$

$\left(\sum_{j=1}^{m} |c_j| \neq 0\right)$ оператора $\hat{A}$. Функция ψ находится как ненулевое решение операторного уравнения

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi,$$

где λ – некоторое число (*собственное значение* оператора $\hat{A}$). Отсюда на основании формул (3.66) и (3.67) получаем

$$\sum_{j=1}^{m} \varphi_j \sum_{i=1}^{m} c_i a_{ij} = \lambda \sum_{j=1}^{m} c_j \varphi_j$$

или

$$\sum_{j=1}^{m} \varphi_j \left(\sum_{i=1}^{m} c_i a_{ij} - \lambda c_j \right) = 0. \tag{3.68}$$

Так как функции φ_j линейно независимы, то из формулы (3.68) находим

$$\sum_{i=1}^{m} a_{ij} c_i - \lambda c_j = 0 \quad (j = 1, \ldots, m)$$

или

$$\sum_{i=1}^{m} \left(a_{ij} - \lambda \delta_{ij}\right) c_j = 0 \quad (j = 1, \ldots, m). \tag{3.69}$$

Таким образом, координаты c_i $(i = 1, \ldots, m)$ собственного вектора ψ представляют собой ненулевые решения однородной системы (3.69). Из алгебры известно, что линейная однородная система имеет ненулевые решения тогда и только тогда, когда определитель матрицы этой системы равен нулю. Отсюда для определения собственных значений оператора $\hat{A}$ получаем уравнение [Гел98]

$$\det\left(a_{ij} - \lambda \delta_{ij}\right) = 0$$

или в раскрытом виде

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \tag{3.70}$$

Уравнение (3.70) называется *характеристическим* или *вековым уравнением* матрицы A. Каждый корень λ_j ($j = 1, \ldots, n$) векового уравнения является собственным значением оператора $\hat{A}$; ему соответствует одна или несколько линейно независимых собственных функций ψ, координаты которых определяются из однородной системы (3.69) при $\lambda = \lambda_j$. Отсюда вытекает следующая теорема.

Теорема 3.9.1. *Всякий линейный оператор в конечно-мерном гильбертовом пространстве имеет хотя бы один собственный вектор.*

Следующая теорема характеризует простые корни векового уравнения.

Теорема 3.9.2. *Собственные функции $\varphi_1, \ldots, \varphi_k$ ($k \leqslant m$) оператора $\hat{A}$, соответствующие простым корням $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ векового уравнения его матрицы A, линейно независимы между собой.*

Доказательство. Пусть функции $\varphi_1, \ldots, \varphi_k$ линейно независимы, причём

$$c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \cdots + c_k\varphi_k = 0, \tag{3.71}$$

где $c_1 \neq 0$.

Применяя к тождеству (3.71) преобразование $\hat{A}$, находим

$$c_1\hat{A}\varphi_1 + c_2\hat{A}\varphi_2 + \cdots + c_k\hat{A}\varphi_k = 0$$

или, так как $\hat{A}\varphi_j = \lambda_j\varphi_j$ ($j = 1, \ldots, m$), то

$$c_1\lambda_1\varphi_1 + c_2\lambda_2\varphi_2 + \cdots + c_k\lambda_k\varphi_k = 0. \tag{3.72}$$

Из равенств (3.71) и (3.72) можно исключить φ_k. А именно, почленно вычитыая из равенства (3.72) равенство (3.71), умноженное на λ_k, будем иметь

$$c_1\left(\lambda_1 - \lambda_k\right)\varphi_1 + c_2\left(\lambda_2 - \lambda_k\right)\varphi_2 + \ldots c_{k-1}\left(\lambda_{k-1} - \lambda_k\right)\varphi_{k-1} = 0.$$

Аналогичным путём можно исключить $\varphi_{k-1}, \ldots, \varphi_2$. В результате получим

$$c_1\left(\lambda_1 - \lambda_k\right)\left(\lambda_1 - \lambda_{k-1}\right)\ldots\left(\lambda_1 - \lambda_2\right) = 0.$$

Последнее равенство противоречиво, так как ни один из его сомножителей не равен нулю. □

Следствие. *Если все корни векового уравнения матрицы A простые, то собственные функции соответствующего оператора $\hat{A}$ образуют базис конечно-мерного функционального пространства H_m (*собственный базис оператора *$\hat{A}$).*

Если среди корней векового уравнения λ_j имеются кратные, то собственные функции соответствующего оператора $\hat{A}$ могут не образовывать базиса пространства H. В алгебре доказывается, что при $\lambda = \lambda_j$ система (3.69) имеет линейно независимые решения, число которых не превышает кратности этого корня. В частности, если корень λ_j простой, то система допускает лишь одно линейно независимое решение и, таким образом, простому корню векового уравнения (3.70) соответствует с точностью до коэффициента пропорциональности одна собственная функция оператора $\hat{A}$.

Пример 3.9.1. Пусть H_3 – совокупность действительных квадратных трёхчленов

$$f = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$

на отрезке $0 \leqslant x \leqslant 1$ и $D = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ – оператор дифференцирования. Требуется определить собственные значения оператора D.

В качестве базиса здесь принята система функций:

$$g_0 = 1; \quad g_1 = x; \quad g_2 = x^2.$$

Так как

$$Df = c_1 + 2c_2 x,$$

то для определения собственного значения λ имеем уравнение

$$c_1 + 2c_2 x \equiv \lambda \left(c_0 + c_1 x + c_2 x^2\right).$$

Отсюда

$$-\lambda c_2 x^2 + (2c_2 - \lambda c_1)\, x + (c_1 - \lambda c_0) \equiv 0.$$

Приравнивая нулю коэффициенты при x^2, x и x^0, имеем систему:

$$\left.\begin{aligned} -\lambda c_2 &= 0; \\ 2c_2 - \lambda c_1 &= 0; \\ c_1 - \lambda c_0 &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{3.73}$$

Отсюда получаем вековое уравнение

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 \\ 2 & -\lambda & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Следовательно,

$$\lambda^3 = 0,$$

т. е. единственное собственное значение оператора D есть $\lambda = 0$.

Полагая $\lambda = 0$ в системе (3.73), получаем систему для определения координат c_2, c_1, c_0 собственной функции ψ:

$$\left.\begin{aligned} 0 &= 0; \\ c_2 &= 0; \\ c_1 &= 0. \end{aligned}\right\}$$

Отсюда $c_2 = 0$; $c_1 = 0$; $c_0 = c \neq 0$. Таким образом, собственный вектор оператора D есть

$$\psi = c \quad (c \neq 0)\,.$$

Действительно, имеем очевидный результат $D\psi = 0 = 0\psi$.

Пусть оператор $\hat{A}$ эрмитов, т. е. для любых функций $f \in H_m$ и $g \in H_m$ имеем

$$\left(\hat{A}f,\, g\right) = \left(f,\, \hat{A}g\right).$$

На основании формулы (3.64) получаем

$$a_{ji} = \left(\hat{A}\varphi_j,\, \varphi_i\right) = \left(\varphi_j,\, \hat{A}\varphi_i\right) = \left(\hat{A}\varphi_i,\, \varphi_j\right)^*,$$

т. е.

$$a_{ji} = a_{ij}^*. \tag{3.74}$$

Матрица $A = (a_{ij})$, элементы которой удовлетворяют условию (3.74), называются *эрмитовой*. Если элементы a_{ij} матрицы $\hat{A}$ действительны, то имеем просто

$$a_{ji} = a_{ij},$$

т. е. матрица с действительными элементами эрмитова тогда и только тогда, когда она симметрическая.

На основании соотношения (3.74) получаем следующий результат: эрмитовому оператору $\hat{A}$ в любом ортонормированном базисе соответствует эрмитова матрица[3] $A = (a_{ij})$ и обратно, каждой эрмитовой матрице A отвечает некоторый эрмитов оператор $\hat{A}$.

Так как все собственные значения эрмитова оператора $\hat{A}$ действительны (§3.8, теорема 3.8.1), то для эрмитовой матрицы $A = (a_{ij})$ её вековое уравнение

$$\det\left(a_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right) = 0 \tag{3.75}$$

имеет лишь действительные корни.

В общем случае число линейных независимых векторов матрицы A может быть меньше размерности m пространства H_m. Если же матрица A эрмитова, то число линейно независимых её собственных векторов в точности равно размерности пространства [Гел98]

[3]Можно доказать, что в любом представлении (не обязательно ортогональном) матрица эрмитова оператора эрмитова.

Теорема 3.9.3. *Каждому корню векового уравнения эрмитовой матрицы A соответствует столько линейно независимых собственных функций отвечающего ей оператора $\hat{A}$, какова кратность этого корня.*

Доказательство. Пусть $\lambda_1,\, \lambda_2,\, \ldots,\, \lambda_k$ $(k \leqslant m)$ – попарно различные корни векового уравнения (3.75), которые все действительны, и $\alpha_1,\, \alpha_2,\, \ldots,\, \alpha_k$ – их соответствующие кратности, причём

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_k = m.$$

В m-мерном пространстве H_m согласно теореме 3.9.1 имеется хотя бы одна собственная функция ψ_1 оператора $\hat{A}$; пусть она соответствует собственному значению λ_1 (этого всегда можно добиться путём надлежащей нумерации корней векового уравнения). Рассмотрим множество $H_{m-1} = \{f\}$ всех функций f, ортогональных к функции ψ_1, т. е. таких, что

$$(f,\, \psi_1) = 0.$$

Множество H_{m-1} образует $(m-1)$-мерное гильбертово пространство. Действительно, если $f \in H_{m-1}$ и c – произвольное число, то имеем

$$(cf,\, \psi_1) = c\,(f,\, \psi_1) = 0,$$

т. е. $cf \in H_{m-1}$. Аналогично, если $f \in H_{m-1}$ и $g \in H_{m-1}$, то получаем

$$(f + g,\, \psi_1) = (f,\, \psi_1) + (g,\, \psi_1) = 0 + 0 = 0,$$

т. е. $(f + g) \in H_{m-1}$. Кроме того, H_{m-1} инвариантно относительно преобразования $\hat{A}$, т. е. если $f \in H_{m-1}$, то $\hat{A}f \in H_{m-1}$. В самом деле

$$\left(\hat{A}f,\, \psi_1\right) = \left(f,\, \hat{A}\psi_1\right) = (f,\, \lambda_1\psi_1) = \lambda_1\,(f,\, \psi_1) = 0,$$

т. е. $\hat{A}f \in H_{m-1}$.

Таким образом, пространство H_{m-1} обладает свойствами пространства H_m, и следовательно, в нём снова найдётся собственная функция ψ_2 оператора $\hat{A}$, которую можно выбрать ортогональной к ψ_1. Собственная функция ψ_2 соответствует некоторому собственному значению, принадлежащему спектру $\lambda_1,\, \lambda_2,\, \ldots,\, \lambda_k$. Повторяя это рассуждение, в конце концов получим для оператора $\hat{A}$ систему попарно ортогональных собственных функций

$$\psi_1,\, \psi_2,\, \ldots,\, \psi_m,$$

где число линейно независимых функций для собственного значения λ_j равно β_j $(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, k)$, причём

$$\beta_1 + \beta_2 + \cdots + \beta_k = m.$$

Так как $\beta_j \leqslant \alpha_j$ $(j = 1, 2, \ldots, k)$, то отсюда получаем

$$\beta_j = \alpha_j \ (j = 1, 2, \ldots, k)\,,$$

что и требовалось доказать. □

Следствие 3.9.1. *Для эрмитова оператора степень вырождения собственного значения совпадает с кратностью его в вековом уравнении.*

Следствие 3.9.2. *Для эрмитового оператора $\hat{A}$ в пространстве H_m существует ортогональный базис, состоящий из собственных функций оператора $\hat{A}$.*

Заметим, что матрица $A = (a_{ij})$ эрмитова оператора $\hat{A}$ в его собственном ортонормированном базисе $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_m$ диагональна.

Действительно, имеем

$$a_{ij} = \left(\hat{A}\psi_i, \psi_j\right) = (\lambda_i\psi_i, \psi_j) = \lambda_i\delta_{ij}$$

и, следовательно,

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_m \end{pmatrix},$$

где каждое собственное значение λ $(j = 1, \ldots, m)$ повторяется столько раз, какова его кратность.

3.10 Матричное представление линейного оператора

Рассмотрим линейный оператор $\hat{A}$ в бесконечно-мерном пространстве $H_\infty = H$ с ортонормированным базисом $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n, \ldots$.

По аналогии с конечно-мерным случаем (§3.9) полагаем

$$\hat{A}\varphi_i = \sum_{k=1}^{\infty} a_{ik}\varphi_k \quad (i = 1, 2, \ldots)\,. \tag{3.76}$$

Умножая равенство (3.76) справа на φ_j и пользуясь условием ортонормированности

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij},$$

будем иметь

$$\left(\hat{A}\varphi_i,\, \varphi_j\right) = \sum_{k=1}^{\infty} a_{ik}\left(\varphi_k,\, \varphi_j\right) = \sum_{k=1}^{\infty} a_{ik}\delta_{kj} = a_{ij}.$$

Следовательно, координаты функции $\hat{A}\varphi_i$ в базисе $\varphi_1,\, \varphi_2,\, \ldots$ равны

$$a_{ij} = \left(\hat{A}\varphi_i,\, \varphi_j\right) \quad (i,\, j = 1,\, 2,\, \ldots).$$

Бесконечная матрица

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mm} & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \tag{3.77}$$

называемая *матрицей оператора* $\hat{A}$, полностью определяет этот оператор и является *представлением оператора* $\hat{A}$ в данном базисе $\varphi_1,\, \varphi_2,\, \ldots$

Если оператор $\hat{A}$ эрмитов, то имеем

$$a_{ji} = \left(\hat{A}\varphi_j,\, \varphi_i\right) = \left(\varphi_j,\, \hat{A}\varphi_i\right) = \left(\hat{A}\varphi_i,\, \varphi_j\right)^*,$$

т. е.

$$a_{ji} = a_{ij}^*.$$

Таким образом, матрица эрмитова оператора эрмитова.

Пусть

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n \quad (\|\psi\| < +\infty)$$

– собственная функция оператора $\hat{A}$, отвечающая собственному значению λ, т. е.

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi.$$

Так как

$$\hat{A}\psi = \sum_{m=1}^{\infty} c_m\hat{A}\varphi_m = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \sum_{n=1}^{\infty} a_{mn}\varphi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n \sum_{m=1}^{\infty} a_{mn}c_m,$$

то имеем

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n \sum_{m=1}^{\infty} a_{mn}c_m = \lambda \sum_{n=1}^{\infty} c_n\varphi_n$$

или

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n \left(\sum_{m=1}^{\infty} a_{mn} c_m - \lambda c_n \right) = 0.$$

Отсюда ввиду единственности разложения нулевой функции по функциям базиса $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ для определения координат c_n получаем бесконечную систему уравнений

$$\sum_{m=1}^{\infty} (a_{mn} c_m - \lambda c_n) = 0$$

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

или

$$\sum_{m=1}^{\infty} (a_{mn} - \lambda \delta_{mn})\, c_m = 0 \qquad (n = 1, 2, \ldots)\,. \tag{3.78}$$

Как известно, конечная однородная линейная система имеет ненулевые решения лишь того, когда её определитель равен нулю. Формально перенося этот результат на бесконечную систему (3.78), для определения λ получаем *вековое уравнение*, левая часть которого представляет собой определитель бесконечного порядка:

$$\Delta(\lambda) \equiv \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdot & \cdot \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix} = 0. \tag{3.79}$$

Такой определитель нужно рассматривать как предел при $m \to \infty$ определителя

$$\Delta_m(\lambda) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdot & \cdot & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \cdot & \cdot & a_{2m} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdot & \cdot & a_{mm} \end{vmatrix}$$

$(m = 1, 2, \ldots)$ конечного порядка m, т. е.

$$\Delta(\lambda) = \lim_{m \to \infty} \Delta_m(\lambda).$$

Если $\lambda = \lambda_0$ – корень уравнения (3.79), для которого однородная система (3.78) имеет ненулевое решение $\psi_0 \in H$, то λ_0 есть собственное значение оператора $\hat{A}$, а ψ_0 является соответствующей собственной функцией этого оператора.

Если оператор $\hat{A}$ эрмитов, то все корни векового уравнения (3.79) действительны, а линейно независимые собственные функции можно считать попарно ортогональными.

Для квантовой механики представляют интерес эрмитовы операторы $\hat{A}$, допускающие счётное множество собственных значений $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n, \ldots$, для которых соответствующая ортонормированная система собственных функций $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n, \ldots$ полная. Среди значений λ_n могут быть вырожденные, причём каждое из них повторяется столько раз, какова его кратность (*степень вырождения*).

Принимая систему собственных функций $\psi_1, \psi_2, \ldots$ за базис пространства H, находим

$$a_{ij} = \left(\hat{A}\psi_i, \psi_j\right) = (\lambda_i \psi_i, \psi_j) = \lambda_i \delta_{ij}.$$

Отсюда матрица оператора $\hat{A}$ имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_2 & \cdots \\ . & . & . \; . \; . \; . \end{pmatrix}. \qquad (3.80)$$

Таким образом, в *собственном представлении эрмитов оператор* $\hat{A}$ *изображается диагональной матрицей* (3.80), где элементы на главной диагонали есть собственные значения этого оператора.

3.11 Свойства коммутирующих эрмитовых операторов

Пусть эрмитов оператор $\hat{A}$ имеет дискретный спектр

$$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n, \ldots, \qquad (3.81)$$

где все собственные значения обладают конечной степенью вырождения, причём каждое собственное значение повторяется столько раз, какова его кратность. Тогда в силу теоремы 3.4.2 из § 3.4 и замечания к ней можно построить ортонормированную систему функций

$$\varphi_1(q), \varphi_2(q), \ldots, \varphi_n(q), \ldots, \qquad (3.82)$$

где

$$(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}.$$

Мы будем предполагать, что система собственных функций (3.82) является полной (§3.5).

Рассмотрим другой эрмитов оператор $\hat{B}$ с дискретным спектром

$$\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n, \ldots \qquad (3.83)$$

Теорема 3.11.1. *Если эрмитовы операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют между собой*

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}, \tag{3.84}$$

то существует полная ортогональная система собственных функций оператора $\hat{A}$, все элементы которой являются собственными функциями оператора $\hat{B}$, т. е. существует полная система общих собственных функций операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Доказательство. [Хин51]. 1° Пусть λ – произвольное собственное значение оператора $\hat{A}$ и $\varphi = \varphi(q)$ – любая, отвечающая ему собственная функция, т. е.

$$\hat{A}\varphi = \lambda\varphi.$$

Действуя на это равенство оператором $\hat{B}$ и учитывая условие коммутативности (3.84), будем иметь

$$\hat{B}\left(\hat{A}\varphi\right) = \hat{A}\left(\hat{B}\varphi\right) = \lambda\left(\hat{B}\varphi\right). \tag{3.85}$$

Отсюда следует, что или $\hat{B}\varphi = 0$, или $\hat{B}\varphi$ есть собственная функция оператора $\hat{A}$.

Итак, если оператор $\hat{B}$ коммутирует с оператором $\hat{A}$ и φ – собственная функция оператора $\hat{A}$, соответствующая собственному значению λ, то $\hat{B}\varphi \neq 0$ есть также собственная функция оператора $\hat{A}$, отвечающая тому же собственному значению λ.

2° Перейдём теперь к построению общей системы собственных функций для операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Пусть сначала λ_i – простое (невырожденное) собственное значение оператора $\hat{A}$ и φ_i – соответствующая собственная функция.

Рассмотрим функцию $\hat{B}\varphi_i$. Если $\hat{B}\varphi_i = 0$, то φ_i, очевидно, является общей собственной функцией операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, так как при надлежащей нумерации спектра $\{\mu_j\}$ имеем

$$\hat{A}\varphi_i = \lambda_i\varphi_i$$

и

$$\hat{B}\varphi_i = \mu_i\varphi_i,$$

где $\mu_i = 0$. Если же $\hat{B}\varphi_i \neq 0$, то $\hat{B}\varphi_i$ есть собственная функция оператора $\hat{A}$, отвечающая собственному значению λ_i. Так как значение λ_i простое, то функция φ_i и $\hat{B}\varphi_i$ линейно зависимы, т. е.

$$\hat{B}\varphi_i = k\varphi_i, \tag{3.86}$$

где k – некоторый числовой множитель. Из формулы (3.86) вытекает, что φ_i есть собственная функция оператора $\hat{B}$, соответствующая некоторому собственному числу $k = \mu_i$[4] (при надлежащей нумерации). Таким образом, каждая собственная функция φ_i оператора $\hat{A}$, соответствующая простому собственному значению λ_i, является также собственной функцией ψ_i оператора $\hat{B}$, т. е.

$$\psi_i = \varphi_i .$$

3° Пусть теперь $\lambda_i = \lambda$ есть кратное собственное значение оператора $\hat{A}$ со степенью вырождения m $(m > 1)$

$$\lambda_i = \lambda_{i+1} = \cdots = \lambda_{i+m-1}$$

и

$$\varphi_i = \varphi^{(1)}; \quad \varphi_{i+1} = \varphi^{(2)}, \, \ldots, \, \varphi_{i+m-1} = \varphi^{(m)}$$

– отвечающие этому собственному значению его линейно независимые собственные функции, которые можно выбрать ортонормированными. На основании доказательства 1° функции

$$\hat{B}\varphi^{(1)}, \, \hat{B}\varphi^{(2)}, \, \ldots, \, \hat{B}\varphi^{(m)} \tag{3.87}$$

или нулевые, или собственные функции оператора $\hat{A}$, отвечающие значению λ.

Совокупность всех собственных функций оператора $\hat{A}$, соответствующих одному и тому же собственному значению λ, вместе с присоединённой нулевой функцией $f = 0$ образует линейное пространство размерности m (§3.8), где функции $\varphi^{(k)}$ $(k = 1, \ldots, m)$ представляют собой его ортонормированный базис (§3.1). Поэтому $\hat{B}\varphi^{(j)}$ $(j = 1, \ldots, m)$ являются линейными комбинациями функции $\varphi^{(k)}$ $(k = 1, \ldots, m)$, т. е.

$$\hat{B}\varphi^{(j)} = \sum_{k=1}^{m} a_{jk}^{(i)} \varphi^{(k)} \tag{3.88}$$

$$(j = 1, \, \ldots, \, m) \, ,$$

где $a_{jk}^{(i)}$ – некоторые постоянные.

Из формулы (3.88), учитывая ортонормированность функций $\varphi^{(k)}$ $(k = 1, \ldots, m)$ будем иметь

$$a_{jk}^{(i)} = \left(\hat{B}\varphi^{(j)}, \, \varphi^{(k)} \right) .$$

[4] Так как спектр $\{\mu_j\}$ представляет собой совокупность всех собственных значений оператора $\hat{B}$, то число k должно быть точкой этого спектра.

Так как оператор $\hat{B}$ эрмитов, то отсюда получаем

$$a_{kj}^{(i)} = a_{jk}^{(i)*}. \tag{3.89}$$

Рассмотрим ненулевую функцию вида

$$\psi = \sum_{k=1}^{m} b_k \varphi^{(k)}, \tag{3.90}$$

очевидно, являющуюся собственной функцией оператора $\hat{A}$, принадлежащей собственному значению λ. Подберём если это возможно, коэффициенты b_k так, чтобы функция ψ вместе с тем являлась собственной функцией оператора $\hat{B}$, принадлежащая некоторому собственному значению μ, т. е.

$$\hat{B}\psi = \mu\psi. \tag{3.91}$$

В силу линейности оператора $\hat{B}$, учитывая соотношения (3.88), имеем

$$\hat{B}\psi = \sum_{k=1}^{m} b_k \hat{B}\varphi^{(k)} = \sum_{k=1}^{m} b_k \sum_{l=1}^{m} a_{kl}^{(i)} \varphi^{(l)}.$$

Отсюда, изменяя порядок суммирования, получаем

$$\hat{B}\psi = \sum_{l=1}^{m} \varphi^{(l)} \sum_{k=1}^{m} a_{kl}^{(i)} b_k. \tag{3.92}$$

Подставляя выражение (3.92) и (3.90) в формулу (3.91), находим

$$\sum_{l=1}^{m} \varphi^{(l)} \sum_{k=1}^{m} a_{kl}^{(l)} b_k = \mu \sum_{l=1}^{m} b_l \varphi^{(l)}$$

или

$$\sum_{l=1}^{m} \left\{ \sum_{k=1}^{m} a_{kl}^{(i)} b_k - \mu b_l \right\} \varphi^{(l)} = 0.$$

Так как функции $\varphi^{(l)}$ $(l = 1, \ldots, m)$ линейно независимы, то из последнего равенства вытекает, что все коэффициенты при $\varphi^{(l)}$ должны быть равны нулю, т. е.

$$\sum_{k=1}^{m} \left(a_{kl}^{(i)} b_k - \mu b_l \right) = 0 \qquad (l = 1, \ldots, m).$$

Таким образом, для определения коэффициентов b_k $(k = 1, \ldots, m)$ имеем однородную систему линейных уравнений

$$\sum_{k=1}^{m} \left(a_{kl}^{(i)} - \mu \delta_{kl} \right) b_k = 0. \tag{3.93}$$

Система (3.93) имеет ненулевые решения тогда и только тогда, когда её определитель

$$\Delta(\mu) \equiv \det\left(a_{kl}^{(i)} - \mu\delta_{kl}\right) = 0. \tag{3.94}$$

Корни уравнения (3.94), очевидно, являются элементами спектра $\{\mu_j\}$ оператора $\hat{B}$ и при соответствующей нумерации точек этого спектра могут быть записаны в виде

$$\mu_i,\ \mu_{i+1},\ \ldots,\ \mu_{i+m-1},$$

где каждый из корней повторяется столько раз, какова его кратность. Корни μ_j как собственные значения эрмитова оператора $\hat{B}$ действительны. Для всякого корня μ_j $(j = i,\ \ldots,\ i+m-1)$ система (3.93) имеет ненулевые решения $b_k^{(j)}$, причём

$$\psi_j = \sum_{k=1}^{m} b_k^{(j)} \varphi^{(k)}, \tag{3.95}$$

по построению являются общими собственными функциями операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Так как матрица $A = \left(a_{kl}^{(i)}\right)$ в силу соотношения (3.89) ЭРМИТОВА и уравнение (3.94) есть вековое уравнение этой матрицы, то среди функций ψ_j имеется ровно m линейно независимых (§3.9, теорема 3.9.3), которые можно считать попарно ортогональными и нормированными (§3.4).

В результате доказательств 2° и 3° построена полная ортонормированная система функций ψ_n $(n = 1,\ \ldots)$ со следующими свойствами:

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}\psi_n &= \lambda_n\psi_n; \\ \hat{B}\psi_n &= \mu_n\psi_n. \end{aligned}\right\} \tag{3.96}$$

где значения μ_n пронумерованы соответствующим образом. □

Следствие. *Если эрмитовы операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, для всех собственных функций одного из них, принадлежащих к одному и тому же собственному значению, то эти операторы имеют общие собственные функции. Этот результат вытекает непосредственно из доказательства теоремы.*

Замечание. Совокупность значений μ_n, удовлетворяющих равенствам (3.96), образует весь спектр оператора $\hat{B}$, причём каждому собственному значению μ_n соответствует столько линейно независимых функций ψ_n, какова степень вырождения значения μ_n.

Действительно, пусть μ – элемент спектра оператора $\hat{B}$, отличный от μ_n ($n = 1, 2, \ldots$). Тогда собственная функция ψ оператора $\hat{B}$, отвечающая собственному значению μ, будет ортогональна ко всем функциям ψ_n (§3.8, теорема 3.8.2), т. е.

$$(\psi, \psi_n) = 0 \quad (n = 1, 2, \ldots).$$

Отсюда ввиду полноты системы функций $\{\psi_n\}$ получаем (§3.5)

$$\psi \equiv 0,$$

что противоречит определению собственной функции.

Аналогичный результат получается, если предположить, что число линейно независимых собственных функций ψ_n, соответствующих одному и тому же собственному значению μ_n оператора $\hat{B}$, меньше степени вырождения этого значения.

Теорема 3.11.2. *Если существует полная система*

$$\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n, \ldots$$

общих собственных функций двух линейных операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, то эти операторы коммутируют между собой.

Доказательство. Действительно, пусть

$$\hat{A}\psi_n = \lambda_n\psi_n \quad \text{и} \quad \hat{B}\psi_n = \mu_n\psi_n \tag{3.97}$$

($n = 1, 2, \ldots$). Каждую функцию $f \in H$ можно разложить в ряд Фурье

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n.$$

Отсюда, действуя оператором $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ на функцию f, в силу (3.97) будем иметь

$$\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) f = \hat{A}\hat{B}\sum_n c_n\psi_n - \hat{B}\hat{A}f = \hat{A}\sum_n c_n\mu_n\psi_n - \\ - \hat{B}\sum_n c_n\lambda_n\psi_n = \sum_n c_n\mu_n\lambda_n\psi_n - \sum_n c_n\lambda_n\mu_n\psi_n \equiv 0.$$

Следовательно,

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}.$$

□

3.12 Функция Дирака

Рассмотрим последовательность функций

$$\Pi_n(x) = \begin{cases} n & \text{при } |x| \leqslant \frac{1}{2n} \\ 0 & \text{при } |x| > \frac{1}{2n} \end{cases}$$

$(n = 1, 2, 3, \dots)$.

Очевидно

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Pi_n(x)\mathrm{d}x = 1, \tag{3.98}$$

Положим

$$\delta(x) = \lim_{n\to\infty} \Pi_n(x).$$

Тогда получим

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \neq 0 \\ \infty & \text{при } x = 0 \end{cases} \tag{3.99}$$

Формально будем предполагать, что интегральное соотношение (3.98) сохраняется и в пределе, т. е.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1. \tag{3.100}$$

Функция, определяемая формулами (3.99) и (3.100), носит название *функции Дирака* или *δ-функции.*

Строго говоря, $\delta(x)$ не является функцией с точки зрения классического анализа; это так называемая *обобщённая функция.*

Пример. Пусть случайная величина ξ принимает значение a с вероятностью $P = 1$ и любое значение $x \neq a$ – с вероятностью $P = 0$. Плотность вероятности $p(x)$ этого распределения, очевидно, можно выразить формулой

$$p(x) = \delta(x - a);$$

причём

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)\mathrm{d}x = 1.$$

Отметим одно полезное свойство δ-функции: если $f(x) \in C(-\infty, +\infty)$, то

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)\mathrm{d}x = f(x_0). \tag{3.101}$$

Действительно, учитывая, что

$$[f(x) - f(x_0)]\,\delta(x - x_0) = \lim_{n\to\infty} [f(x) - f(x_0)]\,\Pi_n(x - x_0) \equiv 0.$$

имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} [f(x) - f(x_0)]\,\delta(x - x_0)\mathrm{d}x + \\ + f(x_0)\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x - x_0)\mathrm{d}x = 0 + f(x_0)\cdot 1 = f(x_0).$$

В квантовой механике важную роль играет *оператор умножения*

$$\hat{A}f(x) = xf(x),$$

где $f(x)$ – непрерывная функция, абсолютно интегрируемая при $-\infty < x < +\infty$.

Так как x – действительное число, то этот оператор ЭРМИТОВ. В самом деле, для любых функций $f(x)$ и $g(x)$ из нашего пространства получаем

$$\left(\hat{A}f(x),\, g(x)\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)g^*(x)\mathrm{d}x = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,[xg(x)]^*\,\mathrm{d}x = \left(f(x),\, \hat{A}g(x)\right).$$

Для определения нормированных собственных функций $\psi(x)$ оператора $\hat{A}$ нужно решить уравнение

$$\hat{A}\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

или

$$x\psi(x) = \lambda\psi(x), \tag{3.102}$$

где

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1. \tag{3.103}$$

Из уравнения (3.102) выводим

$$(x - \lambda)\,\psi(x) = 0. \tag{3.104}$$

Очевидно, что число λ – действительное, так как в противном случае мы бы имели $\psi(x) \equiv 0$.

Пусть λ – какое-нибудь действительное число. Из уравнения (3.104) и условия (3.103) имеем:

$$\psi(x) = 0 \text{ при } x \neq \lambda$$

и

$$\psi(x) = \infty \text{ при } x = \lambda.$$

Следовательно, в качестве собственных функций оператора $\hat{A}$ можно принять семейство функций

$$\psi_\lambda(x) = \delta(x - \lambda).$$

Таким образом, оператор $\hat{A}$ имеет сплошной спектр $-\infty < \lambda < +\infty$.

Заметим, что для собственных функций $\psi_\lambda(x)$ выполняется *обобщённое условие ортонормировки*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\lambda(x)\psi_\mu^*(x)\mathrm{d}x = \delta_{\lambda\mu}, \tag{3.105}$$

где

$$\delta_{\lambda\mu} = \begin{cases} 0 & \text{при } \lambda \neq \mu \\ 1 & \text{при } \lambda = \mu \end{cases}$$

Упражнения к третьей главе

1. Пусть C – совокупность функций $f(x)$, непрерывных на отрезке $[a,\, b]$ и

$$\|f\| = \int_a^b |f(x)|\,\mathrm{d}x.$$

Показать, что C есть нормированное линейное пространство.

2. Ортогонализовать систему функций:

$$g_1 = 1; \quad g_2 = x^2; \quad g_3 = x^4$$

на отрезке $[0,\, 1]$.

3. Построить ряд Фурье функции

$$f(x) = |x|$$

относительно полиномов Лежандра $P_n(x)$ $(n = 0,\, 1,\, 2,\, \dots)$, где $-1 \leqslant x \leqslant 1$.

4. Пусть
$$\hat{A} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x^2.$$
Найти $\hat{A}1$, $\hat{A}x$, $\hat{A}x^2$, $\hat{A}\mathrm{e}^x$. Чему равен $\hat{A}^2$?

5. Пусть
$$Ay = x\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x},$$
где $y \in C[1, +\infty)$ и $y(1) = 0$. Найти $\hat{A}^2$, $\hat{A}^3$, $\hat{A}^{-1}$.

6. Найти
$$\nabla^2 (uv)\,.$$

7. Найти собственные значения и собственные функции оператора
$$A = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2},$$
определённого в пространстве ограниченных функций:
$$y(x) \in C^{(2)}(-\infty, +\infty); \quad \sup|y(x)| < +\infty.$$

8. Пусть $f = f(x, y) \in C(E^2)$. Найти собственные значения *оператора проектирования*
$$Pf(x, y) = f(x, 0).$$

9. При каких условиях дифференциальный оператор
$$\hat{A} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + q(x),$$
где $p(x)$, $q(x) \in C^{(1)}[a, b]$ является эрмитовым в классе функций $y(x) \in C^{(2)}\,[a, b]$?

10. Приближённо найти первые два собственных значения *оператора Лагранжа*
$$\Lambda = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\left(1 - x^2\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]$$
в пространстве чётных ограниченных функций $y(x) \in C^{(2)}(-1, 1)$, приняв за базис функции
$$\varphi_n = \cos n\pi x \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)\,.$$

Глава 4

Некоторые сведения из квантовой механики

4.1 Ньютоновы уравнения движения в классической механике

В декартовом пространстве $OX_1X_2X_3$ рассмотрим конечную систему материальных точек (частиц) $m_{3j}(x_{3j-2},\, x_{3j-1},\, x_{3j})$ $(j = 1,\, \ldots,\, N)$ с постоянными массами m_{3j}.

Пусть

$$x = (x_1,\, \ldots,\, x_{3N})\,; \quad \dot{x} = \left(\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t},\, \ldots,\, \frac{\mathrm{d}x_{3N}}{\mathrm{d}t}\right)$$

и

$$\left.\begin{aligned} f_{3j-2} &= f_{3j-2}(t,\, x,\, \dot{x}); \\ f_{3j-1} &= f_{3j-1}(t,\, x,\, \dot{x}); \\ f_{3j} &= f_{3j}(t,\, x,\, \dot{x}) \end{aligned}\right\} \tag{4.1}$$

– проекции внешних сил, действующих на частицу m_{3j} в момент времени t. Тогда, полагая для удобства записи

$$m_{3j-2} \equiv m_{3j-1} \equiv m_{3j},$$

на основании закона Ньютона дифференциальные уравнения движения нашей системы могут быть записаны следующим образом:

$$m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} = f_j(t,\, x,\, \dot{x}) \tag{4.2}$$

$$(j = 1,\, \ldots,\, 3N)\,.$$

Если для начального момента времени $t = t_0$ заданы координаты $x_j(t_0) = x_{j0}$ и скорости $\dot{x}_j(t_0) = \dot{x}_{j0}$ $(j = 1, \ldots, 3N)$ точек системы, а функции f_j достаточно гладкие (например, непрерывны по совокупности переменных t, x, $\dot{x}$ и имеют непрерывные производные по x, $\dot{x}$), то дифференциальные уравнения (4.2) дают возможность однозначно определить состояние системы

$$x_j(t);\ \dot{x}_j(t) \quad (j = 1, \ldots, 3N)$$

для последующих моментов времени $t > t_0$.

Обычно бывает, что на положения и скорости точек системы накладываются известные ограничения геометрического или кинематического характера, называемые *связями* [Ган02]. Такие системы называются *несвободными* в отличие от *свободных систем*, когда связи отсутствуют. Мы ограничимся случаем *голономных* (недифференциальных) связей вида

$$g_j(t, x) = 0 \quad (j = 1, \ldots, n)\,. \tag{4.3}$$

Если положение системы характеризовать точкой $x = (x_1, \ldots, x_{3N})$ евклидова пространства E^{3N}, (*фазовое пространство системы*), то наличие связей (4.3) эквивалентно тому, что движущаяся точка x в момент времени t должна находиться на некоторой поверхности или линии пространства E^{3N}. Если связи (4.3) не зависят от времени t (*стационарные связи*), то эта поверхность (линия) постоянна (не перемещается в пространстве).

Величина

$$k = 3N - n$$

называется *числом степеней* свободы данной системы. На основании уравнений связи (4.3) n координат, например последние $x_{3N-n+1}, \ldots, x_{3N}$ можно выразить через $3N - n$ координат $x_1, \ldots, x_{3N-n}$, которые будут НЕЗАВИСИМЫМИ. Таким образом, число независимых координат системы совпадает с числом её степеней свободы.

Пример 4.1.1. Пусть при движении пары точек $m_1(x_1, x_2, x_3)$ и $m_2(x_4, x_5, x_6)$ расстояние между ними остаётся неизменным и равно l. Тогда уравнение связей есть

$$(x_1 - x_4)^2 + (x_2 - x_5)^2 + (x_3 - x_6)^2 = l^2.$$

Здесь число степеней свободы равно $k = 6 - 1 = 5$.

Во многих задачах применение декартовых прямоугольных координат является неудобным. Например, в задаче двух тел о движении одной планеты под действием центрального светила дифференциальное уравнение движения упрощаются, если вместо прямоугольных координат ввести полярные, выбранные в соответствующей плоскости. При наличии связи выгодно вводить криволинейные координаты так, чтобы требование связи сводилось к постоянству одной из этих криволинейных координат. Поэтому в общем случае систему с k степенями свободы определяют с помощью k независимых *обобщённых* (криволинейных) *координат*

$$q_1,\, \ldots,\, q_k.$$

Декартовы прямоугольные координаты x_j $(j = 1,\, \ldots,\, 3N)$ точек системы выражаются известными соотношениями:

$$x_j = x_j(t,\, q_1,\, \ldots,\, q_k) \tag{4.4}$$

$$(j = 1,\, \ldots,\, 3N)\,.$$

4.2 Уравнения Лагранжа

Пусть декартовы координаты x_j системы материальных точек m_j $(j = 1,\, \ldots,\, 3N)$ в момент времени t получают бесконечно-малые *виртуальные перемещения* (возможные перемещения при «замороженных связях») [Ган02]. Тогда на основании принципа Даламбера будем иметь

$$\sum_{j=1}^{3N} \left(f_j - m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} \right) \delta x_j = 0$$

или

$$\delta A \equiv \sum_{j=1}^{3N} f_j \delta x_j = \sum_{j=1}^{3N} m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} \delta x_j, \tag{4.5}$$

где f_j – внешние (активные) силы, действующие на нашу систему. Если ввести независимые обобщённые координаты $q_q,\, \ldots,\, q_k$, то в силу формул (4.4) получим

$$\delta x_j = \sum_{s=1}^{k} \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \delta q_s. \tag{4.6}$$

Отсюда для элементарной работы Ф внешних сил находим следующее выражение:

$$\delta A = \sum_{j=1}^{3N} f_j \delta x_j = \sum_{j=1}^{3N} f_j \sum \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \delta q_s = \sum_{s=1}^{k} \delta q_s \sum_{j=1}^{3N} f_j \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \equiv \sum_{s=1}^{k} Q_s \delta q_s, \tag{4.7}$$

где

$$Q_s = \sum_{j=1}^{3N} f_j \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \quad (s = 1, \ldots, k) \tag{4.8}$$

носят название *обобщённых сил*, соответствующих обобщённым координатам q_s. Понятно, что размерность величин Q_s может не совпадать с размерностью обычной силы.

Аналогично из формулы (4.5) на основании соотношений (4.6) получаем

$$\delta A = \sum_{j=1}^{3N} m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} \delta x_j = \sum_{j=1}^{3N} m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} \sum_{s=1}^{k} \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \delta q_s = \\ = \sum_{s=1}^{k} \delta q_s \sum_{j=1}^{3N} m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \equiv \sum_{s=1}^{k} \tilde{Q}_s \delta q_s, \tag{7$'$}$$

где

$$\tilde{Q}_s = \sum_{j=1}^{3N} m_j \frac{\mathrm{d}^2 x_j}{\mathrm{d}t^2} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial q_s}. \tag{4.9}$$

Пусть

$$\dot{x}_j = \frac{\mathrm{d}x_j}{\mathrm{d}t} \text{ и } \dot{q}_j = \frac{\mathrm{d}q_j}{\mathrm{d}t}.$$

Так как на основании правила дифференцирования сложной функции имеем

$$\dot{x}_j = \frac{\partial x_j}{\partial t} + \sum_{s=1}^{k} \frac{\partial x_j}{\partial q_s} \dot{q}_s,$$

то

$$\frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{q}_s} = \frac{\partial x_j}{\partial q_s}. \tag{4.10}$$

Кроме того, меняя порядок дифференцирования, получаем

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial x_j}{\partial q_s}\right) = \frac{\partial}{\partial q_s}\left(\frac{\mathrm{d}x_j}{\mathrm{d}t}\right) = \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial q_s}. \tag{4.11}$$

Отсюда, применяя соотношения (4.9), (4.10) и (4.11), выводим

$$\tilde{Q}_s = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_{j=1}^{3N} m_j \dot{x}_j \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{q}_s}\right) - \sum_{j=1}^{3N} m_j \dot{x}_j \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial q_s} = \\ = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\partial}{\partial \dot{q}_s}\left(\sum_{j=1}^{3N} \frac{m_j}{2} \dot{x}_j^2\right)\right] - \frac{\partial}{\partial q_s}\left(\sum_{j=1}^{3N} \frac{m_j}{2} \dot{x}_j^2\right). \tag{4.12}$$

Введя *кинетическую энергию системы*

$$T = \sum_{j=1}^{3N} \frac{m_j}{2} \dot{x}_j^2, \tag{4.13}$$

окончательно находим

$$\tilde{Q}_s = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_s} \tag{4.14}$$

$$(s = 1,\, \ldots,\, k)\,.$$

Из формул (4.7) и (7′) в силу независимости приращений δq_s имеем

$$\tilde{Q}_s = Q_s \quad (s = 1,\, \ldots,\, k)\,.$$

Отсюда на основании формулы (4.14) получаем *дифференциальные уравнения Лагранжа* (второго рода)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_s} = Q_s \tag{4.15}$$

$$(s = 1,\, \ldots,\, k)\,,$$

где $T = T(t,\, q,\, \dot{q})$; $q = (q_1,\, \ldots,\, q_k)$; $\dot{q} = (\dot{q}_1,\, \ldots,\, \dot{q}_k)$.

Уравнения Лагранжа (4.15) представляют собой систему k обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с неизвестными функциями

$$q_1 = q_1(t),\, \ldots,\, q_k = q_k(t)$$

– *обобщёнными координатами системы.*

Величины $\dot{q}_s = \dot{q}_s(t)$ $(s = 1,\, \ldots,\, k)$ называются *обобщёнными скоростями* точек системы.

Если q_s являются прямоугольными декартовыми координатами, то, очевидно, уравнения Лагранжа совпадают с дифференциальными уравнениями Ньютона [§(4.1), формула (4.2)].

Важный случай представляет система сил f_j $(j = 1,\, \ldots,\, 3N)$, имеющая *потенциал* (потенциальную энергию) $V = V(x_1,\, \ldots,\, x_{3N})$, где

$$f_j = -\frac{\partial V}{\partial x_j} \quad (j = 1,\, \ldots,\, 3N)\,. \tag{4.16}$$

Выражая декартовы координаты x_j $(j = 1,\, \ldots,\, 3N)$ системы через обобщённые координаты q_s $(s = 1,\, \ldots,\, k)$, получим общее выражение для потенциальной энергии

$$V = V(t,\, q_1,\, \ldots,\, q_k). \tag{4.17}$$

В случае существования потенциала V для обобщённых сил Q_s (4.8) на основании правила дифференцирования сложной функции будем иметь следующие выражение:

$$Q_s = \sum_{j=1}^{3N} f_j \frac{\partial x_j}{\partial q_s} = -\sum_{j=1}^{3N} \frac{\partial V}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial x_j}{\partial q_s} = -\frac{\partial V}{\partial q_s}$$

$$(s = 1, \ldots, k).$$

Следовательно, уравнения Лагранжа (4.15) принимают вид

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_s} = -\frac{\partial V}{\partial q_s}$$

или

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s}\right) - \frac{\partial}{\partial q_s}(T - V) = 0 \tag{4.18}$$

$$(s = 1, \ldots, k).$$

Введём *функцию Лагранжа*

$$L = T - V. \tag{4.19}$$

Учитывая, что V (4.17) не зависит от обобщённых скоростей $\dot{q}_s$, будем иметь

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s}.$$

Отсюда на основании формулы (4.18) получаем *уравнения Лагранжа в потенциальном случае*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_s} = 0 \quad (s = 1, \ldots, k), \tag{4.20}$$

где $L = L(t, q, \dot{q})$ – функция Лагранжа системы.

Пример. Две частицы с массами m_1 и m_2 связаны жёстким невесомым стержнем длины l и движутся в вертикальной плоскости Oxy под действием силы тяжести. Составить уравнение Лагранжа для этой системы [ЭУК48]

В вертикальной плоскости Oxy за ось Ox возьмём горизонтальную прямую, а за ось Oy – вертикальную (рис. 4.1). Пусть декартовы координаты частиц будут $m_1(x_1, y_1)$ и $m_2(x_2, y_2)$. За обобщённые координаты системы примем x и y – координаты центра тяжести системы и φ - угол между вертикалью и прямой, соединяющей центр тяжести с первой частицей (рис. 4.1).

Так как центр тяжести системы двух материальных точек находится на прямой, соединяющей эти точки, и делит расстояние между ними в отношении, обратно пропорциональном их массам, то имеем

$$x_1 = x + \frac{m_2}{M} l \sin\varphi; \quad y_1 = y + \frac{m_2}{M} l \cos\varphi \tag{4.21}$$

и

$$x_2 = x - \frac{m_1}{M} l \sin\varphi; \quad y_2 = y - \frac{m_1}{M} l \cos\varphi, \tag{21'}$$

где

$$M = m_1 + m_2$$

– масса системы.

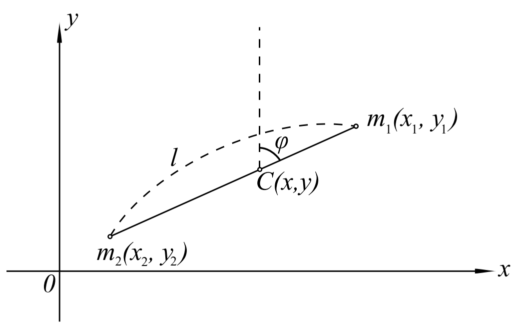

Рис. 4.1:

Кинетическая энергия системы в декартовых координатах есть

$$T = \frac{m_1}{2}\left(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2\right) + \frac{m_2}{2}\left(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2\right).$$

Отсюда на основании формул (4.21) и (21′) после несложных пребоpазований получаем кинетическую энергию в обобщённых координатах

$$T = \frac{M}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right) + \frac{I}{2}\dot{\varphi}^2, \tag{4.22}$$

где

$$I = \frac{m_1 m_2}{M} l^2.$$

Так как единственные внешние силы, действующие на нашу систему, есть силы тяготения, то они обладают потенциалом

$$V = m_1 g y_1 + m_2 g y_2 \equiv M g y. \tag{4.23}$$

Следовательно, функция Лагранжа нашей системы имеет вид

$$L \equiv T - V = \frac{M}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right) + \frac{I}{2}\dot{\varphi}^2 - M g y. \tag{4.24}$$

На основании формулы (4.20) получаем дифференциальные уравнения движения в форме Лагранжа

$$\left.\begin{array}{c} M\frac{\mathrm{d}\dot{x}}{\mathrm{d}t} = 0; \\ M\frac{\mathrm{d}\dot{y}}{\mathrm{d}t} + Mg = 0; \\ I\frac{\mathrm{d}\dot{\varphi}}{\mathrm{d}t} = 0 \end{array}\right\}$$

или

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t} &= 0; \\ \frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t} &= -g; \\ \frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}t} &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{4.25}$$

Из уравнений (4.25) следует, что движение центра тяжести системы совершается с постоянным ускорением, численно равным g, причём угловая скорость системы постоянна.

4.3 Уравнения Гамильтона

Пусть

$$L = L(t,\, q,\, \dot{q}) \tag{4.26}$$

есть функция Лагранжа системы [§4.2, формула (4.19)]. Величины

$$p_s = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} \quad (s = 1,\, \ldots,\, k) \tag{4.27}$$

называются *обобщёнными импульсами*, соответствующими обобщённым координатам q_s. Введём *функцию Гамильтона (гамильтониан системы)*

$$H(t,\, q,\, p) = \sum_{s=1}^{k} p_s \dot{q}_s - L, \tag{4.28}$$

где L выражена как функция переменных t, q и p. С помощью величин p_s уравнения Лагранжа можно записать в следующем виде [§4.2, формула (4.20)]:

$$\frac{\mathrm{d}p_s}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial L}{\partial q_s} \qquad (s = 1,\, \ldots,\, k)\,. \tag{4.29}$$

Рассмотрим полный дифференциал функции Лагранжа

$$\mathrm{d}L = \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t + \sum_{s=1}^{k}\left(\frac{\partial L}{\partial q_s}\mathrm{d}q_s + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}\mathrm{d}\dot{q}_s\right).$$

Отсюда на основании формул (4.27) и (4.29) получаем

$$\mathrm{d}L = \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t + \sum_{s=1}^{k}\left(\dot{p}_s\mathrm{d}q_s + p_s\mathrm{d}\dot{q}_s\right). \tag{4.30}$$

Далее, беря полный дифференциал от функции Гамильтона (4.28), находим

$$\mathrm{d}H = \sum_{s=1}^{k} (\dot{q}_s \mathrm{d}p_s + p_s \mathrm{d}\dot{q}_s) - \mathrm{d}L = \sum_{s=1}^{k} (\dot{q}_s \mathrm{d}p_s + p_s \mathrm{d}\dot{q}_s) - \\ - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t - \sum_{s=1}^{k} (\dot{p}_s \mathrm{d}q_s + p_s \mathrm{d}\dot{q}_s) = -\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t + \\ + \sum_{s=1}^{k} (-\dot{p}_s \mathrm{d}q_s + \dot{q}_s \mathrm{d}p_s). \quad (4.31)$$

С другой стороны, в силу известной формулы математического анализа имеем

$$\mathrm{d}H = \frac{\partial H}{\partial t}\mathrm{d}t + \sum_{s=1}^{k} \left(\frac{\partial H}{\partial q_s}\mathrm{d}q_s + \frac{\partial H}{\partial p_s}\mathrm{d}p_s \right). \quad (4.32)$$

В силу единственности формы дифференциала уравнения (4.31) и (4.32) должны быть тождественными. Отсюда, приравнивая друг другу коэффициенты при $\mathrm{d}p_s$ и $\mathrm{d}q_s$, в выражениях (4.31) и (4.32) получим *каноническую систему дифференциальных уравнений Гамильтона* [Ган02; ЭУК48]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\mathrm{d}q_s}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial H}{\partial p_s}; \\ \frac{\mathrm{d}p_s}{\mathrm{d}t} &= -\frac{\partial H}{\partial q_s} \end{aligned} \right\} \quad (4.33)$$

($s = 1, \ldots, k$), где q_s и p_s называются *сопряжёнными переменными*. Кроме того, сравнение коэффициентов при $\mathrm{d}t$ в выражениях (4.31) и (4.32) даёт

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (4.34)$$

Пусть система *консервативна*: т. е. 1) связи стационарны (не зависят от времени t) и 2) потенциальная функция $V = V(q)$ также не зависит от времени t. Тогда

$$\dot{x}_j = \sum_{s=1}^{k} \frac{\partial x_j}{\partial q_s}\dot{q}_s,$$

и следовательно, кинетическая энергия T представляет собой квадратичную форму от обобщённых скоростей $\dot{q}_s$, т. е.

$$T = \sum_{s,\,r=1}^{k} a_{sr}(q)\dot{q}_s\dot{q}_r, \quad (4.35)$$

где коэффициенты $a_{sr}(q)$ есть функция только обобщённых координат $q_1, \ldots, q_k$, причём для удобства записи положено

$$a_{sr}(q) = a_{rs}(q).$$

Так как

$$L = T - V$$

и V не зависит от $\dot{q}_s$, то имеем

$$p_s = \frac{\partial L}{\partial q_s} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s} = 2\sum_{r=1}^{k} a_{sr}(q)\dot{q}_r.$$

Отсюда, используя теорему Эйлера об однородных функциях, получаем

$$\sum_{s=1}^{k} p_s\dot{q}_s = \sum_{s=1}^{k} \dot{q}_s\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s} = 2T$$

и, следовательно, на основании формулы (4.28) имеем

$$H = \sum_{s=1}^{k} p_s\dot{q}_s - L = 2T - (T - V) = T + V.$$

Таким образом, для *консервативной системы функция Гамильтона H представляет собой полную энергию системы* (сумму кинетической и потенциальной энергий). В общем случае по аналогии функцию H называют «*обобщённой полной энергией*».

Заметим, что если система консервативна, то из формулы (4.34) получаем

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0,$$

т. е.

$$H = H(q,\, p).$$

В этом случае на основании уравнений (4.33) имеем

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \sum_{s=1}^{k}\left(\frac{\partial H}{\partial q_s}\cdot\frac{\mathrm{d}q_s}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial H}{\partial p_s}\cdot\frac{\mathrm{d}p_s}{\mathrm{d}t}\right) = \sum_{s=1}^{k}\left(\frac{\partial H}{\partial q_s}\cdot\frac{\partial H}{\partial p_s} - \frac{\partial H}{\partial p_s}\cdot\frac{\partial H}{\partial q_s}\right) \equiv 0.$$

Отсюда

$$H(q,\, p) = h = \mathrm{const} \tag{4.36}$$

(*интеграл энергии*).

Таким образом, *при движении консервативной системы её полная энергия H остаётся постоянной.*

Пример. Найти функцию Гамильтона для свободной частицы $m(x,\,y,\,z)$ с массой m, движущейся в потенциальном поле.

Кинетическая энергия частицы

$$T = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right);$$

её потенциальная энергия есть

$$V = V(x,\,y,\,z).$$

Поэтому для функции Лагранжа получаем выражение

$$L = T - V = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) - V(x,\,y,\,z).$$

Отсюда находим соответствующие импульсы:

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x};$$

$$p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y};$$

$$p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z}.$$

Таким образом, кинетическая энергия в канонических переменных имеет вид

$$T = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right). \tag{4.37}$$

Так как система консервативная, то её функция Гамильтона есть полная энергия

$$H = T + V = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V(x,\,y,\,z).$$

На основании уравнений Гамильтона (4.33) состояние системы с k степенями свободы в классической механике описывается $2k$ каноническими переменными $q_1,\,\ldots,\,q_k$ – обобщёнными координатами и $p_1,\,\ldots,\,p_k$ – соответствующими сопряжёнными обобщёнными импульсами. Таким образом, состояние системы может быть изображено точкой $(q_1,\,\ldots,\,q_k,\,p_1,\,\ldots,\,p_k)$ *фазового пространства* системы R измерения $2k$. При этом каждая механическая величина, связанная с данной системой (скорость точки, момент действующей силы, энергия системы и т. д.), будучи некоторой однозначной функцией $F(q_1,\,\ldots,\,q_k,\,p_1,\,\ldots,\,p_k)$ канонических переменных q_s, p_s, в любом состоянии системы получает строго определённое значение.

4.4 Основные постулаты квантовой механики

Основы квантовой механики могут быть сформулированы в виде некоторых постулатов (допущений), которые подобно аксиомам геометрии не доказываются. Экспериментальная проверка выводов теории позволяет судить об области применимости квантовой механики, этот вопрос здесь не рассматривается. В дальнейшем исследуются лишь механические системы с конечным числом степеней свободы в нерелятивистской трактовке.

Рассмотрим систему частиц с k степенями свободы. Согласно классической механике эта система в любой данный момент времени t может быть описана значениями её канонических обобщённых координат $q_1, \ldots, q_k$ и сопряжённых им импульсов $p_1, \ldots, p_k$.

Действительное пространство $\Omega = (q_1, \ldots, q_k)$ всех возможных значений обобщённых координат называется *конфигурационным пространством* данной системы.

Приведём постулаты, характеризующие состояние этой механической системы в квантовой механике [Шпо84; ЭУК48].

Постулат I. Любое состояние механической системы полностью описывается некоторой комплексно-значной *волновой функцией* $\Psi(q_1, \ldots, q_k, t)$, где $-\infty < t < +\infty$ и $(q_1, \ldots, q_k) \in \Omega$, называемое *функцией состояния системы.*

Для механической системы в каждый момент времени t известен закон распределения её координат $q = (q_1, \ldots, q_k)$, причём для данного момента времени t квадрат модуля нормированной волновой функции

$$|\Psi(q, t)|^2 = \Psi^*(q, t)\Psi(q, t)$$

представляет собой *плотность вероятности* этого распределения. Иными словами, если $\mathrm{d}\Omega$ есть бесконечно малый объём конфигурационного пространства Ω, то вероятность того, что в момент времени t система имеет совокупность координат $q = (q_1, \ldots, q_k)$, принадлежащих этому объёму, выражается формулой

$$P(q \in \mathrm{d}\Omega) = |\Psi(q, t)|^2 \,\mathrm{d}\Omega.$$

Отсюда следует, что вероятность того, что значения переменных $q_1, \ldots, q_k$ в момент времени t принадлежит некоторой области $\omega \subset \Omega$, есть

$$P(q \in \omega) = \int\!\!\cdots\!\!\int_{\omega} |\Psi(q, t)|^2 \,\mathrm{d}\Omega. \tag{4.38}$$

Для одной частицы формула (4.38) даёт вероятность обнаружения этой частицы в момент времени t в области ω.

Так как конфигурационное пространство Ω представляет собой совокупность всех возможных значений комплексов координат $q = (q_1, \ldots, q_k)$, то вероятность того, что $q \in \Omega$, есть событие достоверное и, следовательно,

$$P(q \in \Omega) = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} |\Psi(q,\, t)|^2 \, \mathrm{d}\Omega = 1. \tag{4.39}$$

Отсюда, учитывая, что реальная величина не может иметь бесконечно больших значений, получаем

$$\Psi(\infty,\, t) = \lim_{\|q\| \to \infty} \Psi(q,\, t) = 0,$$

если этот предел существует.

Волновые функции $\Psi(q,\, t)$, соответствующие в данный момент времени t всевозможным системам и всевозможным состояниям этих систем, образуют *функциональное пространство* $\tilde{H} = \{\Psi(q,\, t)\}$ квантовой механики.

Постулируется, что $\tilde{H}$ есть комплексное пространство Гильберта (гл. 3, §3.3), где скалярное произведение функций $\Psi_1(q,\, t)$, $\Psi_2(q,\, t) \in \Omega$ определяется формулой

$$(\Psi_1,\, \Psi_2) = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} \Psi_1(q,\, t)\Psi_2^*(q,\, t) \mathrm{d}\Omega. \tag{4.40}$$

Из формулы (4.38) вытекает, что норма каждой волновой функции $\Psi(q,\, t)$ конечна и равна единице. Следовательно, ни для какого момента времени t волновая функция $\Psi(q,\, t)$ не может быть тождественно равной нулю во всём пространстве.

Кроме того, предполагается, что волновые функции $\Psi = \Psi(q,\, t)$ удовлетворяет дополнительным требованиям *стандартности* [Бло04; Шпо84]:

1. функция Ψ при любом $t \in (-\infty,\, +\infty)$ конечна во всём пространстве Ω за исключением, быть может, конечного числа особых точек, где функция Ψ обращаются в бесконечность не слишком высокого порядка (в окрестности этих точек интеграл от квадрата модуля волновой функции должен сходиться);

2. вне особых точек функция Ψ однозначны и непрерывны; следовательно, в случае отсутствия конечных и бесконечно удалённых особых точек функции Ψ ограничены во всём пространстве Ω.

Замечание. Для некоторых задач квантовой механики приходится вводить ненормированные волновые функции $\Psi(q,\, t)$, квадрат модуля которых представляет собой некоторую известную функцию от плотности вероятности закона распределения координат системы. Для таких функций условие нормировки (4.38) может быть не выполнено. Кроме того, требования стандартности иногда являются чересчур узкими. Соответствующие обобщения теории в нашем курсе мы рассматривать не будем.

Отметим одно важное обстоятельство. Физический смысл имеет не сама волновая функция $\Psi(q,\,t)$, а её модуль $|\Psi(q,\,t)|$. Поэтому волновые функции

$$\Psi(q,\,t) \text{ и } \Psi_1(q,\,t) = \Psi(q,\,t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},$$

отличающиеся лишь фазовым множителем $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$ ($\varphi = \varphi(q,\,t)$ – действительно) и, следовательно, имеющие равные модули

$$|\Psi_1(q,\,t)| = |\Psi(q,\,t)|$$

описывают одно и то же состояние системы.

Постулат II. Каждой динамической переменной a (координате частицы, скорости её, действующей силе и т. п., а также их функциям, имеющим механическое значение) ставится в соответствие некоторый линейный эрмитов оператор $\hat{A}$ (гл. 3, §3.7)

$$\left(\hat{A}\Psi_1,\,\Psi_2\right) = \left(\Psi_1,\,\hat{A}\Psi_2\right),$$

определённый на множестве волновых функций Ψ, причём тождественным соотношением между динамическими переменными соответствуют аналогичные тождественные соотношения между их операторами.

Правила для построения основных операторов квантовой механики (*словарь квантовой механики*) следующие [Шпо84; ЭУК48]:

1. Если a есть одна из координат q_s ($s = 1,\,\ldots,\,k$) или время t, то соответствующий оператор $\hat{A}$ есть *оператор умножения* $\hat{A}_s = q_s$ или $\hat{A}_t = t$, т. е.

$$\hat{A}_s\Psi = q_s\Psi$$

и

$$\hat{A}_t\Psi = t\Psi.$$

Оператор умножения, как известно, эрмитов (гл. 3, §3.12).

2. Если a есть один из импульсов p_s, то соответствующий оператор $\hat{A}$ имеет вид

$$\hat{A} = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial q_s}, \tag{4.41}$$

где h – постоянная Планка и q_s – сопряжённая с p_s координата.

Оператор $\hat{A}$ эрмитов (гл. 3, §3.7, пример 3.7.1).

3. Если $a = f(t,\, q,\, p)$ есть целая рациональная функция времени t, координат q и сопряжённых им импульсов p, то её оператор есть операторная функция

$$\hat{A} = \hat{f}\left(t,\, q,\, \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial q}\right),$$

где действия обычной алгебры заменены соответствующими действиями операторной алгебры (гл. 3, §3.6). В случае неоднозначности порядка сомножителей избирается тот порядок их, при котором оператор $\hat{A}$ эрмитов.

Пример 4.4.1. Для кинетической энергии T частицы массы m построить её эрмитов оператор $\hat{T}$.

Положение частицы в пространстве будем определять её декартовыми координатами $x,\, y,\, z$. Тогда кинетическая энергия частицы [§4.3, формула (4.37)]

$$T = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right), \tag{4.42}$$

где

$$p_x = m\dot{x}; \quad p_y = m\dot{y}; \quad p_z = m\dot{z} \tag{4.43}$$

– импульсы частицы. Оператор для квадрата импульса p_x^2 имеет вид

$$\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x}\right) = -\frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2};$$

аналогично

$$\hat{p}_y^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial y^2} \text{ и } \hat{p}_z^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Отсюда на основании формулы (4.42) получаем

$$\hat{T} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

или

$$\hat{T} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2, \tag{4.44}$$

где ∇ – оператор набла, определяемый формулой

$$\nabla = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}.$$

Как известно, оператор Лапласа $\Delta = \nabla^2$ эрмитов (гл. 3, §3.7, пример 3.7.2), поэтому $\hat{T}$ есть также эрмитов оператор.

Так как оператор Лапласа ∇^2 инвариантен относительно выбора координат, то оператор $\hat{T}$ имеет то же самое выражение (4.44) в любой криволинейной системе координат q_1, q_2, q_3. Например, для сферической системы координат r, θ, φ будем иметь (гл. 1, §1.11)

$$\hat{T} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left[\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

Пример 4.4.2. Найти операторы $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$, $\hat{M}_z$ для проекций M_x, M_y, M_z момента количества движения (*момента импульса*) $\vec{M}$ частицы $m(x, y, z)$ относительно начала координат.

Из механики известно, что момент количества движения частицы относительно начала координат есть

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p},$$

где $\vec{r}$ – радиус-вектор частицы и $\vec{p}$ – её импульс (рис. 4.2).

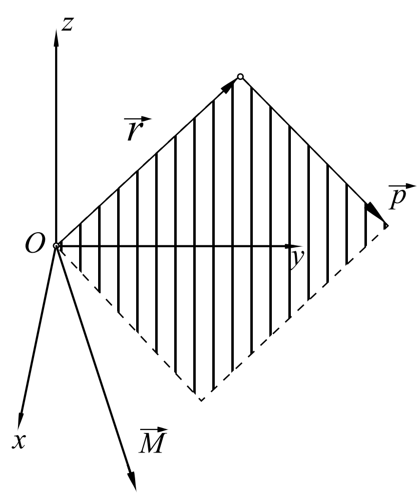

Рис. 4.2:

Так как

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

и

$$\vec{p} = p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k},$$

то по известной формуле векторной алгебры имеем

$$\vec{M} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}.$$

Отсюда

$$\left.\begin{aligned} M_x &= yp_z - zp_y; \\ M_y &= zp_x - xp_z; \\ M_z &= xp_y - yp_x. \end{aligned}\right\} \qquad (4.45)$$

На основании правила 3 получаем операторы проекций момента количества движения частицы

$$\left.\begin{aligned} \hat{M}_x &= \tfrac{h}{2\pi i}\left(y\tfrac{\partial}{\partial z} - z\tfrac{\partial}{\partial y}\right); \\ \hat{M}_y &= \tfrac{h}{2\pi i}\left(z\tfrac{\partial}{\partial x} - x\tfrac{\partial}{\partial z}\right); \\ \hat{M}_z &= \tfrac{h}{2\pi i}\left(x\tfrac{\partial}{\partial y} - y\tfrac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned}\right\} \qquad (4.46)$$

Предлагаем читателю проверить, что эти операторы эрмитовы.

В приложениях важное значение имеет *квадрат модуля момента количества движения*

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2;$$

его оператор есть

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 = \\ = -\frac{h^2}{4\pi^2}\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right].$$

Пусть

$$H = H(q,\, p,\, t)$$

– функция Гамильтона системы (§4.3), где

$$q = (q_1,\, \ldots,\, q_k) \text{ и } p = (p_1,\, \ldots,\, p_k)\,.$$

Если система консервативна, то H представляет собой полную энергию системы (§4.3). Для динамической переменной H можно построить её оператор

$$\hat{H} = \hat{H}\left(q,\, \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial q},\, t\right), \tag{4.47}$$

носящий название *оператора Гамильтона* (*оператор энергии*).

Постулат III. Функция состояния системы $\Psi(q,\, t)$ удовлетворяет *уравнению Шрёдингера, содержащему время*:

$$\hat{H}\left(q,\, \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial q},\, t\right)\Psi(q,\, t) = -\frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial t}\Psi(q,\, t). \tag{4.48}$$

Для случая одной свободной частицы массы m, движущейся в потенциальном поле с потенциалом $V(x,\, y,\, z)$, её оператор Гамильтона есть (см. пример 4.4.1)

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V. \tag{4.49}$$

Отсюда уравнение Шрёдингера, содержащее время, для частицы будет иметь вид

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V\right)\Psi = -\frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

или

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) - V(x,\, y,\, z)\Psi = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial t},$$

где
$$\Psi = \Psi(x,\, y,\, z,\, t).$$

Прежде чем формулировать очередной постулат, введём общепринятую терминологию.

Пусть a – динамическая переменная и $\hat{A}$ – её эрмитов оператор.

Назовём *собственным состоянием* переменной a её состояние, соответствующее волновой функции Ψ, являющейся собственной функцией оператора $\hat{A}$, т. е. такой, что
$$\hat{A}\Psi = \alpha\Psi, \tag{4.50}$$
где α –некоторая вещественная постоянная (*собственное значение* оператора $\hat{A}$).

Постулат IV. Динамическая переменная a имеет строго определённое постоянное значение a_Ψ лишь в своём собственном состоянии, причём это значение совпадает с собственным значением α оператора $\hat{A}$, соответствующим волновой функции Ψ данного состояния, т. е.
$$a_\Psi = \alpha. \tag{4.51}$$

Во всех прочих состояниях динамическая переменная не имеет определённых значений.

Таким образом, все возможные достоверные значения динамической переменной a принадлежат спектру её эрмитова оператора $\hat{A}$. В силу действительности собственных значений эрмитова оператора (гл. 3, §3.8, теорема 3.8.1) *все значения динамической переменной вещественны.*

Если спектр оператора $\hat{A}$ дискретен и состоит из чисел
$$\alpha_1,\, \alpha_2,\, \ldots,\, \alpha_n,\, \ldots, \tag{4.52}$$
то соответствующая динамическая переменная a может принимать лишь счётное множество значений (4.52); в этом случае, как говорят, происходит *квантование* величины a.

Каждое собственное значение α_n при этом реализуется в стольких собственных состояниях
$$\Psi_n^{(1)},\, \Psi_n^{(2)},\, \ldots,\, \Psi_n^{(n)},$$
какова степень вырождения данного значения.

Положение вещей здесь резко отличается от классической механики, где на возможные значения динамических переменных не накладывается, вообще говоря, никаких ограничений.

4.5 Волновые функции стационарного состояния системы

Пусть полная энергия консервативной системы (собственное значение её оператора Гамильтона $\hat{H}$) равна E. Тогда состояние этой системы характеризуется $\Psi(q,\,t)$, удовлетворяющей уравнению:

$$\hat{H}\left(q,\,\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial q},\,t\right)\Psi(q,\,t)=E\Psi(q,\,t). \tag{4.53}$$

С другой стороны, на основании постулата III (§4.4) волновая функция $\Psi(q,\,t)$ должна удовлетворять уравнению Шрёдингера, содержащему время:

$$\hat{H}\left(q,\,\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial q},\,t\right)\Psi(q,\,t)=-\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial\Psi(q,\,t)}{\partial t}. \tag{4.54}$$

Из уравнений (4.53) и (4.54) получаем

$$-\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial\Psi(q,\,t)}{\partial t}=E\Psi(q,\,t)$$

отсюда

$$\Psi(q,\,t)=\psi(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}Et}, \tag{4.55}$$

где

$$\psi(q)=\Psi(q,\,0).$$

Состояние, определяемое волновой функцией (4.55), называется *стационарным* (подробнее см. работы [Бло04; Шпо84]).

Волновая функция стационарного состояния распадается на два множителя, из которых первый $\psi(q)$ (*амплитуда*) зависит только от координат, а второй (*фазовый множитель*) с модулем, равным единице, зависит только от времени t. Подставляя выражение (4.55) в уравнение (4.53) и учитывая линейность оператора $\hat{H}$, получим уравнение Шрёдингера, не содержащее время для системы с энергетическим уровнем E (*уравнение Шрёдингера для стационарного состояния*)

$$\hat{H}\left(q,\,\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial q},\,t\right)\psi(q)=E\psi(q). \tag{4.56}$$

Отсюда видно, что $\psi(\text{й})$ есть собственная функция гамильтониана $\hat{H}$.

В частности, для частицы массы m в потенциальном поле с потенциалом $V(x,\,y,\,z)$, учитывая, что (§4.4)

$$\hat{H}=-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2+V,$$

получим *уравнение Шрёдингера для стационарного состояния* в следующем виде:

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V\right)\psi(q) = E\psi(q)$$

или

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left[E - V(x, y, z)\right]\psi = 0, \tag{4.57}$$

где E – полная энергия частицы.

Из формулы (4.55) вытекает

$$|\Psi(q, t)| = |\psi(q)|.$$

Поэтому (см. §4.4), если система обладает определённой полной энергией E, то плотность вероятности распределения координат этой системы не зависит от времени t и равна $|\psi(q)|^2$, т. е. для любого момента времени t имеем

$$P(q \in \omega) = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\omega} |\psi(q)|^2 \, \mathrm{d}\Omega \tag{4.58}$$

и, в частности,

$$P(q \in \Omega) = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} |\psi(q)|^2 \, \mathrm{d}\Omega = 1.$$

Таким образом, функции $\psi(q) = \Psi(q, 0)$ являются *волновыми функциями для стационарного состояния системы.*

4.6 Принцип суперпозиции

Пусть a – исследуемая динамическая переменная;

$$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n, \ldots \tag{4.59}$$

– её возможные значения и

$$\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n, \ldots \tag{4.60}$$

– соответствующая система собственных волновых функций (волновых функций собственных состояний), причём каждое собственное значение α_n повторяется столько раз, какова его степень вырождения. Будем предполагать, что система волновых функций (4.55) – ПОЛНАЯ. Так как пространство волновых функций линейное, то любая волновая функция $\Psi = \Psi(q, t)$, описывающая состояние системы (поведение одной или нескольких частиц), может быть представлена в виде *суперпозиции* основных волновых функций

Ψ_n $(n = 1,\, 2,\, \ldots)$, т. е.

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n, \tag{4.61}$$

где $C_n = C_n(t)$ $(m = 1,\, 2,\, \ldots)$ – коэффициенты Фурье функции Ψ относительно системы $\{\Psi_n\}$ (*амплитуды собственных состояний* Ψ_n *для состояния* Ψ). Так как Ψ_n – нормированные функции эрмитова оператора, то их можно считать ортонормированными (гл. 3, §3.8, теорема 3.8.2 и замечание к ней), т. е.

$$(\Psi_m,\, \Psi_n) = \delta_{mn}, \tag{4.62}$$

где δ_{mn} – символ Кронекера. Отсюда для коэффициентов Фурье (гл. 3, §3.5) получаем следующие выражения:

$$C_n = (\Psi,\, \Psi_n) \quad (n = 1,\, 2,\, \ldots). \tag{4.63}$$

Из формулы (4.61) выводим

$$(\Psi,\, \Psi) = \left(\sum_{m=1}^{\infty} C_m \Psi_m,\, \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n \right) =$$

$$= \sum_{m,\, n=1}^{\infty} C_m C_n^* \, (\Psi_m,\, \Psi_n) = \sum_{m,\, n=1}^{\infty} C_m C_n^* \delta_{mn} =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} C_n C_n^* = \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 . \tag{4.64}$$

Следовательно, волновая функция Ψ будет нормированной тогда и только тогда, когда выполнено условие

$$\sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1. \tag{4.65}$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что все волновые функции нормированы, если явно не оговорено противное.

Постулат V. Вероятность P того, что в состоянии, описываемом нормированной волновой функцией Ψ, динамическая переменная a имеет значение α_n равна квадрату модуля соответствующего коэффициента Фурье (иначе, квадрату модуля амплитуды собственного состояния Ψ_n), т. е.

$$P(a_\Psi = \alpha_n) = |C_n|^2 \quad (n = 1,\, 2,\, \ldots). \tag{4.66}$$

В частности, если волновая функция $\Psi = \Psi_n$ соответствует собственному состоянию динамической переменной a, то в силу формулы (4.63) имеем

$$C_n = (\Psi_n,\, \Psi_n) = 1$$

и, следовательно,

$$P(a_\Psi = \alpha_n) = 1,$$

т. е. *динамическая переменная в собственном состоянии с вероятностью, равной единице, принимает соответствующее собственное значение* (§4.4, постулат IV).

Пусть система консервативна и имеет энергетический уровень E. Тогда (см. §4.5) волновые функции можно представить в виде (*стационарные состояния*):

$$\Psi_n(q,\, t) = \psi_n(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}Et} \quad (n = 1,\, 2,\, \dots)$$

и

$$\Psi(q,\, t) = \psi(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}Et}.$$

Напишем ряд Фурье

$$\psi(q) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(q),$$

где

$$c_n = (\psi(q),\, \psi_n(q)) \quad (n = 1,\, 2,\, \dots)\,.$$

С другой стороны, ряд Фурье (4.61) после сокращения на общий множитель $\exp\left(-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}Et\right)$ принимает вид

$$\psi(q) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n\psi_n(q),$$

причём на основании формулы (4.63) имеем

$$C_n = \left(\psi(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}Et},\, \psi_n(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}Et}\right) = (\psi(q),\, \psi_n(q)) = c_n \tag{4.67}$$

$$(n = 1,\, 2,\, \dots)\,.$$

Отсюда

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1, \tag{4.68}$$

и в силу постулата V для любого момента времени t получаем

$$P(a_\Psi = \alpha_n) = |c_n|^2\,. \tag{4.69}$$

Имеем важный вывод: *в стационарном состоянии системы распределение вероятностей значений любой динамической переменной не зависит от времени.*

Таким образом, в несобственном состоянии Ψ динамическая переменная не имеет определённого значения; здесь имеет смысл говорить о НАИВЕРОЯТНОСТНОМ ЗНАЧЕНИИ α_k переменной, т. е. таком, что

$$|c_k|^2 = \max\,.$$

4.7 Среднее значение динамической переменной

Определение. Под средним значением $\overline{a_\Psi}$ динамической переменной a в состоянии $\Psi = \Psi(q,\, t)$[1] понимается математическое ожидание её значений в этом состоянии, т. е.

$$\overline{a_\Psi} = \text{М.О.}\, \alpha, \tag{4.70}$$

где α – все возможные значения переменной a.

Если собственные значения переменной a имеют дискретный спектр

$$\alpha_1,\, \alpha_2,\, \ldots,\, \alpha_n,\, \ldots,$$

то на основании постулата V (§4.6) имеем $P(a_\Psi = \alpha_n) = |C_n|^2$, где C_n – коэффициент Фурье функции Ψ относительно нормированных волновых функций Ψ_n $(n = 1,\, 2,\, \ldots)$ для собственных состояний динамической переменной a. Отсюда на основании определения математического ожидания получаем

$$\overline{a_\Psi} = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n P(a_\Psi = \alpha_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \left| C_n \right|^2, \tag{4.71}$$

причём

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n, \quad \text{где } (\Psi_m,\, \Psi_n) = \delta_{mn}.$$

С другой стороны, если $\hat{A}$ – эрмитов оператор динамической переменной a, то

$$\hat{A}\Psi_n = \alpha_n \Psi_n \quad (n = 1,\, 2,\, \ldots)$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned}\left(\hat{A}\Psi,\, \Psi\right) &= \left(\hat{A}\sum_{m=1}^{\infty} C_m \Psi_m,\, \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n\right) = \\ &= \left(\sum_{m=1}^{\infty} C_m \alpha_m \Psi_m,\, \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Psi_n\right) = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_m C_m C_n^* \left(\Psi_m,\, \Psi_n\right) = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_m C_m C_n^* \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \left| C_n \right|^2. \end{aligned} \tag{4.72}$$

Сравнивая выражения (4.71) и (4.72), будем иметь

$$\overline{a_\Psi} = \left(\hat{A}\Psi,\, \Psi\right) = \int\limits_{\Omega}\!\cdots\!\int \Psi^* \hat{A}\Psi \mathrm{d}\Omega, \tag{4.73}$$

[1]Т. е. в состоянии, характеризуемом волновой функцией Ψ.

где предполагается $\|\Psi\| = \left\{ \int\!\cdots\!\int_{\Omega} |\Psi|^2 \,\mathrm{d}\Omega \right\}^{\frac{1}{2}} = 1$.

Выражения (4.73) даёт СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ динамической переменной a в нормированном состоянии Ψ, в общем случае.

Пусть $\Psi = \Psi_n$ есть собственное состояние динамической переменной a. Тогда, очевидно,

$$C_m = 0 \text{ при } m \neq n \text{ и } C_n = 1$$

и, значит,

$$\overline{a_\Psi} = 1\alpha_n = \alpha_n,$$

т. е. *в собственном состоянии среднее значение динамической переменной совпадает с соответствующим собственным значением её оператора.*

Практически среднее значение $\overline{a_\Psi}$ динамической переменной a приближённо можно получить, производя большое количество измерений этой величины, в данном состоянии Ψ, и осредняя результаты полученных измерений.

Пример. Найти среднее значение квадрата импульса p_x частицы в состоянии $\Psi_{(x,\,y,\,z)}$

Так как оператор квадрата импульса p_x равен $\hat{A} = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$, то оператор квадрата импульса p_x^2 есть $\hat{A}^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Следовательно, по формуле (4.73) получаем

$$\overline{p_x^2} = -\frac{h^2}{4\pi^2} \iiint\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, y,\, z) \frac{\partial^2 \Psi(x,\, y,\, z)}{\partial x^2} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z.$$

Аналогично, для стационарного состояния, характеризуемого волновой функцией $\Psi(q,\, 0) = \psi(q)$, для любого момента времени t имеем:

$$\overline{a_\Psi} = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} \psi^* \hat{A} \psi \,\mathrm{d}\Omega.$$

Для приложений важное значение имеет *среднее квадратичное отклонение*

$$\overline{(\Delta a_\Psi)} = \overline{(a - \overline{a_\Psi})^2} \tag{4.74}$$

динамической переменной a от её среднего значения $\overline{a_\Psi}$. Ему соответствует оператор

$$\left(\Delta\hat{A}\right)^2 = \left(\hat{A} - \overline{a_\Psi}\hat{1}\right)^2.$$

На основании формулы (4.73) имеем

$$\overline{(\Delta a_\Psi)^2} = \left(\left(\Delta\hat{A}\right)^2 \Psi,\, \Psi \right) = \int\!\!\cdots\!\!\int\limits_{\Omega} \Psi^* \left(\Delta\hat{A}\right)^2 \Psi \,\mathrm{d}\Omega.$$

Так как оператор $\hat{A}$ эрмитов и $\overline{a_\Psi}$ – число, то операторы $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \overline{a_\Psi}\hat{1}$ и

$$\left(\Delta\hat{A}\right)^2 = \Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{A}$$

также эрмитовы (гл. 3, §3.7). Поэтому

$$\left[\left(\Delta\hat{A}\right)^2 \Psi,\, \Psi\right] = \left(\Delta\hat{A}\Psi,\, \Delta\hat{A}\Psi\right) = \left\|\Delta\hat{A}\Psi\right\|^2.$$

Следовательно,

$$\overline{(\Delta a_\Psi)^2} = \int\!\!\cdots\!\!\int_\Omega \left|\Delta\hat{A}\Psi\right|^2 \mathrm{d}\Omega \geqslant 0. \tag{4.75}$$

Таким образом, *среднее квадратичное отклонение динамической переменной в любом состоянии* Ψ *неотрицательно.*

Посмотрим, в каком случае среднее квадратичное отклонение равно нулю:

$$\overline{(\Delta a_\Psi)^2} = 0.$$

Из формулы (4.75), учитывая, что подынтегральная функция непрерывна и неотрицательна, имеем

$$\left|\Delta\hat{A}\Psi\right| = 0$$

или $\Delta\hat{A}\Psi = \left(\hat{A} - \overline{a_\Psi}\hat{1}\right)\Psi = 0$[2]. Отсюда получаем,

$$\hat{A}\Psi = \overline{a_\Psi}\Psi. \tag{4.76}$$

Таким образом, *среднее квадратичное отклонение динамической переменной равно нулю лишь для соответствующих собственных состояний этой переменной.*

4.8 Общие собственные состояния двух динамических переменных

Теорема. *Если две динамические переменные* a *и* b *имеют общее собственное состояние* Ψ, *то их эрмитовы операторы* $\hat{A}$ *и* $\hat{B}$ *коммутируют для этого состояния, т. е.*

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi. \tag{4.77}$$

[2]Точнее говоря, $\Delta\hat{A}\Psi$ является нулевой функцией пространства H (гл. 3, §3.3)

Обратно, если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют для всех собственных функций одного из них, соответствующих одному и тому же собственному значению, то эти операторы имеют общие собственные функции и, следовательно, их динамические переменные a и b обладают общим собственным состоянием.

Доказательство. 1°. Пусть Ψ есть общая собственная функция операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, т. е.

$$\hat{A}\Psi = \alpha\Psi \text{ и } \hat{B}\Psi = \beta\Psi,$$

где α и β – соответствующие собственные значения.

Отсюда

$$\hat{B}\left(\hat{A}\Psi\right) = \alpha\left(\hat{B}\Psi\right) = \alpha\beta\Psi$$

и

$$\hat{A}\left(\hat{B}\Psi\right) = \beta\left(\hat{A}\Psi\right) = \beta\alpha\Psi.$$

Следовательно,

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi.$$

2°. Пусть Ψ_a – любая собственная функция оператора A, соответствующая собственному значению α, т. е.

$$\hat{A}\Psi_a = \alpha\Psi_a, \tag{4.78}$$

и пусть операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют для всех функций Ψ_a.

Из формулы (4.78) получаем

$$\hat{B}\hat{A}\Psi_a = \alpha\hat{B}\Psi_a$$

или

$$\hat{A}\left(\hat{B}\Psi_a\right) = \alpha\left(\hat{B}\Psi_a\right). \tag{4.79}$$

Если α – простое собственное значение оператора $\hat{A}$, то из формулы (4.79) выводим

$$\hat{B}\Psi_a = \beta\Psi_a,$$

где β – некоторый числовой множитель, и таким образом, $\Psi = \Psi_a$ есть общая собственная функция операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Если же α – вырожденное собственное значение, то на основании свойства коммутирующих эрмитовых операторов (гл. 3, §3.11, теорема 3.11.1 и следствие) существует общая собственная функция операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в виде линейной комбинации

$$\Psi = \sum_{j=1}^{r} c_j \Psi_a^{(j)},$$

где c_j – постоянные; $\Psi_a^{(1)}, \ldots, \Psi_a^{(r)}$ – линейно независимые собственные функции оператора $\hat{A}$, соответствующие данному собственному значению α и r – степень вырождения вырождения этого собственного значения.

Теорема доказана $\square$

Используя принцип IV (§4.4), получаем важный результат [Бло04; Шпо84]: *две механические величины могут быть точно измерены в состоянии* Ψ *лишь тогда, когда их операторы коммутируют для этого состояния.*

4.9 Правило Гейзенберга

Рассмотрим каноническую координату q и сопряжённый с ней импульс p. Согласно постулату II (§4.4) отвечающие им операторы есть

$$\hat{q} = q \text{ и } p = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial q}.$$

Отсюда

$$\hat{p}\hat{q} = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial q} (q\Psi) = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \left(\Psi + q \frac{\partial \Psi}{\partial q} \right)$$

и

$$\hat{q}\hat{p} = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} q \frac{\partial \Psi}{\partial q}.$$

Следовательно,

$$(\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p})\, \Psi = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \Psi. \tag{4.80}$$

Это соотношение впервые получено Гейзенбергом.

Так как волновая функция $\Psi \neq 0$, то из формулы (4.80) следует, что

$$\hat{p}\hat{q} \neq \hat{q}\hat{p},$$

т. е. операторы импульса $\hat{p}$ и сопряжённой координаты $\hat{q}$ не коммутируют между собой. В силу теоремы из §4.8 получаем, *что координата q и сопряжённый ей импульс p не могут быть точно измерим ни в каком состоянии* Ψ.

4.10 Соотношение неопределённостей

Дадим более точную характеристику распределения значений координат частицы и соответствующих им импульсов для одного и того же состояния системы [Бло04; Шпо84].

Для простоты рассмотрим свободную частицу, положение которой описывается одной декартовой координатой x. Пусть p_x – соответствующий импульс частицы.

Точности измерений координаты x и импульса p_x в данном состоянии Ψ мы будем характеризовать квадратами отклонений (*дисперсиями*)

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \overline{x})^2}$$

и соответственно

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{(p_x - \overline{p_x})^2},$$

где $\overline{x}$ и $\overline{p_x}$ – средние значения координаты x и импульса p_x в состоянии Ψ.

Из формулы (4.73) (§4.7) вытекает, что для любых динамических переменных a и b в любом состоянии Ψ справедливо равенство

$$\overline{a + b} = \overline{a} + \overline{b}.$$

Поэтому

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x^2 - 2x\overline{x} + \overline{x}^2)} = \overline{x^2} - 2\overline{x}\overline{x} + (\overline{x})^2 = \overline{x^2} - (\overline{x})^2 \tag{4.81}$$

и соответственно

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - (\overline{p_x})^2. \tag{4.82}$$

Выбирая подходящую систему координат Ox, всегда можно добиться того, чтобы

$$\overline{x} = 0 \text{ и } \overline{p_x} = 0. \tag{4.83}$$

Действительно, помещая начало координат системы Ox в точке $\overline{x}$, будем иметь

$$\overline{X} = 0.$$

Далее, предполагая, что система координат движется с постоянной скоростью $\dot{x} = \frac{\overline{p_x}}{m}$, где m – масса частицы, очевидно, получим

$$\overline{p_X} = 0,$$

причём квадратичные отклонения $\overline{(\Delta x)^2}$ и $\overline{(\Delta p_x)^2}$ останутся неизменными.

Таким образом, без нарушения общности рассуждения можно считать, что для x и p_x выполнены соотношения (4.83) (*центрированные переменные*) и, следовательно,

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} \tag{4.81'}$$

и

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2}. \tag{4.82'}$$

Так как для x и p_x соответствующие операторы есть

$$\hat{x} = x \text{ и } \hat{p}_x = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x},$$

то в силу формулы (4.73) имеем

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, t) x^2 \Psi(x,\, t) \mathrm{d}x \tag{4.84}$$

и

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} = -\frac{h^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, t) \frac{\partial^2 \Psi(x,\, t)}{\partial x^2} \mathrm{d}x. \tag{4.85}$$

Рассмотрим вспомогательный интеграл

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \lambda x \Psi(x,\, t) + \frac{\partial \Psi(x,\, t)}{\partial x} \right|^2 \mathrm{d}x \geqslant 0,$$

где λ – действительная переменная.

Введя обозначения

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \Psi^*(x,\, t) \Psi(x,\, t) \mathrm{d}x;$$
$$B = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x,\, t) \Psi(x,\, t) \right] \mathrm{d}x;$$
$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} \mathrm{d}x,$$

будем иметь

$$\begin{gathered} I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\lambda x \Psi(x,\, t) + \frac{\partial \Psi(x,\, t)}{\partial x} \right] \left[\lambda x \Psi^*(x,\, t) + \frac{\partial \Psi^*(x,\, t)}{\partial x} \right] \mathrm{d}x = \\ = \lambda^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \Psi^*(x,\, t) \Psi(x,\, t) \mathrm{d}x + \\ + \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} x \left[\Psi^*(x,\, t) \frac{\partial \Psi(x,\, t)}{\partial x} + \Psi(x,\, t) \frac{\partial \Psi^*(x,\, t)}{\partial x} \right] \mathrm{d}x + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*(x,\, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi(x,\, t)}{\partial x} \mathrm{d}x = A\lambda^2 + B\lambda + C \geqslant 0. \end{gathered} \tag{4.86}$$

На основании формулы (4.84) получаем

$$A = \overline{(\Delta x)^2}.$$

Далее, интегрируя по частям и учитывая, что волновая функция $\Psi(x,\, t)$ нормирована и обращается в нуль на бесконечности, находим

$$B = x\Psi^*(x,\, t)\Psi(x,\, t)\Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, t)\Psi(x,\, t)\mathrm{d}x = -1.$$

Аналогично, интегрируя по частям, в силу формулы (4.85) будем иметь

$$C = \Psi^*(x,\, t)\frac{\partial\Psi(x,\, t)}{\partial x}\Bigg|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,\, t)\frac{\partial^2\Psi(x,\, t)}{\partial x^2}\mathrm{d}x = \frac{4\pi^2}{h^2}\overline{(\Delta p_x)^2}.$$

Из алгебры известно, что квадратный трёхчлен сохраняет положительный знак, когда корни его комплексные или равные между собой, т. е. дискриминант этого трёхчлена должен быть неположительным. Отсюда имеем

$$B^2 - 4AC = 1 - 4\overline{(\Delta x)^2}\frac{4\pi^2}{h^2}\overline{(\Delta p_x)^2} \leqslant 0$$

и, следовательно,

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} \geqslant \frac{h^2}{16\pi^2}. \tag{4.87}$$

Это и есть *соотношение неопределённости*, или *неравенство Гейзенберга*. Оно даёт связь между «квадратичными неопределённостями» (дисперсиями) координаты x и соответствующего импульса p_x для любого момента времени t.

Из неравенства (4.87) следует, что ни в одном состоянии $\Psi(x,\, t)$ невозможно точно измерить координату x и сопряжённый ей импульс p_x (см. 4.9). Более того, если в некотором состоянии квадратичная или стандартная ошибка $\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}$ координаты x мала, то квадратичная ошибка $\sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}}$ соответствующего импульса p_x будет велика, и наоборот.

Если состояние частицы характеризуется тремя декартовыми координатами x, y, z и соответствующими импульсами p_x, p_y, p_z, то выполнены три аналогичных соотношения неопределённостей (4.87) для каждой из координат x, y и z.

4.11 Производная оператора по времени

Пусть $a = a(t)$ – динамическая переменная, изменяющаяся со временем t, и $\hat{A} = \hat{A}(t)$ – её эрмитов оператор.

Так как в несобственном состоянии $\Psi = \Psi(q,\, t)$ переменная a неопределенна, т. е. лишена фиксированных значений, то не имеет смысла говорить о производной $\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}$ в обычном смысле.

Рассмотрим среднее значение (§4.7) переменной a, выражающееся формулой:

$$\overline{a} = \left(\hat{A}\Psi,\, \Psi\right) \equiv \int_{\Omega}\!\!\cdots\!\!\int \Psi^*\hat{A}\Psi\mathrm{d}\Omega. \tag{4.88}$$

Оператор $\hat{B} = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}$, удовлетворяющий для любой волновой функции Ψ условию

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\Psi,\, \Psi\right), \tag{4.89}$$

называется *производной оператора* $\hat{A}$ *по времени* t [Бло04]. Иными словами, *производная по времени оператора* $\hat{A}$*, соответствующего динамической переменной* a*, есть оператор, для которого среднее значение изображаемой им динамической переменной совпадает с производной среднего значения переменной* a*.*

Вводя условное обозначение

$$\left(\hat{A}\Psi,\, \Psi\right) = \overline{\hat{A}},$$

из формулы (4.89) получим

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \overline{\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}}.$$

Таким образом, *производная по времени среднего значения динамической переменной равна среднему значению производной по времени от соответствующего оператора.*

Дифференцируя по времени равенство (4.88), получим

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\overline{a}(t+\Delta t) - \overline{a}(t)}{\Delta t} =$$
$$= \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi,\, \Psi\right) + \left(\hat{A}\frac{\partial\Psi}{\partial t},\, \Psi\right) + \left(\hat{A}\Psi,\, \frac{\partial\Psi}{\partial t}\right), \tag{4.90}$$

где $\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}$ – оператор, ставящий в соответствие функции Ψ функцию

$$\Psi_1(q,\, t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\hat{A}(t+\Delta t)\Psi(q,\, t) - \hat{A}(t)\Psi(q,\, t)}{\Delta t}.$$

Так как волновая функция удовлетворяет уравнению Шрёдингера, содержащему время (§4.4)

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\hat{H}\Psi,$$

где $\hat{H} = \hat{H}\Big(q,\, \frac{h}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial q},\, t\Big)$ – оператор Гамильтона системы, то из формулы (4.90) будем иметь

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi,\, \Psi\right) - \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left(\hat{A}\hat{H}\Psi,\, \Psi\right) + \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left(\hat{A}\Psi,\, \hat{H}\Psi\right).$$

Отсюда в силу эрмитововсти операторов $\hat{A}$ и $\hat{H}$ находим

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi,\, \Psi\right) + \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left[\left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right)\Psi,\, \Psi\right]$$

или

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \left(\left\{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \left[\hat{H},\, \hat{A}\right]\right\}\Psi,\, \Psi\right), \tag{4.91}$$

где

$$\left[\hat{H},\, \hat{A}\right] = \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right)$$

– так называемая *квантовая скобка Пуассона* [Бло04]. Сравнивая формулы (4.89) и (4.91), заключаем, что

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \left[\hat{H},\, \hat{A}\right], \tag{4.92}$$

причём

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \overline{\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}} = \overline{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} + \overline{\left[\hat{H},\, \hat{A}\right]}.$$

Если оператор $\hat{A}$ явно не зависит от времени t, то имеем более простые формулы:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{A}\right] \tag{4.93}$$

и

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \left(\left[\hat{H},\, \hat{A}\right]\Psi,\, \Psi\right) = \overline{\left[\hat{H},\, \hat{A}\right]}.$$

4.12 Уравнения движения в квантовой механике

Рассмотрим частицу массы m, состояние которой определяется декартовыми координатами $x,\, y,\, z$ и отвечающими им импульсами $p_x,\, p_y,\, p_z$. Обозначим соответствующие операторы через $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ и $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$. Так как эти операторы явно не зависят от времени (§4.4), то на основании формулы (4.93) (§4.11) имеем

$$\frac{\mathrm{d}\hat{X}}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{X}\right];\; \frac{\mathrm{d}\hat{Y}}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{Y}\right];\; \frac{\mathrm{d}\hat{Z}}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{Z}\right] \tag{4.94}$$

и

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}_x}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{P}_x\right];\; \frac{\mathrm{d}\hat{P}_y}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{P}_y\right];\; \frac{\mathrm{d}\hat{P}_z}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{P}_z\right], \tag{4.95}$$

где $\hat{H} = \hat{H}\Big(\hat{X},\, \hat{Y},\, \hat{Z},\, \hat{P}_x,\, \hat{P}_y,\, \hat{P}_z\Big)$ – оператор Гамильтона частицы и

$$\left[\hat{H},\, \hat{X}\right] = \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left(\hat{H}\hat{X} - \hat{X}\hat{H}\right) \text{ и т. д.}$$

– соответствующие скобки Пуассона. Для частицы в потенциальном поле $V(x,\, y,\, z)$ [§4.4, формула (4.49)] имеем

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V.$$

Так как $\hat{X} = x$ и $\hat{P} = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$ (см. §4.4), то, принимая во внимание, что

$$\nabla^2\,(uv) = v\nabla^2 u + 2\nabla u\nabla v + u\nabla^2 u,$$

получим

$$\left[\hat{H},\, \hat{X}\right] = \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left[\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V\right)x - x\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V\right)\right] =$$
$$= -\frac{h\mathrm{i}}{4\pi m}\left(2\nabla x\nabla + x\nabla^2 - x\nabla^2\right) = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}m}\cdot\frac{\partial}{\partial x}.$$

Отсюда

$$\left[\hat{H},\, \hat{X}\right] = \frac{1}{m}\hat{P}_x$$

и, следовательно, уравнение (4.94) принимают вид

$$\frac{\mathrm{d}\hat{X}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{P}_x}{m};\quad \frac{\mathrm{d}\hat{Y}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{P}_y}{m};\quad \frac{\mathrm{d}\hat{Z}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{P}_z}{m}, \tag{94$'$}$$

т. е. *производная по времени оператора каждой координаты частицы равна оператору соответствующего импульса, делённому на массу частицы.*

Аналогично учитывая, что $\nabla^2\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\nabla^2$, находим

$$\left[\hat{H},\, \hat{P}_x\right] = \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left[\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V\right)\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial x} -\right.$$
$$\left. -\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + V\right)\right] = V\frac{\partial}{\partial x} - \left(V\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x}\right) =$$
$$= -\frac{\partial V}{\partial x} = f_x,$$

где f_x – проекция на ось Ox действующей силы $\vec{f}$.

Так как операторы компонент силы $\vec{f}$ определяются соотношениями:

$$\hat{F}_x = f_x; \quad \hat{F}_y = f_y; \quad \hat{F}_z = f_z,$$

где $f_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$; $f_y = -\frac{\partial V}{\partial y}$; $f_z = -\frac{\partial V}{\partial z}$ – соответствующие проекции действующей силы, то уравнения (4.95) эквивалентны следующим:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}_x}{\mathrm{d}t} = \hat{F}_x; \quad \frac{\mathrm{d}\hat{P}_y}{\mathrm{d}t} = \hat{F}_y; \quad \frac{\mathrm{d}\hat{P}_z}{\mathrm{d}t} = \hat{F}_z, \tag{95'}$$

т. е. *производная по времени оператора каждого импульса частицы равна оператору соответствующей проекции действующей силы.*

Соотношения (94′) и (95′) вполне аналогичны соответствующим уравнениям классической механики и носят название *квантовых уравнений движения* [Бло04; Фок03; Шпо84].

4.13 Теорема Эренфеста

В §4.11 мы видели, что если $\hat{A}$ есть оператор динамической переменной $a = a(t)$, то

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \overline{\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}} \equiv \left(\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\Psi,\, \Psi\right). \tag{4.96}$$

Отсюда на основании квантовых уравнений движения (94′) и (95′) (§4.12) получаем:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\overline{x}}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{m}\overline{p_x}; \\ \frac{\mathrm{d}\overline{y}}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{m}\overline{p_y}; \\ \frac{\mathrm{d}\overline{z}}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{m}\overline{p_z} \end{aligned}\right\} \tag{4.97}$$

и

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\overline{p_x}}{\mathrm{d}t} &= \overline{f_x}; \\ \frac{\mathrm{d}\overline{p_y}}{\mathrm{d}t} &= \overline{f_y}; \\ \frac{\mathrm{d}\overline{p_z}}{\mathrm{d}t} &= \overline{f_z} \end{aligned}\right\} \tag{4.98}$$

Таким образом, имеем теорему Эренфеста: *среднее значение координат и импульсов частицы в любом состоянии подчиняются законам классической механики относительно усреднённой силы.*

Исключая из уравнений (4.97) и (4.98) усреднённые импульсы $\overline{p_x}$, $\overline{p_y}$, $\overline{p_z}$, получим *квантовые уравнения Ньютона*:

$$\left.\begin{aligned} m\frac{\mathrm{d}^2\overline{x}}{\mathrm{d}t} &= \overline{f_x};\\ m\frac{\mathrm{d}^2\overline{y}}{\mathrm{d}t} &= \overline{f_y};\\ m\frac{\mathrm{d}^2\overline{z}}{\mathrm{d}t} &= \overline{f_z}, \end{aligned}\right\}$$

или в раскрытом виде

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\iiint\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^* x_j\Psi\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3 = -\iiint\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x_j}\Psi\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3 \quad (j = 1,\, 2,\, 3)$$

где

$$x_1 = x; \quad x_2 = y; \quad x_3 = z.$$

4.14 Понятие об интегралах движения

По аналогии с классической механикой говорят, что динамическая переменная (механическая величина)

$$a = a(q,\, p,\, t),$$

где $q = (q_1,\, \ldots,\, q_k)$ и $p = (p_1,\, \ldots,\, p_k)$ – совокупность координат и импульсов системы, называется *интегралом движения*, если соответствующий оператор

$$\hat{A} = \hat{A}\left(q,\, \frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial q},\, t\right)$$

сохраняет неизменное независящее от времени t значение для всех волновых функций $\Psi_t(q) = \Psi(q,\, t)$, т. е.

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} \equiv 0.$$

Рассмотрим случае, когда оператор $\hat{A}$ явно не зависит от времени t. Тогда для интеграла движения $\hat{A}$ на основании формулы (4.93) (§4.11) имеем

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\, \hat{A}\right] \equiv 0, \tag{4.99}$$

где

$$\left[\hat{H},\, \hat{A}\right] = \frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right).$$

Следовательно,
$$\hat{H}\hat{A} = \hat{A}\hat{H}.$$

Таким образом, *динамическая переменная является интегралом движения тогда и только тогда, когда её оператор коммутирует с гамильтонианом (оператора Гамильтона) системы.*

Пусть $\overline{a}$ есть среднее значение динамической переменной a в данном состоянии Ψ. Тогда на основании формулы (4.99) (см. §4.11) получаем

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \overline{\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}} = \left(\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\Psi,\, \Psi\right) \equiv 0,$$

т. е.
$$\overline{a} = \mathrm{const}.$$

Таким образом, *динамическая переменная, являющаяся интегралом движения, сохраняет постоянное среднее значение для смены состояний*

$$\Psi_t(q) = \Psi(q,\, t) \quad (-\infty < t < +\infty)\,.$$

Пример 4.14.1. Пусть динамическая переменная есть импульс p_x свободной частицы массы m, не находящейся под действием сил и движущейся вдоль оси Ox.

Оператор импульса, как известно, есть (§4.4)

$$\hat{P}_x = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial x};$$

причём оператор Гамильтона, в этом случае, имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

так как, очевидно,
$$\hat{H}\hat{P}_x = \hat{P}_x\hat{H},$$

то импульс p_x является интегралом движения. Следовательно, для свободной частицы среднее значение импульса движения остаётся постоянным

$$\overline{p_x} = \mathrm{const}$$

(*закон сохранения импульса*).

Пример 4.14.2. Пусть система консервативна и динамическая переменная есть E – полная энергия системы.

Так как оператором полной энергии является гамильтониан $\hat{H}$, который, очевидно, коммутирует сам с собой, то E есть интеграл движения.

Таким образом, в консервативной системе среднее значение полной энергии остаётся постоянным

$$\overline{E} = \mathrm{const}$$

(*закон сохранения энергии*).

Пусть Ψ является собственным состоянием для динамической переменной a, т. е.

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi,$$

где $\lambda = \lambda(t)$ – некоторая скалярная функция времени t.

Дифференцируя это равенство по t и учитывая, что согласно предположению оператор A не зависит от времени, будем иметь

$$\hat{A}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\Psi + \lambda\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \tag{4.100}$$

Из уравнения Шрёдингера [§4.4, формула (4.48)] получаем

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\hat{H}\Psi.$$

Поэтому из формулы (4.100) выводим

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\Psi = -\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\left(\hat{A}\hat{H} - \lambda\hat{H}\right)\Psi.$$

Если a есть интеграл движения, то оператор $\hat{A}$ коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$ и, следовательно,

$$\hat{A}\hat{H} - \lambda\hat{H} = \hat{H}\left(\hat{A} - \lambda\hat{1}\right) = 0.$$

Таким образом,

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\Psi = 0$$

и, значит,

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} = 0; \quad \lambda = \mathrm{const}.$$

Итак, имеем теорему: *собственное значение оператора, соответствующего интегралу движения, не зависит от времени.*

Упражнения к четвёртой главе

1. Для свободной частицы массы m, движущейся в пространстве $Oxyz$ под действием силы с потенциалом V для случая цилиндрических координат ρ, φ, z:
$$x = \rho\cos\varphi; \quad y = \rho\sin\varphi; \quad z = z,$$
найти:
а) обобщённые импульсы;
б) функцию Гамильтона;
в) гамильтоновы уравнения движения.
Ответ. $p_\rho = m\dot\rho$; $p_\varphi = m\rho^2\dot\varphi$; $p_z = m\dot z$;
$$H = \frac{1}{2m}\left(p_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2}p_\varphi^2 + p_z^2\right) + V(\rho,\, \varphi,\, z).$$

2. То же самое (см. п. 1) найти для случая сферических координат r, φ, θ, где
$$x = r\cos\varphi\sin\theta; \quad y = r\sin\varphi\cos\theta; \quad z = r\cos\theta.$$
Ответ.
$$p_r = m\dot r; \quad p_\varphi = mr^2\sin^2\theta\dot\varphi; \quad p_\theta = mr^2\dot\theta;$$
$$H = \tfrac{1}{2m}\left(p_r^2 + \tfrac{1}{r^2}p_\theta^2 + \tfrac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\varphi^2\right).$$

3. Написать уравнение Шрёдингера для свободной частицы массы m в потенциальном поле V для случаев цилиндрических и сферических координат.

4. Доказать эрмитовость операторов $\hat M_x$, $\hat M_y$, $\hat M_z$ проекций моментов количества движений M_x, M_y, M_z частицы.

5. Выразить операторы $\hat M_x$, $\hat M_y$, $\hat M_z$, $\hat M^2$ в сферических координатах.
Указание.
$$\hat M^2 = \frac{1}{2}\left(\hat M_x + \mathrm{i}\hat M_y\right)\left(\hat M_x - \mathrm{i}\hat M_y\right) + \\ + \frac{1}{2}\left(\hat M_x - \mathrm{i}\hat M_y\right)\left(\hat M_x + \mathrm{i}\hat M_y\right) + \hat M_z^2.$$
Ответ.
$$\hat M_x = -\tfrac{h}{2\pi\mathrm{i}}\left(\sin\varphi\tfrac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\mathrm{ctg}\theta\tfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat M_y = \tfrac{h}{2\pi\mathrm{i}}\left(\cos\varphi\tfrac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\mathrm{ctg}\theta\tfrac{\partial}{\partial\varphi}\right);$$
$$\hat M_z = \tfrac{h}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\tfrac{\partial}{\partial\varphi}; \qquad \hat M_2 = \tfrac{h^2}{4\pi^2}\Lambda,$$

где

$$\Lambda = -\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

– *оператор Лежандра.*

6. Доказать соотношения

$$\left.\begin{aligned}
\hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x &= -\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\hat{M}_z;\\
\hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y &= -\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\hat{M}_x;\\
\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z &= -\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\hat{M}_y.
\end{aligned}\right\}$$

7. Доказать, что оператор $\hat{M}^2$ коммутирует с операторами $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$, $\hat{M}_z$.

8. В каком случае для двух стационарных состояний

$$\Psi_1 = \psi_1(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}E_1 t} \text{ и } \Psi_2 = \psi_2(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}E_2 t}$$

их суперпозиция

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

есть также стационарное состояние? Чему равна плотность вероятности $|\Psi|^2$ в общем случае?

9. Написать средние значения операторов моментов количества движения.

10. Доказать, что операторы кинетической энергии $\hat{T}$ и потенциальной энергии $\hat{V}$ не коммутируют между собой.

Глава 5

Уравнение Шрёдингера

5.1 Общие замечания

В этой главе рассмотрим некоторые простые механические системы, для которых можно дать строгое решение уравнения Шрёдингера.

Для простоты ограничимся изучением движения частицы массы m, находящейся в потенциальном поле с потенциальной энергией (потенциалом) $V(x,\, y,\, z)$, не зависящим от времени t. Если E – полная энергия частицы, то волновая функция $\psi = \psi(x,\, y,\, z)$ соответствующего стационарного состояния удовлетворяет уравнению Шрёдингера (гл. 4, 4.5)

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left[E - V(x,\, y,\, z)\right]\psi = 0, \tag{5.1}$$

где E является параметром.

Заметим, что так как E – собственное значение оператора Гамильтона системы, явно не содержащего времени t, то параметр E не зависит от t (гл. 4, 4.14).

5.2 Свободная частица

Простейшей механической системой является частица массы m, движущаяся в направлении оси Ox и не находящейся под воздействием каких-либо сил.

Так как гамильтониан системы есть

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2, \tag{5.2}$$

где p_x – импульс частицы, соответствующий её координате x, то уравнение Шрёдингера для этой частицы имеет вид (§5.1)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}t} + \frac{8\pi^2 mE}{h^2}\psi = 0, \tag{5.3}$$

где E – полная энергия частицы; причём волновая функция $\psi = \psi(x)$ должна удовлетворять *условиям конечности* при $x = \pm\infty$.

Из уравнения (5.3) получаем

$$\psi = c_1(E)\exp\left(\frac{2\pi x\mathrm{i}}{h}\sqrt{2mE}\right) + c_2(E)\exp\left(-\frac{2\pi x\mathrm{i}}{h}\sqrt{2mE}\right), \tag{5.4}$$

где $c_1(E)$ и $c_2(E)$ – произвольные постоянные. Из условия ограниченности на бесконечности следует, что

$$E \geqslant 0;$$

таким образом, свободная частица имеет непрерывный неотрицательный спектр значений энергии

$$0 \leqslant E < +\infty.$$

Заметим, что так как при $\psi \neq 0$ из формулы (5.4) имеем

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

то волновые функции $\psi(x)$ здесь не могут быть нормированы обычным способом.

5.3 Частица в потенциальном ящике

Рассмотрим прямолинейно движущуюся частицу массы m, ограниченную в своём движении отрезком оси Ox:

$$0 \leqslant x \leqslant l.$$

Наглядно можно представить, что эта частица находится в потенциальном поле с потенциалом

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 < x < l \\ \infty & \text{при } x = 0 \text{ и } x = l \end{cases} \tag{5.5}$$

В этом случае частица не сможет преодолеть бесконечный потенциальный барьер и окажется запертовй в «потенциальном ящике» (рис. 5.1).

Уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\psi''(x) + \left[\frac{8\pi^2 m}{h^2}E - V(x)\right] = 0, \tag{5.6}$$

где E – как всегда, полная энергия частицы. Отсюда при $0 < x < l$ получаем

$$\psi''(x) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0. \tag{5.7}$$

При $x = 0$ и $x = l$ должны быть выполнены краевые условия:

$$\psi(0) = 0; \quad \psi(l) = 0. \tag{5.8}$$

Действительно, если бы, например, $\psi(0) \neq 0$, то из формулы (5.6), учитывая (5.5), находим

$$\psi''(0) = \left[V(0) - \frac{8\pi^2 mE}{h^2}\right]\psi(0) = \infty,$$

что невозможно в силу выполнения условий стандартности для волновой функции (гл. 4, §4.4). Аналогичное рассуждение годится для $\psi(l)$.

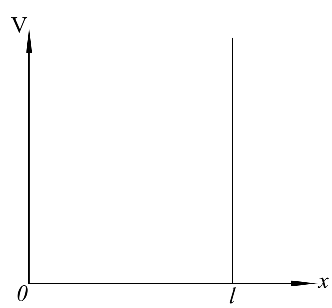

Рис. 5.1:

Полагая

$$\frac{8\pi^2 mE}{h^2} = \lambda^2, \tag{5.9}$$

получаем

$$\psi''(x) + \lambda^2\psi(x) = 0.$$

Отсюда

$$\psi(x) = A\sin\lambda x + B\cos\lambda x, \tag{5.10}$$

при $0 < x < l$.

Так как волновая функция $\psi(x)$ непрерывна, то на основании краевых условий (5.8) будем иметь

$$\lim_{x\to 0}\psi(x) = \psi(0) = B = 0 \tag{5.11}$$

и

$$\lim_{x\to l}\psi(x) = \psi(l) = A\sin\lambda l = 0.$$

Поэтому

$$A\sin\lambda l = 0.$$

Постоянная $A \neq 0$, так как в противном случае мы бы имели $\psi(x) \equiv 0$, что невозможно в силу физического смысла волновой функции $\psi(x)$ (гл. 4, §4.3). Следовательно,

$$\sin\lambda l = 0.$$

Отсюда

$$\lambda l = \pi n$$

и

$$\lambda_n = \frac{\pi n}{l}, \tag{5.12}$$

где n – целое число. Очевидно, можно ограничиться лишь натуральными значениями n. Действительно, при $n = 0$ получается тривиальное решение $\psi(x) \equiv 0$, а при $n < 0$ соответствующая функция $\psi_n(x)$ отличается только знаком от функции $\psi_{|n|}(x)$. Итак, λ_n принимает значения, определяемые формулой (5.12), где $n = 1, 2, \ldots$

Из формулы (5.9) получаем *спектр энергии*

$$E_n = \frac{h^2}{8ml^2}n^2 \quad (n = 1, 2, \ldots). \tag{5.13}$$

Имеем замечательный результат: *энергия E частицы может принимать лишь дискретный ряд значений*, т. е. энергия *квантуется* (рис. 5.2). Из формулы (5.10), учитывая соотношения (5.11) и (5.12) получаем выражения для волновых функций

$$\psi_n(x) = A_n \sin\frac{\pi n x}{l} \quad (n = 1, 2, \ldots). \tag{5.14}$$

Для определения постоянных A_n используем условие нормировки

$$\int_0^l |\psi_n(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1.$$

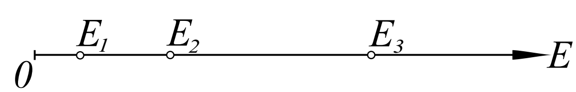

Рис. 5.2:

Отсюда имеем

$$A_n^2 \int_0^l \sin^2\frac{n\pi x}{l}\mathrm{d}x = \frac{A_n^2}{2}\int_0^l \left(1 - \cos\frac{2\pi n x}{l}\right)\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{A_n^2}{2}\left(x - \frac{l}{2\pi n}\sin\frac{2n\pi x}{l}\right)\Bigg|_0^l = \frac{A_n^2 l}{2} = 1.$$

Следовательно, можно принять

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Таким образом, нормированные волновые функции есть

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi x}{l} \quad (n = 1, 2, \ldots). \tag{5.15}$$

Как известно (гл. 4 §4.4), квадрат модуля волновой функции представляет собой плотность вероятности $\rho_n(x)$ для положения частицы на отрезке $[0,\, l]$. Имеем

$$\rho_n(x) = \frac{2}{l}\sin^2\frac{n\pi x}{l} \quad (n = 1,\, 2,\, \ldots)\,.$$

Рис. 5.3 и 5.4 дают распределение вероятностей координат частицы для случаев $n = 1$ и $n = 2$. Таким образом, для частицы с энергией E_1 наивероятнейшим положением будет $x_0 = \frac{l}{2}$, а для частицы с энергией E_2 $x_0 = \frac{l}{4}$ и $x_1 = \frac{3l}{4}$.

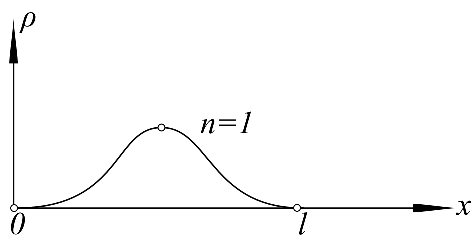

Рис. 5.3:

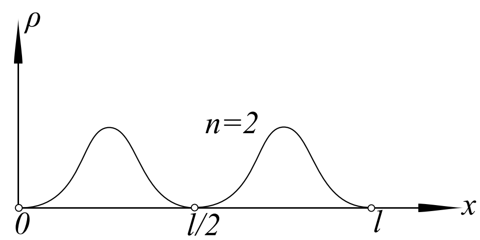

Рис. 5.4:

Найдём среднее значение $\overline{x}$ координаты x частицы с энергией E_n. Согласно общей формуле (гл. 4, §4.7) имеем

$$\overline{x} = \int_0^l x\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{l}\int_0^l x\sin^2\frac{\pi n x}{l}\mathrm{d}x = \\ = \frac{1}{l}\int_0^l x\left(1 - \cos\frac{2n\pi x}{l}\right)\mathrm{d}x = \\ = \frac{1}{l}\left[\left.\frac{x^2}{2}\right|_0^l - \int_0^l x\cos\frac{2n\pi x}{l}\mathrm{d}x\right] = \frac{l}{2} - \frac{1}{l}\int_0^l x\cos\frac{2n\pi x}{l}\mathrm{d}x.$$

Интегрируя по частям, получим

$$\int_0^l x\cos\frac{2n\pi x}{l}\mathrm{d}x = \frac{l}{2n\pi}\left[\left. x\sin\frac{2n\pi x}{l}\right|_0^l - \int_0^l \sin\frac{2n\pi x}{l}\mathrm{d}x\right] = \\ = \left(\frac{l}{2n\pi}\right)^2 \left.\cos\frac{2n\pi x}{l}\right|_0^l = \left(\frac{l}{2n\pi}\right)^2(\cos 2n\pi - 1) = 0.$$

Таким образом, имеем

$$\overline{x} = \frac{l}{2}.$$

Найдём ещё среднее значение $\overline{p_x}$ импульса частицы. Имеем

$$\overline{p_x} = \int_0^l \psi^*(x) \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} [\psi(x)]\, \mathrm{d}x = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \psi^2(x)\Big|_0^l = 0.$$

Аналогично для среднего значения квадрата импульса $\overline{p_x^2}$ имеем следующее выражение:

$$\overline{p_x^2} = -\frac{h^2}{4\pi^2} \int_0^l \psi^*(x) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} [\psi(x)]\, \mathrm{d}x.$$

Отсюда на основании формулы (5.15) для частицы с полной энергией E_n ($n = 1,\, 2,\, \dots$) получаем

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = -\sqrt{\frac{2}{l}} \cdot \frac{n^2\pi^2}{l^2} \sin\frac{n\pi x}{l}$$

и, следовательно,

$$\overline{p_x^2} = \frac{2}{l} \cdot \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{n^2\pi^2}{l^2} \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} \mathrm{d}x = \frac{n^2h^2}{4l^2}.$$

Используя формулу (5.13), окончательно находим

$$\overline{p_x^2} = 2mE_n \quad (n = 1,\, 2,\, \dots).$$

Так как $p_x = m\dot{x}$, то из последней формулы получаем

$$E_n = \frac{m}{2}\overline{\dot{x}^2}.$$

5.4 Частица в пространственном потенциальном ящике

Пусть частица массы m имеет потенциальную энергию $V = V(x,\, y,\, z)$, равная нулю внутри прямоугольного параллелепипеда:

$$\Pi \{0 < x < a, \quad 0 < y < b, \quad 0 < z < c\} \tag{5.16}$$

и обращающуюся в бесконечность на его границе. Тогда, если в начальный момент $t = 0$ координаты частицы удовлетворяли неравенствам (5.16), то эти неравенства сохраняются для всех последующих моментов времени $t > 0$, т. е. частица постоянно будет находиться внутри параллелепипеда Π («*потенциальный ящик*») (рис. 5.5).

Уравнение Шрёдингера для частицы имеет вид (см. §5.1):

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left[E - V(x,\,y,\,z)\right]\psi = 0, \tag{5.17}$$

где E – полная энергия частицы. Применяя метод разделения переменных (*метод Фурье* [Тол80]), построим для уравнения (5.17) полную систему линейно независимых его решений вида

$$\psi = X(x)Y(y)Z(z). \tag{5.18}$$

Можно положить

$$V = V_x + V_y + V_z, \tag{5.19}$$

$$\left.\begin{array}{l} V_x = 0 \text{ при } 0 < x < a \text{ и } V_x(0) = V_x(a) = \infty; \\ V_y = 0 \text{ при } 0 < y < b \text{ и } V_y(0) = V_y(b) = \infty; \\ V_z = 0 \text{ при } 0 < z < c \text{ и } V_z(0) = V_z(c) = \infty. \end{array}\right\} \tag{5.20}$$

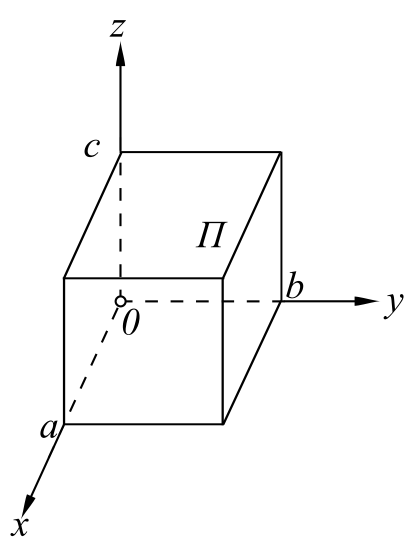

Рис. 5.5:

Подставляя выражения (5.18) и (5.19) в уравнение (5.17) и разделив на произведение $X(x)Y(y)Z(z)$, получим

$$\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{Z''(z)}{Z(z)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E - V_x - V_y - V_z\right) = 0.$$

Отсюда

$$\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E - V_x - V_y\right) = -\frac{Z''(z)}{Z(z)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}V_z. \tag{5.21}$$

В тождестве (5.21) правая часть его зависит только от переменной z и поэтому не меняется при изменении переменных x и y и является постоянной. Обозначая эту постоянную через $\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_z$, будем иметь

$$\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E - E_z - V_x - V_y\right) = 0 \tag{5.22}$$

и

$$\frac{Z''(z)}{Z(z)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E_z - V_z) = 0.$$

Далее, разделяя переменные в уравнении (5.22), получим

$$\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_z - V_x) = -\frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}V_y. \tag{5.23}$$

Повторяя рассуждение, аналогичное приведённому выше, убеждаемся, что обе части тождества (5.23) равны некоторой постоянной $\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_y$. Таким образом, компоненты $X(x)$, $Y(y)$ и $Z(z)$ волновой функции ψ удовлетворяет уравнениям:

$$\left.\begin{array}{l} X''(x) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V_x)\,X(x) = 0; \\ Y''(y) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V_y)\,Y(y) = 0; \\ Z''(z) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V_z)\,Z(z) = 0. \end{array}\right\}$$

где положено

$$E = E_x + E_y + E_z.$$

На основании соотношений (5.20) функции $X(x)$, $Y(y)$, $Z(z)$ должны удовлетворять краевым условиям (ср. §5.3):

$$\left.\begin{array}{l} X(0) = X(a) = 0; \\ Y(0) = Y(b) = 0; \\ Z(0) = Z(c) = 0, \end{array}\right\}$$

так как в противном случае $X''(x) = \infty$ при $x = 0$ и $x = a$ и т. п., что невозможно.

Отсюда по аналогии с одномерным случаем (§5.3) получаем:

$$\left.\begin{array}{l} X(x) = A\sin\frac{n_x\pi}{a}x; \\ Y(y) = B\sin\frac{n_y\pi}{b}y; \\ Z(z) = C\sin\frac{n_z\pi}{c}z, \end{array}\right\} \tag{5.24}$$

причём

$$\left.\begin{array}{l} E_x = \frac{h^2 n_x^2}{8ma^2}; \\ E_y = \frac{h^2 n_y^2}{8mb^2}; \\ E_z = \frac{h^2 n_z^2}{8mc^2}, \end{array}\right\}$$

где A, B, C – постоянные и n_x, n_y, n_z – натуральные числа.

Нормируя функции так, чтобы

$$\int_0^a |X(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1;\ \int_0^b |Y(y)|^2\,\mathrm{d}y = 1;\ \int_0^c |Z(z)|^2\,\mathrm{d}z = 1,$$

будем иметь окончательно:

$$\left.\begin{aligned} X(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x; \\ Y(y) &= \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_y\pi}{b}y; \\ Z(z) &= \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{n_z\pi}{c}z, \end{aligned}\right\}$$

следовательно,

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x\sin\frac{n_y\pi}{b}y\sin\frac{n_z\pi}{c}z.$$

Полная энергия частицы может принимать лишь следующие значения:

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right),$$

где n_x, n_y, $n_z = 1, 2, \ldots$ носят названия *квантовых чисел*. Эти результаты находят применение в теории идеальных газов.

5.5 Гармонический осциллятор

Рассмотрим частицу массы m с потенциальной энергией

$$V = \frac{kx^2}{2}, \tag{5.25}$$

где k – положительная постоянная (рис. 5.6).

На частицу действует упругая сила

$$X = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx, \tag{5.26}$$

вызывающая колебания частицы около притягивающего центра («*одномерный гармонический осциллятор*»).

Из формулы (5.25) следует, что

$$V \to \infty \text{ при } |x| \to \infty,$$

т. е. в некотором смысле частицу можно рассматривать как находящуюся в «потенциальном ящике» (ср. §5.3) и, следовательно, энергия её, по-видимому, должна квантоваться. Ниже будет показано, что это действительно так. Заметим, что в реальных системах потенциал V обычно стремится к постоянной при $|x| \to \infty$, причём сила, действующая на частицу, стремится к нулю. Поэтому гармонический осциллятор является лишь идеализацией реальных процессов, пригодной лишь для малых колебаний.

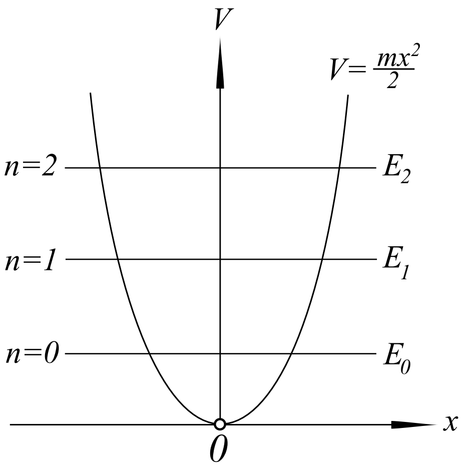

Рис. 5.6:

Дадим сначала трактовку гармонического осциллятора с точки зрения классической механики. На основании закона Ньютона дифференциальное уравнение движения частицы есть

$$m\ddot{x} + kx = 0.$$

Отсюда

$$x = a\cos\sqrt{\frac{k}{m}}\,(t - t_0)\,, \qquad (5.27)$$

где a, t_0 – некоторые постоянные. Следовательно, частица совершает гармонические колебания с частотой (числом колебаний в секунду)

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}. \qquad (5.28)$$

Из формулы (5.27) находим кинетическую энергию частицы

$$T = \frac{m}{2}\dot{x}^2 = \frac{ka^2}{2}\sin^2\sqrt{\frac{k}{m}}\,(t - t_0)\,.$$

Так как потенциальная энергия частицы есть

$$V = \frac{kx^2}{2} = \frac{ka^2}{2}\cos^2\sqrt{\frac{k}{m}}\,(t - t_0)\,,$$

то для полной энергии получаем выражение

$$E = T + V = \frac{ka^2}{2},$$

причём энергия не изменяется с течением времени t и допустимы все положительные значения E.

Выясним теперь поведение гармонического осциллятора в квантовой механике [Бло04; Лев56; ТС04; Фок03; Шпо84; ЭУК48]. Функция Гамильтона для этой системы есть

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{kx^2}{2},$$

где p – импульс частицы, соответствующий координате x.

Отсюда оператор Гамильтона системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{k}{2}x^2.$$

Следовательно, волновая функция $\psi = \psi(x)$ гармонического осциллятора в стационарном состоянии, характеризуемом полной энергией E, удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{k}{2}x^2\right)\psi = E\psi$$

или

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E - \frac{k}{2}x^2\right)\psi = 0. \tag{5.29}$$

Это уравнение можно также непосредственно получить из §5.1 [формула (5.1)].

По свойству волновых функций ψ требуется найти нетривиальные решения дифференциального уравнения (5.29), обладающие конечной нормой, т. е. такие, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x < +\infty. \tag{5.30}$$

Положим

$$\frac{8\pi^2 mE}{h^2} = \alpha; \quad \frac{4\pi^2 mk}{h^2} = \beta^2;$$

тогда уравнение (5.29) принимает вид

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(\alpha - \beta^2 x^2\right)\psi = 0.$$

Введя новое безразмерное переменное

$$\xi = \sqrt{\beta}x;$$

тогда

$$\mathrm{d}\xi = \sqrt{\beta}\mathrm{d}x$$

и, следовательно,

$$\beta\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(\alpha - \beta\xi^2\right)\psi = 0.$$

Полагая

$$\frac{\alpha}{\beta} = \frac{4\pi E}{h}\sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{h\nu_0} = \lambda, \tag{5.31}$$

будем иметь дифференциальное уравнение

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\psi = 0, \tag{5.32}$$

где λ является параметром. При больших $|\xi|$ дифференциальное уравнение (5.32) приближённо допускает ограниченное решение

$$\tilde{\psi} = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right);$$

поэтому естественно положить

$$\psi = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) f, \tag{5.33}$$

где f – новая неизвестная функция. Производя в уравнении (5.32) замену переменной, будем иметь

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\frac{\mathrm{d}^2\xi}{\mathrm{d}\xi^2} + 2\left(\xi\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\right)\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\xi} + \left(\xi^2 - 1\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) f$$

и, следовательно,

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + (\lambda - 1) f = 0. \tag{5.34}$$

Условие (5.30) при этом примет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2}\left|f(\xi)\right|^2 \mathrm{d}\xi < +\infty. \tag{5.35}$$

Уравнение (5.34) представляет собой дифференциальное уравнение Чебышёва-Эрмита (гл. 2, §2.4). Как было показано выше, единственными нетривиальными решениями уравнения (5.34), удовлетворяющими условиями (5.35), являются с точностью до коэффициента пропорциональности полиномы Чебышёва-Эрмита. Поэтому получаем

$$f_n(\xi) = c_n H_n(\xi), \tag{5.36}$$

причём

$$\lambda - 1 = 2n,$$

отсюда

$$\lambda = 2n + 1 \tag{5.37}$$

($n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$). Из формулы (5.31) находим, что энергия гармонического осциллятора может иметь лишь дискретную совокупность значений

$$E_n = h\nu_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \tag{5.38}$$

($n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$). На рис. 5.6 изображены соответствующие квантовые уровни E_n. Число n при этом называется *квантовым числом*. Заметим, что минимальное значение энергии осциллятора, соответствующее квантовому числу $n = 0$ – так называемая нулевая энергия, есть

$$E_0 = \frac{h\nu_0}{2} > 0. \tag{5.39}$$

Существование положительной нулевой энергии для гармонического осциллятора непосредственно вытекает из принципа неопределённостей (гл. 4, §4.8, 4.9). Действительно, если бы осциллятор имел энергию, равную нулю, то он находился бы в положении равновесия $x = 0$ и имел импульс $p = 0$, что невозможно.

Из формул (5.33) и (5.36) получаем выражения для волновых функций гармонического осциллятора

$$\psi_n = c_n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} \right) H_n(\xi);$$

так как

$$\xi = \sqrt{\beta} x,$$

то

$$\psi_n(x) = c_n \exp\left(-\frac{\beta x^2}{2} \right) H_n\left(\sqrt{\beta} x \right), \tag{5.40}$$

где

$$\beta = \frac{2\pi}{h} \sqrt{mk} = \frac{4\pi^2 m \nu_0}{h}.$$

Для определения постоянных c_n используем нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)| \, \mathrm{d}x = 1.$$

Отсюда, учитывая норму полиномов Чебышёва-Эрмита (гл. 2, §2.3), будем иметь

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)| \, \mathrm{d}x = c_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\beta x^2} H_n^2\left(\sqrt{\beta} x \right) \mathrm{d}x =$$
$$= \frac{c_n^2}{\sqrt{\beta}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2} H_n^2(\xi) \mathrm{d}\xi = \frac{c_n^2}{\sqrt{\beta}} \left(2^n n! \sqrt{\pi} \right) = 1.$$

Следовательно, можно положить

$$c_n = \sqrt{\frac{\beta^{\frac{1}{2}}}{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}}} \quad (n = 0,\ 1,\ 2,\ \dots).$$

Таким образом, нормированные волновые функции гармонического осциллятора определяются формулой

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\beta^{\frac{1}{2}}}{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}}} \exp\left(-\frac{\beta x^2}{2}\right) H_n\Big(\sqrt{\beta} x\Big) \tag{5.41}$$

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

где

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

– полиномы Чебышёва-Эрмита.

Точка, в которой волновая функция $\psi_n(x)$ обращается в нуль, называется её *узлом*. На основании свойств полиномов Чебышёва-Эрмита получаем, что число узлов волновой функции $\psi_n(x)$ равно её номеру, т. е. *квантовое число n совпадает с числом узлов соответствующей волновой функции.*

Согласно основному свойству волновой функции величина

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \mathrm{e}^{-\beta x^2} H_n^2\Big(\sqrt{\beta} x\Big)$$

$(n = 0,\ 1,\ 2,\ \dots)$ представляет собой плотность вероятности для распределения координаты x гармонического осциллятора. Так как

$$\begin{aligned} &H_0(\xi) = 1; \\ &H_1(\xi) = 2\xi; \\ &H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned}$$

то отсюда, в частности, получаем:

$$\rho_0(x) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \mathrm{e}^{-\beta x^2};$$

$$\rho_1(x) = 2\sqrt{\frac{\beta^2}{\pi}} x^2 \mathrm{e}^{-\beta x^2};$$

$$\rho_2(x) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \left(4\beta x^2 - 2\right)^2 \mathrm{e}^{-\beta x^2}.$$

Решив задачу на экстремум функции $\rho_n(x)$ $(n = 0,\ 1)$, находим наивероятнейшие положения частицы: $x_0 = 0$ для $n = 0$ и $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{\beta}}$; $x_2 = \frac{1}{\sqrt{\beta}}$ для $n = 1$.

5.6 Атом водорода

Простейшую атомную систему представляет собой атом водорода, состоящий из протона (ядра) с зарядом $+e$ и массой M и электрона с зарядом $-e$ и массой[1] μ. Так как масса ядра весьма велика по сравнению с массой электрона (примерно в 1800 раз больше), то ядро будем считать неподвижным[2].

Выберем прямоугольную декартову систему координат $Oxyz$, начало которой совпадает с центром ядра. Положение электрона $P(x, y, z)$ в пространстве удобно определять сферическими координатами r, θ, φ (рис. 5.7), где

$$\left.\begin{aligned} x &= r\cos\varphi\sin\theta;\\ y &= r\sin\varphi\sin\theta;\\ z &= r\cos\theta, \end{aligned}\right\} \tag{5.42}$$

причём $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

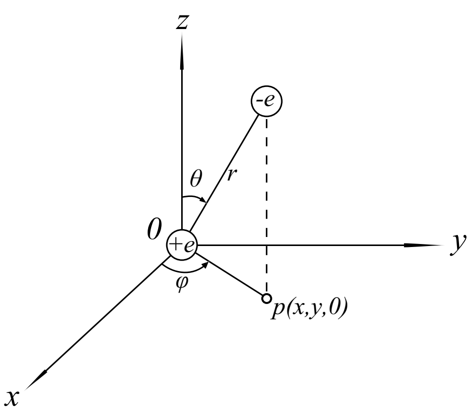

Рис. 5.7:

На основании закона Кулона потенциальная энергия электрона даётся формулой

$$V = -\frac{e^2}{r}. \tag{5.43}$$

Отсюда уравнение Шрёдингера (см. §5.1) для атома водорода имеет вид

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0, \tag{5.44}$$

где E – полная энергия системы; причём волновые функции $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$, как обычно, должны быть однозначными и непрерывными, обладающими конечной нормой:

$$\iiint\limits_{\Omega} |\psi|^2\, \mathrm{d}\Omega = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{+\infty} r^2\, |\psi|^2\, \mathrm{d}r < +\infty. \tag{5.45}$$

Воспользовавшись выражением оператора Лапласа в сферических координатах (гл. 1, §1.11)

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial\varphi^2},$$

[1] Здесь изменяется обычное обозначение массы, так как буква m получит специфическое значение.

[2] При учёте собственного движения ядра под μ следует понимать приведённую массу ${}^{Mm}/_{(M+m)}$, где m – масса электрона и M – масса ядра.

уравнение (5.44) можно написать в следующем виде:

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\\
+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\left(\alpha+\frac{\beta}{r}\right)\psi=0, \quad (5.46)$$

где

$$\alpha=\frac{8\pi^2\mu E}{h^2};\quad \beta=\frac{8\pi^2\mu e^2}{h^2}. \quad (5.47)$$

5.7 Сферические волновые функции атома водорода

Для решения линейного дифференциального уравнения (5.46) применим метод разделения переменных, а именно, для уравнения (5.46) построим полную систему решений вида

$$\psi=R(r)Y(\theta,\,\varphi); \quad (5.48)$$

все остальные решения этого уравнения будут представлять собой линейные комбинации конечного или счётного числа основных частных решений (5.48)ю

Подставляя выражение (5.48) в дифференциальное уравнение (5.46) и разделяя в нём переменные, получим

$$\frac{\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left(\alpha+\frac{\beta}{r}\right)R}{\frac{1}{r^2}R}=\frac{\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}}{Y}. \quad (5.49)$$

Согласно обычному рассуждению, каждая из частей равенства (5.49) равняется некоторой постоянной. Обозначая эту постоянную через $-\lambda$, вместо уравнения (5.49) будем иметь систему двух уравнений:

$$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\lambda Y=0;\\ \frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left(\alpha+\frac{\beta}{r}-\frac{\lambda}{r^2}\right)R=0.\end{array}\right\} \quad (5.50)$$

Пусть

$$Y(\theta,\,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (5.51)$$

Подставляя это выражение во второе уравнение из уравнений (5.50) и разделяя переменные θ и φ, получим

$$\frac{\dfrac{1}{\sin\theta}\cdot\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)+\lambda\Theta}{\dfrac{\Theta}{\sin^2\theta}}=-\frac{\Phi''}{\Phi}=\lambda_1,$$

где λ_1 – некоторая постоянная. Отсюда получаем уравнения:

$$\left.\begin{array}{c}\Phi''+\lambda_1\Phi=0;\\ \dfrac{1}{\sin\theta}\cdot\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}t}\right)+\left(\lambda-\dfrac{\lambda_1}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0.\end{array}\right\} \tag{5.52}$$

Из первого уравнения (5.52) находим

$$\Phi(\varphi)=a\exp\left(\pm\mathrm{i}\sqrt{\lambda_1}\varphi\right),$$

где a – произвольная постоянная.

Так как φ – угловая координата с периодом 2π и $\Phi(\varphi)$ – однозначная функция, то $\Phi(\varphi)$ должна иметь период, равный $\frac{2\pi}{m}$, где m – целое число. Отсюда получаем

$$\frac{2\pi}{\pm\sqrt{\lambda_1}}=\frac{2\pi}{m}$$

и, следовательно,

$$\lambda_1=m^2 \quad (m=0,\,\pm1,\,\pm2,\,\dots). \tag{5.53}$$

Таким образом, имеем

$$\Phi_m(\varphi)=a_m\exp\left(\mathrm{i}m\varphi\right)$$

$(m=0,\,\pm1,\,\pm2,\,\dots)$, где a_m – постоянная. Случай $m=0$ соответствует постоянной, которую можно считать периодической функцией произвольного периода. Нормируем функции $\Phi_m(\varphi)$, полагая

$$\int_0^{2\pi}|\Phi_m(\varphi)|^2\,\mathrm{d}\varphi=|a_m|^2\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi=2\pi\,|a_m|^2=1.$$

Отсюда

$$|a_m|=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Следовательно, в качестве нормированных собственных функций $\Phi_m(\varphi)$ можно взять

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{5.54}$$

$$(m = 0, \pm 1, \pm 2, \, \dots) \, .$$

Подставляя значение (5.53) во второе уравнение (5.52), будем иметь

$$\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \left(\sin\theta \frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta = 0.$$

Отсюда, полагая

$$\cos\theta = t; \quad -\sin\theta \mathrm{d}\theta = \mathrm{d}t,$$

получим присоединённое уравнение Лежандра (гл. 1, §1.8)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\left(1 - t^2\right) \frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}t} \right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - t^2} \right) \Theta = 0. \tag{5.55}$$

Как известно (гл. 1, §1.8), дифференциальное уравнение (5.55) имеет нетривиальные ограниченные решения только тогда, когда параметры λ и m принимают целочисленные значения, причём

$$\lambda = l \, (l + 1) \, ; \; |m| \leqslant l, \tag{5.56}$$

где l – целое неотрицательное число.

При выполнении условия (5.56) имеем

$$\Theta_{lm}(\theta) = b_{lm} P_l^{|m|}(t) = b_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta), \tag{5.57}$$

где

$$P_l^{|m|}(t) = \frac{1}{2^l l!} \left(1 - t^2\right)^{\frac{|m|}{2}} \frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}t^{l+|m|}} \left(t^2 - 1\right)^l$$

– присоединённые функции Лежандра степени l порядка $|m|$.

Для определения постоянных b_{lm} используем условие нормировки

$$\int_0^\pi |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta = |b_{lm}|^2 \int_0^\pi \left| P_l^{|m|}(\cos\theta) \right|^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta = \\ = |b_{lm}|^2 \int_{-1}^{+1} \left[P_l^{|m|}(t) \right]^2 \mathrm{d}t = 1. \tag{5.58}$$

Так как (см. гл. 1, §1.10)

$$\int_{-1}^1 \left[P_l^{|m|}(t) \right]^2 \mathrm{d}t = \frac{(l + |m|)!}{(l - |m|)!} \cdot \frac{2}{2l + 1},$$

то на основании формулы (5.58) можно принять

$$b_{lm} = \sqrt{\frac{2l + 1}{2} \cdot \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}}. \tag{5.59}$$

На основании формулы (5.57) получаем следующие выражения для *нормированных собственных функций*:

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{5.60}$$

$$(l = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots; \quad m = 0,\, \pm 1,\, \pm 2,\, \ldots,\, \pm l)\,.$$

Таким образом, в силу (5.51) и (5.54) нормированные сферические волновые функции имеют вид

$$Y_{lm}(\theta,\, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{5.61}$$

$$(l = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots; \quad m = 0,\, \pm 1,\, \pm 2,\, \ldots,\, \pm l)\,.$$

Число l называется *орбитальным квантовым числом*, а число m – *магнитным квантовым числом.*

5.8 Радиальные волновые функции атома водорода

Займёмся теперь определением радиальных волновых функций $R = R(r)$, удовлетворяющих второму уравнению системы (5.50), где вместо параметра λ нужно подставить значение (5.56). Имеем

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \left[\alpha + \frac{\beta}{r} - \frac{l\,(l+1)}{r^2}\right] R = 0$$

или

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + \left[\alpha + \frac{\beta}{r} - \frac{l\,(l+1)}{r^2}\right] R = 0. \tag{5.62}$$

В дальнейшем нужно отдельно рассматривать два случая: 1) $E < 0$ и 2) $E > 0$. Мы ограничимся исследованием физически более интересного случая отрицательной энергии E, т. е. будем предполагать, что

$$\alpha = \frac{8\pi^2 \mu E}{h^2} < 0. \tag{5.63}$$

Так как

$$E = T + V = T - \frac{e^2}{r},$$

где кинетическая энергия T не может быть бесконечно большой, то случай $E < 0$ соответствует орбитам электрона, отвечающим малым r.

Заметим, что при $E < 0$ получаются, как доказано ниже, квантовые уровни энергии, тогда как при $E > 0$ энергия имеет сплошной спектр [Бло04].

Положим

$$r = k\rho,$$

где k – некоторая положительная постоянная и ρ – новая независимая переменная. Производя замену переменной в уравнении (5.62), будем иметь

$$\frac{1}{k^2} \cdot \frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{k^2 \rho} \cdot \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} + \left[\alpha + \frac{\beta}{k\rho} - \frac{l\,(l+1)}{k^2\rho^2}\right] R = 0$$

или

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{\rho} \cdot \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} + \left[\alpha k^2 + \frac{\beta k}{\rho} - \frac{l\,(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0. \tag{5.64}$$

Выберем множитель k так, чтобы было выполнено равенство

$$\alpha k^2 = -\frac{1}{4}. \tag{5.65}$$

Отсюда

$$k = \sqrt{\frac{1}{-4\alpha}} = -\frac{h}{4\pi\sqrt{-2\mu E}}.$$

Введя обозначение

$$\beta k = \frac{8\pi^2 \mu e^2}{h^2} \cdot \frac{h}{4\pi\sqrt{-2\mu E}} = \frac{2\pi\mu e^2}{h\sqrt{-2\mu E}} = n, \tag{5.66}$$

получим для дифференциального уравнения (5.64) стандартную форму

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho} \cdot \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l\,(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0, \tag{5.67}$$

где на основании формулы (5.66) параметр n связан с энергией E соотношением

$$E = -\frac{2\pi^2 \mu e^4}{n^2 h^2}, \tag{5.68}$$

причём

$$k = \frac{n}{\beta} = \frac{n h^2}{8\pi^2 \mu e^2}. \tag{5.69}$$

При $\rho \to \infty$ уравнение (5.67) асимптотически заменяется уравнением

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{1}{4} R = 0,$$

допускающим ограниченное на промежутке $0 \leqslant \rho < +\infty$ решение

$$R = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right).$$

В общем случае положим

$$R = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) u, \tag{5.70}$$

где u – новая неизвестная функция.

Из формулы (5.70) получаем

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} - \frac{1}{2}u\right)$$

и

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2} = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} + \frac{1}{4}u\right).$$

Подставляя выражения для R и её производных в уравнение (5.67), после сокращения на множитель $\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$ находим

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} + \frac{1}{4}u + \frac{2}{\rho}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} - \frac{1}{2}u\right) + \\ + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{e\,(e+1)}{\rho^2}\right]u = 0$$

или

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} + \left[\frac{n-1}{\rho} - \frac{l\,(l+1)}{\rho^2}\right]u = 0. \tag{5.71}$$

Для дальнейшего упрощения дифференциального уравнения (5.71) сделаем подстановку

$$u = \rho^l v. \tag{5.72}$$

Тогда

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} = \rho^l\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + l\rho^{l-1}v$$

и

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2} = \rho^l\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + 2l\rho^{l-1}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + l\,(l-1)\,\rho^{l-2}v$$

и, следовательно, уравнение (5.71) после сокращения на ρ^l принимает вид

$$\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2l}{\rho}\cdot\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \frac{l\,(l-1)}{\rho^2}v - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right)\left(\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \frac{l}{\rho}v\right) + \\ + \left[\frac{n-1}{\rho} - \frac{l\,(l+1)}{\rho^2}\right]v = 0$$

или

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + (2l + 2 - \rho)\,\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + (n - l - 1)\,v = 0. \tag{5.73}$$

Уравнение (5.73) представляет собой присоединённое дифференциальное уравнение Лагерра (гл. 2, §2.14).

Выясним, каким требованиям должно удовлетворять решение уравнения (5.73). Из формул (5.70) и (5.72) имеем

$$R = \rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) v, \tag{5.74}$$

где

$$\rho = \frac{r}{k}.$$

Так как волновая функция

$$\psi(r,\,\theta,\,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{5.75}$$

должна обладать конечной нормой, то на основании формулы (5.45), учитывая нормировку функций $\Theta(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ будем иметь

$$\int_0^{+\infty} r^2R^2(r)\mathrm{d}r < +\infty.$$

Отсюда получаем, что $v = v(\rho)$ должно быть нетривиальным решением уравнения (5.73), удовлетворяющим условию:

$$\int_0^{+\infty} \rho^{2l+2}\mathrm{e}^{-\rho}v^2(\rho)\mathrm{d}\rho < +\infty. \tag{5.76}$$

Уравнение (5.73) можно записать в стандартной форме

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2} + \left[(2l + 1) + 1 - \rho\right]\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \left[n + l - (2l + 1)\right]v = 0. \tag{5.77}$$

Если n – натуральное число, причём

$$n + l \geqslant 2l + 1,\ \text{т. е. } n \geqslant l + 1,$$

то уравнение (5.77) допускает единственное степенное решение вида

$$v = c_{nl}L_{n+1}^{2l+1}(\rho), \tag{5.78}$$

где c_{nl} – произвольная постоянная и $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ – присоединённый полином Чебышёва-Лагерра, определяемый формулой (гл. 2, §2.11):

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \frac{\mathrm{d}^{2l+1}}{\mathrm{d}\rho^{2l+1}}\left[\mathrm{e}^{\rho}\frac{\mathrm{d}^{n+l}}{\mathrm{d}\rho^{n+l}}\left(\rho^{n+l}\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right].$$

Функция v, очевидно, удовлетворяет условию (5.76). Во всех остальных случаях нетривиальные решения v уравнения (5.77) имеют показательный рост при $\rho \to +\infty$ (см. гл. 2,§2.15) и не удовлетворяют условию (5.76).

Итак, на основании формул (5.74) и (5.78) получаем, что для атома водорода радиальными волновыми функциями являются

$$R_{nl}(\rho) = c_{nl}\rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \tag{5.79}$$

где натуральное число n носит название *главного квантового числа*, причём число l принимает значения:

$$l = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots,\, n-1,$$

а

$$\rho = \frac{r}{k} = \frac{8\pi^2 \mu e^2}{nh^2} r. \tag{5.80}$$

Константы c_{nl}, как обычно, могут быть определены из условия нормировки:

$$\int_0^\infty r^2 \left|R_{nl}(r)\right|^2 \mathrm{d}r = 1$$

(см. §5.9).

Из формулы (5.68) находим допустимые отрицательные значения энергии

$$E_n = -\frac{2\pi^2 \mu e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \tag{5.81}$$

($n = 1,\, 2,\, \ldots$). Эти числа совпадают со значениями, полученными Бором на основе его старой теории.

Заметим, что радиус первой боровской орбиты [Шпо84]

$$a = \frac{h^2}{4\pi^2 \mu e^2}.$$

Поэтому

$$\rho = \frac{2}{na} r$$

и, следовательно,

$$R_{nl}(r) = c_{nl} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right). \tag{5.82}$$

Объединяя формулы (5.54), (5.60) и (5.82), согласно формуле (5.75) для случая $E < 0$ получим полный набор волновых функций атома водорода

$$\psi_{lnm}(r,\, \theta,\, \varphi) = c_{lnm} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_l^{|m|}(\cos\theta) r^l \exp\left(-\frac{r}{na}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) \tag{5.83}$$

$$(n = 1,\, 2,\, \ldots;\; l = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots,\, n-1;\; m = 0,\, \pm 1,\, \pm 2,\, \ldots,\, \pm l)\,.$$

Квантовому числу l отвечает $2l+1$ собственных функций, отличающихся магнитным числом m. Поэтому собственному значению E_n, характеризуемому главным квантовым числом n, с допустимыми значениями $l = 0,\, 1,\, \ldots,\, n-1$ соответствует

$$1 + 3 + \cdots + (2n-1) = n^2$$

собственных функций. Таким образом, каждому квантовому уровню E_n атома водорода принадлежит n^2 различных состояний, т. е. здесь имеет случай n^2-кратного вырождения.

Замечание. Волновая теория атома водорода дословно переносится на случай движения единственного электрона в кулоновском поле ядра (задача двух тел). С такой задачей приходится встречаться при изучении ионизированных атомов гелия He^+, лития Li^{++} и тому подобных, получивших название *водородоподобных атомов*. Единственное различие заключается в том, что заряд ядра равен $+Ze$ и, следовательно, потенциальная энергия выражается формулой

$$V = -\frac{Ze^2}{r},$$

где Z – номер ядра в системе Менделеева. Пользуясь этим обстоятельством, нетрудно внести поправки в формулы для волновых функций [Бло04; Шпо84]. Для случая атома водорода, как известно, $Z = 1$.

5.9 Нормировка радиальных волновых функций атома водорода

Нормированные волновые функции атома водорода

$$\psi_{nlm}(r,\, \theta,\, \varphi) = \Phi_m(\varphi)\Theta_{lm}(\theta)R_{nl}(r)$$

подчинены условию

$$\iiint\limits_{\Omega} |\psi_{nlm}|^2 \,\mathrm{d}\Omega = \int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)| \,\mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta \times$$
$$\times \int_0^{\infty} r^2 \,|R_{nl}(r)|^2 \,\mathrm{d}r = 1. \quad (5.84)$$

Так как было положено (см. §5.7, 5.8)

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 \,\mathrm{d}\varphi = 1$$

и

$$\int_0^\pi |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta = 1,$$

то из формулы (5.84) вытекает, что нормированные радиальные волновые функции $R_{nl}(r)$ должны удовлетворять условию

$$\int_0^\infty r^2 |R_{nl}(r)|^2 \,\mathrm{d}r = 1. \tag{5.85}$$

Отсюда на основании формулы (5.79) получаем

$$|c_{nl}|^2 \int_0^\infty r^2 \rho^{2l} \mathrm{e}^{-\rho} \left[L_{n+1}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \mathrm{d}r = 1, \tag{5.86}$$

где

$$\rho = \frac{2}{na} r.$$

Переходя к переменной ρ в интеграле (5.86), будем иметь

$$|c_{nl}|^2 \left(\frac{na}{2}\right)^3 \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\rho} \rho^{2l+2} \left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \mathrm{d}\rho = 1.$$

Следовательно,

$$|c_{nl}| = \left(\frac{2}{na}\right)^{3/2} \left(I_{n+l,\,2l+1}\right)^{-1/2}, \tag{5.87}$$

где

$$I_{n+l,\,2l+1} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\rho} \rho^{2l+2} \left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \mathrm{d}\rho. \tag{5.88}$$

Из формулы (5.87) видно, что для того, чтобы довести выкладки до конца, необходимо найти значение интеграла [ЭУК48]

$$I_{pq} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^{q+1} \left[L_p^q(x)\right]^2 \mathrm{d}x, \tag{5.89}$$

где p и q – натуральные числа и $p \geqslant q$. Так как

$$L_p(x) = \mathrm{e}^x \frac{\mathrm{d}^p}{\mathrm{d}x^p}\left(x^p \mathrm{e}^{-x}\right) =$$

$$= (-1)^p \left[x^p - p^2 x^{p-1} + \frac{p^2 (p-1)^2}{2!} x^{p-2} + \dots + (-1)^p p!\right],$$

то

$$L_p^q(x) = \frac{\mathrm{d}^q}{\mathrm{d}x^q}\left[L_p(x)\right] = \\ = (-1)^p \frac{p!}{(p-q)!}\left[x^{p-q} - \frac{p\,(p-q)}{1!}x^{p-q-1} + \right. \\ \left. + \frac{p\,(p-1)\,(p-q)\,(p-q-1)}{2!}x^{p-q-2} + \ldots\right].$$

Следовательно,

$$I_{pq} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^{q+1} L_p^q(x) L_p^q(x) \mathrm{d}x = \\ = (-1)^2 \frac{p!}{(p-q)!}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x}\left[x^{p+1} - \frac{p\,(p-q)}{1!}x^p + \right. \\ \left. + \frac{p\,(p-1)\,(p-q)\,(p-q-1)}{2!}x^{p-1} + \ldots\right] L_p^q(x)\mathrm{d}x. \quad (5.90)$$

Рассмотрим интеграл

$$K_s = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^s L_p^q(x)\mathrm{d}x = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} x^s \frac{\mathrm{d}^q}{\mathrm{d}x^q}\left[L_p(x)\right]\mathrm{d}x, \quad (5.91)$$

где s – целое неотрицательное число. Интегрируя по частям q раз и учитывая предельное соотношение

$$\lim_{x\to+\infty} \mathrm{e}^{-x} P(x) = 0,$$

где $P(x)$ – произвольный полином, будем иметь

$$K_s = (-1)^q \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}^q}{\mathrm{d}x^q}\left(\mathrm{e}^{-x} x^s\right) L_p(x)\mathrm{d}x.$$

Применяя формулу Лейбница, находим

$$\frac{\mathrm{d}^q}{\mathrm{d}x^q}\left(\mathrm{e}^{-x} x^s\right) = (-1)^q\, \mathrm{e}^{-x} Q_s(x),$$

где $Q_s(x) = x^s - sC_q^1 x^{s-1} + s\,(s-1)\,C_q^2 x^{s-2} + \ldots$.

Путём последовательного деления полином $Q_s(x)$ можно представить в виде линейной комбинации полиномов Чебышёва-Лагерра

$$Q_s(x) = \sum_{r=0}^{s} a_{rs} L_{s-r}(x),$$

где $a_{0s} = (-1)^s$.

Следовательно, используя аддитивность операции интегрирования, получаем

$$K_s = \sum_{r=0}^{s} a_{rs} \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} L_{s-r}(x) L_p(x) \mathrm{d}x. \tag{5.92}$$

Как известно (гл. 2, §2.12-2.13), полиномы Чебышёва-Лагерра удовлетворяют условиям ортонормировки

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x} L_s(x) L_p(x) \mathrm{d}x = (p!)^2 \, \delta_{sp}, \tag{5.93}$$

где δ_{sp} – символ Кронекера. Поэтому имеем:

$$K_s = 0 \text{ при } s < p; \tag{5.94}$$

$$K_s = (-1)^p \, (p!)^2 \text{ при } s = p. \tag{5.95}$$

Для $s = p + 1$ из формулы (5.92) в силу соотношения (5.93) получим

$$K_{p+1} = a_{1,\,p+1} \, (p!)^2 \,,$$

где

$$Q_{p+q}(x) = a_{0,\,p+q} L_{p+1}(x) + a_{1,\,p+1} L_p(x) + \ldots .$$

Так как

$$Q_{p+1}(x) = x^{p+1} - (p+1)\, q x^p + \ldots$$

и

$$L_p(x) = (-1)^p \left[x^p - p^2 x^{p-1} + \frac{p^2 \, (p-1)^2}{2!} x^{p-2} + \ldots \right],$$

$$L_{p+1} = (-1)^{p+1} \left[x^{p+1} - (p+1)^2 \, x^p + \frac{(p+1)^2 \, p^2}{2!} x^{p-1} + \ldots \right],$$

то, производя соответствующие деления, будем иметь

$$a_{0,\,p+1} = (-1)^{p+1}$$

и

$$a_{1,\,p+1} = (-1)^p \, (p+1) \, (p-q+1) \, .$$

Следовательно,

$$K_{p+1} = (-1)^p \, (p+1) \, (p-q+1) \, (p!)^2 \, . \tag{5.96}$$

На основании формул (5.91), (5.94), (5.95) и (5.96) из формулы (5.90) выводим

$$I_{pq} = (-1)^p \frac{p!}{(p-q)!} \left[(-1)^p (p+1)(p-q+1)(p!)^2 - \right.$$
$$\left. -p(p-q)(p!)^2 (-1)^p\right] = \frac{(p!)^3}{(p-q)!}(2p-q+1), \quad (5.97)$$

если $p < q$.

Таким образом,

$$I_{n+l,\,2l+1} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\rho}\rho^{2l+2}\left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\right]^2 \mathrm{d}\rho = \frac{2n\left[(n+l)!\right]^3}{(n-l-1)!}. \quad (5.98)$$

Отсюда на основании формулы (5.87) находим амплитуды нормированных радиальных волновых функций атома водорода

$$|c_{nl}| = \left(\frac{2}{na}\right)^{3/2}\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}\right\}^{1/2}.$$

Следовательно, нормированные радиальные функции атома водорода с точностью до числового фазового множителя имеют вид (см. формулу 5.82)

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}} \cdot \left(\frac{2r}{na}\right)^l \mathrm{e}^{-\frac{r}{na}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right). \quad (5.99)$$

Объединяя формулы (5.54), (5.60) и (5.99), получим общее выражение для волновых функций атома водорода

$$\psi_{nlm}(r,\,\theta,\,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{n^4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\cdot\frac{(n-l-1)!}{\left[(n+l)!\right]^3}} \times$$
$$\times \frac{1}{a^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_l^{|m|}(\cos\theta)\left(\frac{2r}{na}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$$
$$(n = 1,\,2,\,\ldots;\; l = 0,\,1,\,\ldots,\,n-1;\; |m| \leqslant l).$$

5.10 Некоторые свойства волновых функций атома водорода

В §5.8 было показано, что для атома водорода основные волновые функции

$$\psi_{nlm}(r,\,\theta,\,\varphi) = \Phi_m(\varphi)\Theta_{lm}(\theta)R_{nl}(r) \quad (5.100)$$

характеризуются тремя квантовыми числами: n – главным квантовым числом; l – орбитальным квантовым числом и m – магнитным квантовым числом. Из определения волновой функции вытекает, что справедливо уравнение

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm}, \tag{5.101}$$

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона системы.

Можно доказать [Бло04], что волновые функции ψ_{nlm} одновременно удовлетворяют уравнениям

$$\hat{M}^2\psi_{nlm} = l\,(l+1)\,\frac{h^2}{4\pi^2}\psi_{nlm}$$

и

$$\hat{M}_z\psi_{nlm} = m\frac{h}{2\pi}\psi_{nlm},$$

где $\hat{M}^2$ – оператор квадрата момента импульса электрона; $\hat{M}_z$ – оператор проекции момента этого импульса на произвольно выбранную ось O_z.

Следовательно, в состоянии, определяемом тройкой квантовых чисел $(n,\, l,\, m)$, три динамические переменные: энергия электрона, квадрат момента импульса его и проекция момента импульса на ось Oz, одновременно измеримы и имеют определённые значения:

$$E_n = -\frac{2\pi^2\mu e^4}{n^2h^2};\ M_l^2 = \frac{h^2}{4\pi^2}l\,(l+1)\,;\ M_z^2 = \frac{h}{2\pi}m.$$

Таким образом, главное квантовое число n определяет энергию электрона (энергетический уровень); орбитальное квантовое число l – полный момент количества движения его и магнитное квантовое число m – проекцию момента количества движения на некоторую координатную ось Oz.

В атомной физике принято обозначать состояния атома водорода, соответствующие главному квантовому числу $n = 1,\, 2,\, 3,\, \ldots$ – цифрами $1,\, 2,\, 3,\, \ldots,$ а состояния, отвечающие орбитальному числу $l = 0,\, 1,\, 2,\, 3,\, 4,\, 5,\, \ldots,$ – буквами $s,\, p,\, d,\, f,\, g,\, h,\, \ldots$. Так, например, при $n = 1$ и $l = 0$ имеем состояние $1s$, а при $n = 1$ и $l = 1$ получаем состояние $1p$ и т. д.

Согласно смыслу волновой функции электрону можно приписать пространственное распределение с плотностью «электронного облака» (плотность вероятности) в любой точке пространства, равной значению квадрата модуля волновой функции для этой точки.

Так как координаты $r,\, \theta,\, \varphi$ независимы, то в силу теоремы умножения вероятностей угловое распределение электронной плотности для состояния $(n,\, l,\, m)$ даётся формулой

$$W_{lm}(\theta,\, \varphi) = \left|Y_{lm}(\theta,\, \varphi)\right|^2 = \left|\Phi_m(\varphi)\right|^2\left|\Theta_{lm}(\theta)\right|^2.$$

Как известно,

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

поэтому

$$|\Phi_m(\varphi)| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Следовательно, плотность вероятности W_{lm} не зависит от угла φ и равна

$$W_{lm}(\theta,\,\varphi) = \frac{1}{2\pi}\left|\Theta_{lm}(\theta)\right|^2, \tag{5.102}$$

где [см. формулу (5.60)]

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta). \tag{5.103}$$

Из формулы (5.102) следует, что вероятность нахождения электрона где-то в телесном угле $\mathrm{d}\omega = \sin\theta\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}\theta$ около луча $(\theta,\,\varphi)$ есть

$$W_{lm}(\theta)\mathrm{d}\omega.$$

Так как $W_{lm}(\theta)$ не зависит от φ, то формула (5.102) даёт распределение угловой координаты θ для любого меридиана $\varphi = \mathrm{const}$.

Учитывая, что

$$P_0^0(\cos\theta) = 1;$$

$$P_1^0(\cos\theta) = \cos\theta;$$

$$P_1^1(\cos\theta) = \sin\theta;$$

. . . .

для угловой плотности вероятностей $W_{lm}(\theta)$ получаем следующие выражения: для s-состояния $(l = 0,\, m = 0)$

$$W_{00}(\theta) = \frac{1}{4\pi} = \mathrm{const};$$

для p-состояний $(l = 1;\; m = 0,\, \pm 1)$ –

$$W_{10}(\theta) = \frac{3}{4\pi}\cos^2\theta;$$

$$W_{1,\,\pm 1}(\theta) = \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta$$

и т. д. Графики плотности вероятностей $W_{lm}(\theta)$ для $l = 0, 1$, в полярных координатах (w, θ) изображены на рис. 5.8 и 5.9.

Изучим теперь распределение электрона по дальности r в состоянии (n, l, m) независимо от направления (θ, φ). Вероятность нахождения электрона на расстоянии между r и $r + \mathrm{d}r$, при условии, что его угловые координаты имеют значения между θ и $\theta + \mathrm{d}\theta$ и соответственно между φ и $\varphi + \mathrm{d}\varphi$, равна

$$|\psi_{nlm}|^2 \, \mathrm{d}\Omega = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \, |R_{nl}(r)|^2 \, r^2 \sin\theta \mathrm{d}\varphi \mathrm{d}\theta \mathrm{d}r. \qquad (5.104)$$

Интегрируя выражение (5.104) по переменным θ и φ в пределах от $\theta = 0$ до $\theta = \pi$ и от $\varphi = 0$ до $\varphi = 2\pi$, в силу нормировки функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ получаем, что вероятность обнаружения электрона на расстоянии между r и $r + \mathrm{d}r$ независимо от угловых координат θ и φ есть

$$W_{nl}(r)\mathrm{d}r = r^2 \, |R_{nl}(r)|^2 \, \mathrm{d}r. \qquad (5.105)$$

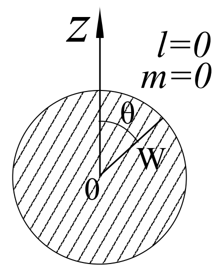

Рис. 5.8:

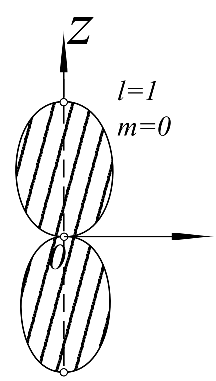

Рис. 5.9:

Функция

$$W_{nl}(r) = r^2 \, |R_{nl}(r)|^2 \, , \qquad (5.106)$$

где [см. формулу (5.99)]

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{4}{n^3 a^3} \cdot \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \cdot \left(\frac{2r}{na}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right), \qquad (5.107)$$

представляет собой плотность вероятности распределения дальности r электрона от ядра в состоянии (n, l, m).

Для $1s$-состояния $(n = 1, l = 0)$ имеем

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) L_1^1\left(\frac{2r}{a}\right) = -\frac{2}{a^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right); \qquad (5.108)$$

отсюда

$$W_{10}(r) = \frac{4}{a^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

(рис. 5.10).

Найдём максимальное значение плотности вероятности $W_{10}(r)$ для состояния $1s$. Дифференцируя функцию (5.107), получим

$$W_{10}'(r) = \frac{4}{a^3}\left(2r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}} - \frac{2}{a}r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\right) = \frac{8}{a^3} r\,(a-r)\exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

Так как $W_{10}'(a) = 0$, причём $W_{10}'(r) > 0$ при $r < a$ и $W_{10}'(r) < 0$ при $r > a$, то плотность вероятности $W_{10}(r)$ имеет наибольшее значение при $r = a$. Таким образом, для атома водорода в состоянии $1s$ наивероятнейшее расстояние его электрона от ядра совпадает с радиусом a первой орбиты Бора.

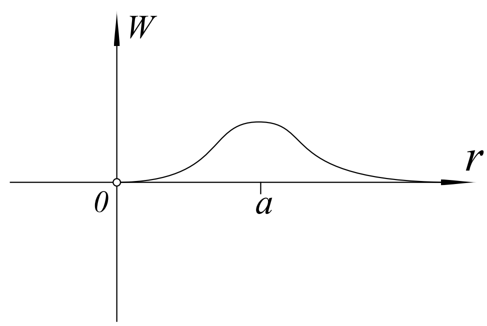

Рис. 5.10:

Для сравнения вычислим среднее значение $\overline{r}$ электрона от ядра в состоянии $1s$. Согласно общему определению (гл. 4, §4.7) имеем

$$\overline{r} = \iiint\limits_{\Omega} r\left|\psi_{1,0,0}\right|^2 \mathrm{d}\Omega = \int_0^\infty r^3 R_{1,0}^2(r)\mathrm{d}r.$$

Отсюда на основании формулы (5.108) получим

$$\overline{r} = \frac{4}{a^3}\int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)\mathrm{d}r.$$

Полагая

$$\frac{2r}{a} = \rho \text{ и } r = \frac{a}{2}\rho,$$

находим

$$\overline{r} = \frac{4}{a^3} \cdot \frac{a^4}{16} \int_0^\infty \rho^3 \mathrm{e}^{-\rho} \mathrm{d}\rho = \frac{a}{4}\Gamma(4) = \frac{a}{4}3! = \frac{3}{2}a.$$

Таким образом, для атома водорода среднее расстояние электрона от ядра в состоянии $1s$ равно полутора радиусам первой боровской орбиты.

Аналогично может быть изучено распределение электрона по дальности для атома водорода в других состояниях его.

5.11 Понятие о теории возмущения

Точное решение задачи о нахождении квантовых уравнений системы возможно в немногих случаях. Даже для простейшей атомной системы – атома водорода, состоящего из ядра и одного электрона (задача двух тел), вычисление собственных значений энергии и соответствующих волновых функций связано с большими математическими трудностями (§5.6–5.9). Для следующего по сложности атома гелия, состоящего из ядра и двух электронов (задача трёх тел), эта задача не поддаётся точному решению. Поэтому большое значение приобретают приближённые методы нахождения собственных значений и собственных функций гамильтониана системы.

Один из таких приближённых методов состоит в следующем: предполагается, что точный оператор энергии $\hat{H}$ системы мало отличается от оператора Гамильтона $\hat{H}^\circ$ некоторой, более простой системы.

Можно положить

$$\hat{H} = \hat{H}^\circ + \varepsilon \hat{W}, \tag{5.109}$$

где $\hat{W}$ – известный оператор и ε – малый числовой параметр. Малая поправка $\varepsilon\hat{W}$ обычно называется *энергией возмущения* (короче *возмущением*). Поэтому сам метод получил название *теории возмущения*. Ограничимся рассмотрением случая дискретного спектра оператора $\hat{H}$. Пусть для оператора $\hat{H}^\circ$, совпадающего с $\hat{H}$ при $\varepsilon = 0$, известна совокупность всех его собственных значений E_n° $(n = 1,\, 2,\, \ldots)$ и полная система соответствующих собственных функций ψ_n° $(n = 1,\, 2,\, \ldots)$, причём для простоты будем считать, что все собственные значения E_n° простые, т. е. каждому собственному значению E_n° принадлежит лишь одна собственная функция ψ_n°, с точностью до коэффициента пропорциональности. Собственные значения E_n и собственные функции ψ_n $(n = 1,\, 2,\, \ldots)$, где $E_n \to E_n^\circ$ и $\psi_n \to \psi_n^\circ$ при $\varepsilon \to 0$, определяются из точного уравнения

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{5.110}$$

Разложим величины E_n и ψ_n, являющиеся функциями параметра ε, в степенные ряды:

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \ldots; \tag{5.111}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \varepsilon\psi_n^{(1)} + \varepsilon^2\psi_n^{(2)} + \dots, \tag{5.112}$$

где коэффициенты $E_n^{(m)}$, $\psi_n^{(m)}$ $(m = 0,\ 1,\ 2,\ \dots)$ не зависят от ε, причём $E_m^{(0)} = E_n^\circ$ и $\psi_n^{(0)} = \psi_n^\circ$. Подставляя выражения (5.111) и (5.112) в уравнение (5.110) и учитывая формулу (5.109), будем иметь

$$\left(\hat{H}^\circ + \varepsilon\hat{W}\right)\sum_{m=0}^{\infty}\psi_n^{(m)}\varepsilon^m \equiv \sum_{k=0}^{\infty}E_n^{(k)}\varepsilon^k\sum_{m=0}^{\infty}\psi_n^{(m)}\varepsilon^m.$$

Отсюда, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях параметра ε в левой и правой частях последнего тождества, получим бесконечную систему уравнений:

$$\left.\begin{array}{c}
\hat{H}^\circ\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)};\\
\left(\hat{H}^\circ - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} - \hat{W}\psi_n^{(0)};\\
\left(\hat{H}^\circ - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} - \hat{W}\psi_n^{(1)},\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots
\end{array}\right\} \tag{5.113}$$

из которой можно последовательно определить $E_n^{(m)}$ и $\psi_n^{(m)}$ $(m = 0,\ 1,\ 2,\ \dots)$.

Первое уравнение системы (5.113) будет удовлетворено, если положить

$$E_n^{(0)} = E_n^\circ; \quad \psi_n^{(0)} = \psi_n^\circ.$$

Для решения второго уравнения предположим, что собственные функции ψ_n° $(n = 1,\ 2,\ \dots)$ образуют полную ортонормированную систему. Тогда можно положить

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m=1}^{\infty}C_m^{(1)}\psi_m^\circ, \tag{5.114}$$

где C_m $(m = 1,\ 2,\ \dots)$ – коэффициенты Фурье, подлежащие определению. Функция $\hat{W}\psi_n^{(0)}$ также разлагается в ряд

$$\hat{W}\psi_n^{(0)} = \sum_{m=1}^{\infty}W_{nm}\psi_m^\circ, \tag{5.115}$$

где

$$W_{nm} = \int_\Omega \psi_m^{\circ *}\hat{W}\psi_n^\circ \mathrm{d}\Omega.$$

Подставляя выражение (5.114) и (5.115) во второе уравнение системы (5.113), получим

$$\left(\hat{H}^\circ - E_n^{(0)}\right)\sum_{m=1}^{\infty}C_m^{(1)}\psi_m^\circ = E_n^{(1)}\psi_n^\circ - \sum_{m=1}^{\infty}W_{nm}\psi_m^\circ$$

или, используя первое уравнение системы (5.113),

$$\sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)} \left(E_m^\circ - E_n^\circ\right) \psi_m^\circ = E_n^{(1)} \psi_n^\circ - \sum_{m=1}^{\infty} W_{nm} \psi_m^\circ. \tag{5.116}$$

Приравнивая коэффициенты при ψ_m° $(m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$ в левой и правой частях равенства (5.116), будем иметь

$$0 = E_n^{(1)} - W_{nm} \text{ при } m = n$$

и

$$C_m^{(1)} \left(E_m^\circ - E_n^\circ\right) = -W_{nm} \text{ при } m \neq n.$$

Следовательно,

$$E_n^{(1)} = W_{nn}$$

и

$$C_m^{(1)} = \frac{W_{nm}}{E_n^\circ - E_m^\circ} \ \left(m \neq n\right).$$

Недостающий коэффициент $C_n^{(1)}$ можно определить из условия ортонормировки функций ψ_n. Имеем

$$\psi_n = \psi_n^\circ + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)} \psi_m^\circ + \ldots$$

и

$$\psi_n^* = \psi_n^{\circ *} + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)*} \psi_m^{\circ *} + \ldots.$$

Отсюда, учитывая ортогональность собственных функций ψ_m° и ψ_k° при $m \neq k$ и их нормированность, получаем

$$\begin{aligned} \int_\Omega \psi_n^* \psi_n \mathrm{d}\Omega = \int_\Omega \psi_n^{\circ *} \psi_n^\circ \mathrm{d}\Omega + \\ + \varepsilon \left(C_n^{(1)} \int_\Omega \psi_n^{\circ *} \psi_n^\circ \mathrm{d}\Omega + C_n^{(1)*} \int_\Omega \psi_n^{\circ *} \psi_n^\circ \mathrm{d}\Omega \right) + \\ + \cdots = 1 + 2\varepsilon \mathrm{Re} C_n^{(1)} + \ldots \end{aligned} \tag{5.117}$$

Так как последнее выражение должно быть равно единице при любом ε, то, следовательно,

$$\mathrm{Re} C_n^{(1)} = 0.$$

Отсюда, считая коэффициент действительным (этого можно добиться путём умножения разложения (5.114) на подходящий множитель)

$$C_n^{(1)} = 0.$$

Таким образом, первое приближение задачи с точностью до членов порядка ε даётся формулами:

$$\left.\begin{aligned}
&E_n = E_n^\circ + \varepsilon W_{nn} + \ldots;\\
&\psi_n = \psi_n^\circ + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{W_{nm}}{E_n^\circ - E_m^\circ}\psi_m^\circ + \ldots\\
&(n = 1,\, 2,\, \ldots)
\end{aligned}\right\}$$

где штрих над суммой $\sum$ обозначает, что пропускаются значение $m = n$.

Аналогично, используя третье уравнение системы (5.113), можно построить второе приближение задачи с точностью до членов порядка ε^2 и т. д.

При наличии вырождения метод возмущения усложняется. Теория возмущений разработана также для случая непрерывного спектра.

Упражнения к пятой главе

1. Изучить движение частицы с энергией E при наличии потенциального барьера
$$V = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0\\ U & \text{при } x > 0\end{cases}$$
где $U > E$.

2. Найти средние значения $\overline{x^2}$ и $\overline{p^2}$ для гармонического осциллятора с собственной энергией E_n при $n = 0,\, 1,\, 2$.

3. Определить квантовые уровни энергии и волновые функции для трёхмерного гармонического осциллятора с потенциальной энергией
$$V = \frac{k_1}{2}x^2 + \frac{k_2}{2}y^2 + \frac{k_3}{2}z^2,$$
где k_1, k_2, k_3 – положительные числа.

4. Построить нормированные сферические волновые функции атома водорода для s-состояний ($l = 0$), p-состояний $l = 1$ и d-состояний ($l = 2$).

5. Найти распределение угловой координаты θ для d-электронов ($l = 2$) атома водорода.

6. Построить радиальные волновые функции атома водорода для $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $3d$-состояний.

7. Найти средние значения $\overline{r^2}$ и $\overline{r^{-2}}$ для атома водорода в состоянии $1s$.

8. Найти средние значения $\overline{r}$ и $\overline{r^2}$ для атома водорода в состояниях $2s$ и $2p$.
   Чему равны наивероятнейшие значения r и r^2 в этих состояниях?

9. Найти средние значения импульсов $\overline{p_r}$, $\overline{p_\theta}$, $\overline{p_\varphi}$ и их квадратов $\overline{p_r^2}$, $\overline{p_\theta^2}$, $\overline{p_\varphi^2}$ в состоянии $1s$.

10. Найти собственные функции и собственные значения оператора проекции момента количества движения на ось Oz
$$\hat{M}_z = \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

11. Найти собственные функции и собственные значения оператора квадрата момента количества движения
$$\hat{M}^2 = \frac{h^2}{4\pi^2}\Lambda,$$
где
$$\Lambda = -\left\{\frac{1}{\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$
(*оператор Лежандра*).

12. Определить собственные значения энергии и соответствующие собственные функции для *свободного жёсткого ротатора*, состоящего из двух атомов массами m_1 и m_2, находящимися на неизменном расстоянии R.

Список литературы

[Бау37] Э. Бауэр. *Введение в теорию групп и ее приложения к квантовой физике.* М.–Л.: ОНТИ, 1937.

[Бло04] Д. И. Блохинцев. *Основы квантовой механики.* Санкт-Петербург : Лань, 2004.

[Вул67] Б. З. Вулих. *Введение в функциональный анализ.* М.: Наука, 1967.

[Ган02] Ф. Р. Гантмахер. *Лекции по аналитической механике.* М.: Физматлит, 2002.

[Гел98] И. М. Гельфанд. *Лекции по линейной алгебре.* М.: Добросвет МЦНМО, 1998.

[Дже48] Д. Джексон. *Ряды Фурье и ортогональные полиномы.* М.: Издательство иностранной литературы, 1948.

[Кур56] Р. Курант. *Уравнения с частными производными.* М.:Мир, 1956.

[КФ89] А.Н. Колмогоров и С. В. Фомин. *Элементы теории функций и функционального анализа.* М.: Наука, 1989.

[Лев56] В. И. Левин. *Методы математической физики.* М.: Учпедгиз, 1956.

[ЛС65] Л. А. Люстерник и В. И. Соболев. *Элементы функционального анализа.* Т. 3. М.: Наука, 1965.

[Ней64] Дж. Нейман. *Математические основы квантовой механики.* М.:Наука, 1964.

[Сми74] В. И. Смирнов. *Курс высшей математики.* М.: Наука, 1974.

[Тол80] Г. П. Толстов. *Ряды Фурье.* М.: Наука, 1980.

[ТС04] А. Н. Тихонов и А. А. Самарский. *Уравнения математической физики.* М.: Наука, 2004.

[Фок03] В. А. Фок. *Начала квантовой механики.* М.-Ижевск:РХД, 2003.

[Хин51] А. Я. Хинчин. *Математические основания квантовой стастистики.* М.-Л.:Гостехиздат, 1951.

[Шпо84] Э. В. Шпольский. *Атомная физика.* М.: Наука, 1984.

[ЭУК48] Г. Эйринг, Дж. Уолтер и Дж. Кимбалл. *Квантовая химия.* М.:ИЛ, 1948.

[ЯЭ59] Е. Янке и Ф. Эмде. *Таблицы функций с формулами и кривыми.* М.: Физматгиз, 1959.

Оглавление