Ostatnio mówiliśmy o metodzie separacji zmiennych. Chcielibyśmy przełożyć trudne równanie typu (atom wodoru)

$$\psi_{xx} + \psi_{yy} + \psi_{zz} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{c^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0.$$

Na kilka prostych, postulując

$$\psi(x,y,z) = \psi^x(x)\cdot\psi^y(y)\cdot\psi^z(z)$$

lub

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \psi^r(r)\cdot\psi^\theta(\theta)\cdot\psi^\varphi(\varphi).$$

I otrzymać w efekcie trzy równania drugiego rzędu jednej zmiennej.

Równania można także przedstawić w formie bardziej znajomej

$$a(t)\ddot{x} + b(t)\dot{x} + c(t)x = 0,$$

lub mniej znajomej,

$$-\frac{d}{dt}\left(p(t)\frac{dx}{dt}\right) + q(t)x(t) = \lambda r(t)x(t).$$

Przykład 1. *Równanie Bessela:*

$$x^2 y_{xx} + x y_x (x^2 - \alpha^2) y(x) = 0.$$

Można zapisać też jako

$$\frac{d}{dx}\left(x\frac{dy}{dx}\right) + \left(x - \frac{\alpha^2}{x}\right)y(x) = 0,$$

czyli

$$x\frac{d}{dx}\left(x\frac{dy}{dx}\right) + x^2 y(x) = \alpha^2 y(x).$$

Ta postać równania pomocna jest przy analizie rozwiązań, zależności od warunków brzegowych oraz dopuszczalnych wartości parametru λ.

$$L(y) = -\frac{1}{r(x)}\left(\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{dy}{dx}\right) + q(x)y(x)\right).$$

Dlaczego taka postać?

Wartości własne mają interpretację fizyczną a wektory własne mogą tworzyć bazę, w której chcielibyśmy rozpisać warunki początkowe. Język, który to opisuje

to oczywiście algebra.
Pamiętamy, że jeżeli $\langle .|. \rangle$ - iloczyn skalarny, a L - operator taki, że

$$\underset{f,g}{\forall} \langle f|Lg\rangle - \langle Lf|g\rangle = 0,$$

to wartości własne są rzeczywiste a wektory własne są prostopadłe. Prostopadłość daje nam bazę, możemy więc pytać jak taka baza nadaje się do przedstawienia w niej warunków brzegowych i co rozumiemy przez "przedstawienie". Co robić w sytuacji, gdy jednej wartości własnej odpowiada kilka wektorów własnych (klatki jordanowskie, poziomy energetyczne w atomie wodoru - orbitale s,p,d. . .) dla tego samego n.
Mówiliśmy ostatnio jakie warunki powinny być spełnione, aby operator

$$L(v) = -\frac{1}{r(x)}\left(\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{dv}{dx}\right) + q(x)v(x)\right)$$

był samosprzężony. Wyszedł warunek

$$p(x)\left(f'(x)\overline{g(x)} - f(x)\overline{g'(x)}\right)_a^b = \langle f|Lg\rangle - \langle Lf|g\rangle .$$

Pytanie 1. *Mamy operator L i jego wartości i wektory własne*

$$L\psi_n = \lambda_n\psi_n.$$

Przysłano nam smsem funkcję f i pytamy o to, że da się utworzyć szereg $\sum_n a_n\psi_n$ taki, żeby

$$\sum_n (a_n\psi_n - f) \overset{n->\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Czyli żeby był zbieżny jednostajnie. Jeżeli dobierzemy sobie normę, to piszemy tak

$$\|\sum a_n\psi_n - f\| \to 0.$$

Jest to pytanie o możliwość dobrania współczynników a_n. Jak to zrobić?

Weźmy funkcję

$$E(a_1, a_2, ..., a_N) = \left\|\sum_{n=1}^{N} a_n\psi_n - f\right\|^2 .$$

Pytamy o taki zestaw $a_1, \dots, a_N$, dla którego funkcja E osiąga minimum. A potem zbudujemy ciąg cyferek.

$$E(a_1), E(b_1, b_2), E(c_1, c_2, c_3), \dots E(a'_1, a'_2 \dots, a'_N)$$

i pokażemy, że taki ciąg dąży (albo nie) do zera jak $N \to \infty$. Uwaga, dla każdego N, zestaw cyferek może być inny! Przykłady na znajdowanie a_i były przy okazji szeregów fouriera. Załóżmy, że

$$\langle \psi_n | \psi_k \rangle = \delta_{nk}.$$

Wówczas

$$\begin{aligned} E(a_1, \ldots, a_n) = \left\langle f - \sum_{n=1}^{N} a_n \psi_n | f - \sum_{k=1}^{N} a_k \psi_k \right\rangle = \langle f | f \rangle + \\ - \left\langle f | \sum_{k=1}^{N} a_k \psi_k \right\rangle - \left\langle \sum_{n=1}^{N} a_n \psi_n | f \right\rangle + \\ + \left\langle \sum_{n=1}^{n} a_n \psi_n | \sum_{k=1}^{N} a_k \psi_k \right\rangle = \\ = \|f\|^2 - \sum_{k=1}^{N} \overline{a_k} \langle f | \psi_k \rangle + \\ - \sum_{n=1}^{N} a_n \langle \psi_n | f \rangle + \sum_{n=1}^{N} a_n \sum_{k=1}^{N} \overline{a_k} \langle \psi_n | \psi_k \rangle . \end{aligned}$$

Ale

$$\sum_{n=1}^{N} a_n \sum_{k=1}^{N} \overline{a_k} \langle \psi_n | \psi_k \rangle = \sum_{n=1}^{N} a_n \overline{a_n} = \sum_{n=1}^{N} |a_n|^2.$$

Przenumerujemy wyrażenie z k, w efekcie:

$$E(a_1, \ldots, a_N) = \|f\|^2 - \sum_{n=1}^{N} \overline{a_n} \langle f | \psi_n \rangle - \sum_{n=1}^{N} a_n \langle \psi_n | f \rangle + \sum_{n=1}^{N} a_n \overline{a_n}.$$

Traktując to jak przepis na a_n, widać, że dla

$$a_n = \langle f | \psi_n \rangle ,$$

E będzie najmniejsze ($\langle \psi_n | f \rangle = \overline{\langle f | \psi_n \rangle}$).
I wtedy $0 \leqslant \|f\|^2 - \sum_{n=1}^{N} |a_n|^2$, więc

$$\|f\|^2 \geqslant \sum_{n=1}^{N} \|a_n\|^2.$$

Czyli o ile f jest klasy L^2, to szereg po prawej stronie jest zbieżny, czyli

$$\lim_{n \to \infty} a_n = 0.$$

Uwaga: a_n nie ulegnie już zmianie. Widzimy też, że przepis na a_n, z wykorzystaniem iloczynu skalarnego daje nam, dla ustalonego N najbardziej optymalne przybliżenie.
Zauważmy, że nie pokazaliśmy jeszcze, że ciąg (E) dąży do zera. Pokazaliśmy zbieżność ciągu

$$\|a_n\|^2 = \| \langle f|\psi_n\rangle \|^2,$$

ale chcielibyśmy pokazać, że

$$\sum_{n=1}^{N} a_n\psi_n \to f,$$

cyzli by w granicy na przykład

$$\sum_{n=1}^{\infty} \|a_n\|^2 = \|f\|^2.$$

Co więcej, nasze rozważania dotyczyły sytuacji, w której indeks n jest na przykład dyskretny i ograniczony od dołu. Chcemy zatem odpowiedzieć na następne pytanie. Czy

$$\sum_{k=0}^{N} c_k\psi_k,$$

jest zbieżny (i jak) do $f \in L^2$, jeżeli

a) $c_k = \langle f|\psi_k\rangle$

b) $L\psi_k = \lambda\psi_k$

c) $\langle Lf|g\rangle = \langle f|Lg\rangle$

gdzie $Lf = -\frac{1}{r(x)}\left((pf')' + qf\right)$, $p(x)\left[f'\overline{g} - f\overline{g'}\right]_a^b = 0$. Zacznijmy od pytania

Pytanie 2. *Kiedy wartości własne operatora Sturma-Liouville'a są nieujemne? (czy też ograniczone od dołu). W równaniu Schrödingera pojawia się warunek*

$$H\psi_n = E_n\psi_n,$$

jeżeli cyferkę E_n chcemy interpretować jako energię, to powinna być ograniczona od dołu.

Stwierdzenie 1. *Wartości własne operatora Sturma-Liouville'a są nieujemne.*

Dowód. Niech $R(u) = \frac{\langle Lu|u\rangle}{\langle u|u\rangle}$ będzie funkcją z $L^2([a,b]) \to \mathbb{R}$. Zauważmy, że $R(u)$ nie jest normą operatora. ($\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sup_x \frac{\langle Ax|Ax\rangle}{\langle x|x\rangle}$).

Obserwacja: jeżeli za u wstawimy ψ_n, to dostaniemy

$$R(\psi_n) = \frac{\langle L\psi_n|\psi_n\rangle}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle} = \lambda_n \frac{\langle\psi_n|\psi_n\rangle}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle} = \lambda_n.$$

Wstawmy teraz do $R(u)$ funkcję f

$$R(f) = \frac{\langle Lf|f\rangle}{\langle f|f\rangle},$$

więc

$$\langle f|f\rangle R(f) = \langle Lf|f\rangle = \int_a^b \Big(-(pf')' - qf\Big)\overline{f}dx =$$

$$= -pf'\,\overline{f}\Big|_a^b + \int_a^b \left(pf'\overline{f'} - qf\overline{f}\right)dx.$$

Zatem

$$R(f) = -\frac{(pf')\overline{f}|_a^b}{\langle f|f\rangle} + \frac{\int_a^b p\|f'\|^2 - q\|f\|^2}{\langle f|f\rangle}.$$

Jeżeli oba człony będą większe od zera, to

$$R(f) > 0 \implies \lambda > 0.$$

□

Widzimy zatem, że jeżeli $\underset{f}{\forall}$

$$-(pf')\,\overline{f}|_a^b \geqslant 0, g(x) \leqslant 0,$$

to wtedy $R(f) > 0$ pod warunkiem, że L jest samosprzężony. Czyli

$$\underset{f,g}{\forall} p\left(f'\overline{g} - f\overline{g'}\right)\Big|_a^b = 0, \quad Lf = -\frac{1}{r}\Big(qf + (pf')'\Big).$$

Nie zapominajmy, że był jeszcze jeden warunek związany z ilością wektorów własnych (w sensie wymiaru przestrzeni) dla danej wartości własnej:

$$p(x)\left(f(x)g'(x) - f'(x)g(x)\right) = 0 \underset{x\in[a,b]}{\forall}.$$

Przykład 2. *Trudno uzyskane współczynniki nazwać inaczej niż zagmatwanymi. Zobaczymy, czy dla prostych operatorów wartości własne rzeczywiście są ograniczone z dołu. Niech* $L = -\frac{d^2}{dx^2}$*, szukamy wektorów własnych dla warunków* $\psi(0) = 0, \quad \psi(1) = 0$*. Czyli*

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \lambda\psi = 0.$$

Czyli $q = 0$, $p = 1$*. Warunek*

$$p(x)\left(f'(x)\overline{g} - f\overline{g'}\right)_0^1 = 1 \cdot \left[\psi_1'(x)\overline{\psi_2}(x) - \psi_1(x)\overline{\psi_2'}(x)\right]_0^1.$$

Dla $\begin{matrix} L\psi_1 = \lambda_1\psi_1 \\ L\psi_2 = \lambda_2\psi_2 \end{matrix}$ *ale przy warunkach* $\begin{matrix} \psi(0) = 0 \\ \psi(1) = 0 \end{matrix}$ *widać, że jest ok. Co więcej,*

$$-\left(p(x)\psi'(x)\right)\overline{\psi}(x)\big|_0^1 \geqslant 0$$

też jest ok.
Sprawdzamy

$$\psi'' + \lambda\psi = 0, \quad \begin{matrix} \psi(0) = 0 \\ \psi(1) = 0 \end{matrix}.$$

- *Jeżeli* $\lambda < 0$*, to mamy rozwiązanie typu*

  $$\psi(x) = A_k e^{-k^2 x} + B_k e^{k^2 x},$$

  ale warunek brzegowy nam daje sprzeczność!

- *Jeżeli* $\lambda = 0$*, to rozwiązanie jest*

  $$\psi = Ax + B.$$

  Wtedy z warunkiem brzegowym wyjdzie, że $\psi = 0$

- *Jeżeli* $\lambda > 0$*, to rozwiązanie*

  $$\psi(x) = A_k \sin\left(\sqrt{k^2}x\right) + B_k \cos\left(\sqrt{k^2}x\right).$$

  Warunki brzegowe zostawią

  $$A_k \sin(k) = 0.$$

  Więc $k = n\pi$ *dla* n *całkowitych, czyli*

  $$\lambda_n = n^2\pi^2$$

  dla n *naturalnych.*

Pokazaliśmy więc, że wartości własne tego operatora są ograniczone od dołu.

W następnym odcinku *Dla powyższego przykładu zauważymy, że* $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \ldots$. *Gdyby była to prawda dla każdego operatora Sturma-Liouville'a, oznaczałoby to, że możemy wartości własne uporządkować i mieć na przykład gwarancję, że poziomy energetyczne będą rosnąć.*