工 程 数 学 讲 义

李小飞

2022 年 4 月 3 日

第一章　绪论（4 学时）

- 主要内容：微积分相关内容，常微分方程相关内容及数学物理方法介绍。
- 重点和难点：常微分方程求解方法及 Fourier 级数。
- 掌握：欧拉方程求解方法、简单模型的建立方法。
- 理解：数学物理常用物理定律和数学知识。
- 了解：向量空间的加法和正交完全集。

现代科学和工程中的大量数学和物理模型通常用方程进行描述，如牛顿第二定律和万有引力定律等。其方程是显式描述物理量之间的关系。物理学领域的多数基本方程则是微分方程。如经典力学谐振动方程、电磁场理论中的麦克斯韦方程、量子力学薛定谔方程等。学习和研究各种微分方程的求解方法是科学和工程领域中的一个重要任务。

1.1　常微分方程

1.1.1　常微分方程模型

定义 1.1.1. 微分方程：是指含未知函数及其导数的方程。

$$f\left(x, t, u, u_t, u_{tt}, \dots u_{t\dots t}, u_x, u_{xx}, \dots, u_{x\dots x}\right) = \mathbf{0} \tag{1.1}$$

一般情况下，物理量（u）表现为随时间和空间的变化。解微分方程就是求出这个未知函数 u=u(x,t)。根据阶的不同，又分为一阶微分方程、二阶微分方程、和高阶常微分方程。如果未知函数是单变量函数，称为常微分方程，如果是多变量函数，则称为偏微分方程

评论. 微分方程形式多样，求解方法也各不相同，最基本的方法是分离变量法。

衰减与增长模型：一阶常微分方程

衰减与增长模型是自然界和人类社会客观存在的现象。数学函数常用指数增长和指数衰减描述，速度大于零为增长模型，速度小于零则为衰减模型。

例 1.1.1. 求解放射性物质衰减模型：

$$\frac{du}{dt} = -ru, \qquad u(t_0) = u_0$$

证明. 方程可分离变量：

$$\frac{du}{u} = -rdt$$
$$\ln u = -rt + C$$
$$u(t) = C'exp(-rt)$$

令 $t = 0$, 有 $C' = u_0$，得定解：

$$u(t) = u_0 exp(-rt)$$

注. 注意积分有零次项！这是个一阶常系数齐次方程

显然，当 $r > 0$ 时, 有 $t \to \infty$，$u(t) \to 0$, 衰减模型中的一个重要问题是求半衰期 T

$$\frac{1}{2}u_0 = u_0 exp(-rT)$$
$$T = \frac{1}{r}\ln 2 \approx \frac{1}{r} \times 0.6931$$

当 $r < 0$ 时, 就是人口增长的马尔萨斯模型。若给出两个时间点的人口数，就可以求得 u_0 和人中增长率 $-r$

例 1.1.2. 求人口增长的逻辑斯蒂模型：

$$\frac{du}{dt} = ru(1 - \frac{u}{K}), \qquad u(t_0) = u_0$$

证明. 方程可分离变量：

$$\frac{1}{u(1-u/K)}du = rdt$$
$$\frac{u/K + (1-u/K)}{u(1-u/K)}du = rdt$$
$$(\frac{1}{K-u} + \frac{1}{u})du = rdt$$
$$-\ln(K-u) + \ln u = rt + C$$

$$\begin{aligned}
\ln \frac{u}{K-u} &= rt + C \\
\frac{u}{K-u} &= \exp(rt + C) \\
u(t) &= \frac{K}{1+\exp(-rt-C)}
\end{aligned}$$

令 $t=0$, 有 $C = \ln \frac{u_0}{K-u_0} - rt_0$，得定解:

$$u(t) = \frac{K}{1+(\frac{K}{u_0}-1)\exp(-r(t-t_0))}$$

注. 注意变量代换产生负号! 分离变量法是求解一阶微分方程最基本的方法。

例 **1.1.3.** 求解如下一阶微分方程

$$\frac{dy}{dx} = f\left(\frac{y}{x}\right)$$

证明. 变量代换后可分离变量，令 $\frac{y}{x} = u$, 有: $y = xu$

求微分: $\frac{dy}{dx} = u + x\frac{du}{dx}$

代回原方程: $u + x\frac{du}{dx} = f(u)$

整理为: $\frac{du}{dx} = \frac{f(u)-u}{x}$ ，是可分离变量方程

当: $f(u) - u \neq 0$ 时,

$$\int \frac{du}{f(u)-u} = \int \frac{dx}{x}$$

注. f（u）-u 决定了方程求解的难度

例 **1.1.4.** 求解如下一阶微分方程

$$\left(x - y\cos\frac{y}{x}\right)dx + x\cos\frac{y}{x}dy = 0$$

证明. 变量代换后可分离变量，令 $\frac{y}{x} = u$, 有: $y = xu$,

求微分: $dy = xdu + udx$

代回原方程, 得:

$$(x - ux\cos u)dx + x\cos u(udx + xdu) = 0$$

整理, 得可分离变量方程:

$$cosudu = -\frac{dx}{x}$$

两边积分

$$\sin u = -\ln x + C$$

原方程得解:

$$\sin\frac{y}{x} = -\ln x + C$$

例 **1.1.5.** 求解一阶非齐次线性方程

$$y' + P(x)y = Q(x)$$

证明. 常数变易法可求解,
一阶齐次线性方程 $y' + P(x)y = 0$ 有通解:
$y = Ce^{-\int P(x)dx}$

令常数 $C = C(x)$, $y = C(x)e^{-\int P(x)dx}$

代回原方程, 得:

$$C'(x) = \frac{Q(x)}{e^{-\int P(x)dx}}$$

两边积分

$$C(x) = \int Q(x)e^{\int P(x)dx}dx + c$$

代回通解, 得方程的解

$$y = Ce^{-\int P(x)dx} + e^{-\int P(x)dx}\int Q(x)e^{\int P(x)dx}dx$$

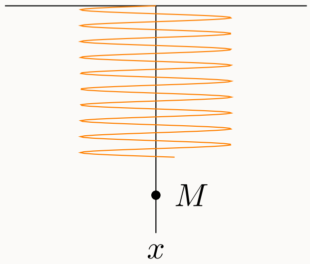
例 **1.1.6.** 求解一阶常系数非齐次线性方程

$$y' + Py = Q(x)$$

证明. 在上方程的解取 P(x)=P，得解

$$y = Ce^{-\int Pdx} + e^{-\int Pdx}\int Q(x)e^{\int Pdx}dx$$

振动模型：二阶常微分方程



例 **1.1.7.** 建立简谐振动的微分方程并求解:

证明. 根据牛顿第二定律，可建立方程:

$F = -kx$

$F = Ma = M\dfrac{d^2x}{dt}$

$\dfrac{d^2x}{dt} = -\dfrac{k}{M}x$

$\dfrac{d^2x}{dt} + \omega^2 x = 0$

由初始位移和初始速度, 得初始条件:

$$x(t=0) = x_0, \qquad \frac{dx}{dt}|_{t=0} = 0$$

求解辅助方程：$m^2 + \omega^2 = 0$

$$m_{1,2} = \pm i\omega$$

方程的基本解:

$$x_1 = \cos\omega t, \qquad x_2 = \sin\omega t$$

方程通解：$x(t) = C_1 \cos\omega t + C_2 \sin\omega t$
初始条件定系数，得特解：$x(t) = x_0 \cos\omega t$

评论. 这是个常系数二阶齐次线性微分方程，通过辅助方程求解。

例 **1.1.8.** 救解如下小阻尼振动微分方程:

$$\frac{d^2u}{dt^2} + 2\varepsilon\frac{du}{dt} + \omega^2 u = 0, \quad (\varepsilon < \omega)$$

证明. 令 $u(t) = exp(-\varepsilon t)v(t)$ 求微分，得:

$$\frac{du}{dt} = exp(-\varepsilon t)[-\varepsilon v + \frac{dv}{dt}]\frac{d^2u}{dt^2} \qquad = exp(-\varepsilon t)[\varepsilon^2 v - 2\varepsilon\frac{dv}{dt} + \frac{d^2v}{dt^2}]$$

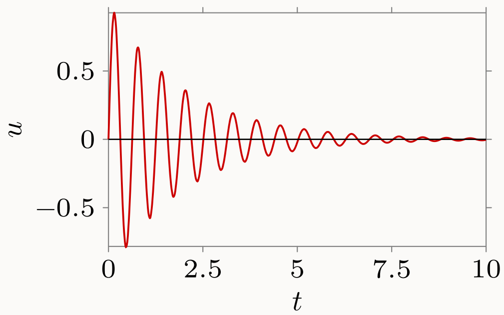
代回原方程并整理得

$$\frac{d^2v}{dt^2} + (\omega^2 - \varepsilon^2)u = 0, \quad (\varepsilon < \omega)$$

令 $k^2 = \omega^2 - \varepsilon^2$, 得简谐振动的微分方程的标准型。由公式得
$v(t) = C_1 \cos kt + C_2 \sin kt$

方程的通解：$u(t) = exp(-\varepsilon t)v(t) = exp(-\varepsilon t)[C_1 \cos kt + C_2 \sin kt]$

很明显，振幅呈指数衰减.



例 **1.1.9.** 求解如下无阻尼强迫振动微分方程：

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \omega^2 u = p \sin \omega_0 t$$

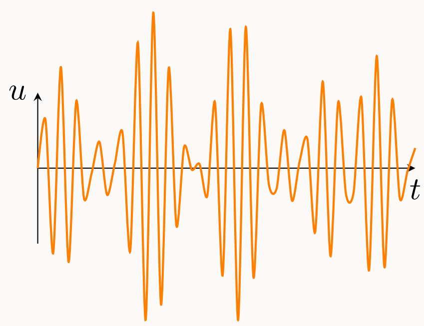
证明. 这是个非齐次方程，对应齐次方程的通解已知：
$u(t) = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t$
只要求出一个特解就行，设非齐次方程的特解为：
$u(t) = C_0 \sin \omega_0 t$
代入原方程求待定系数

$$C_0(\omega^2 - \omega_0^2) \sin(\omega_0 t) = p \sin(\omega_0 t)$$

$$C_0 = \frac{p}{\omega^2 - \omega_0^2}$$

方程的解为：$u(t) = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t + \dfrac{p}{\omega^2 - \omega_0^2} \sin(\omega_0 t)$

评论. 如果策动频率与固有频率接近，则出现共振动（振幅很大）



注. 无阻尼强迫振动微分方程一般式为：

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \omega^2 u = f(t)$$

当策动函数为多项式函数，三角函数时，可用待定系数法确定特解。对于其他的情况，一般常采用常数变易法求解。

1.1.2 常微分方程求解方法

一阶常微分方程

例 1.1.10. 求解如下一阶常系数线性非齐次常微分方程:

$$y' + py = f(x)$$

证明. 对应的齐次方程是衰减数学模型，有解:
$w = C_0 exp(-px)$
应用常数变易法，设非齐次方程的解为:
$y(x) = u(x)exp(-px)$
代入原方程得

$$\begin{aligned} exp(-px)u' &= f(x) \\ u(x) &= \int exp(px)f(x)dx + C \end{aligned}$$

原方程的解为: $y(x) = Cexp(-px) + exp(-px)\int exp(px)f(x)dx$

二阶常微分方程

例 1.1.11. 求解如下二阶常系数线性非齐次常微分方程:

$$y'' + py' + qy = f(x)$$

证明. 对应的齐次方程为:

$$y'' + py' + qy = 0$$

其特征方程为:

$$\lambda^2 + p\lambda + q = 0$$

解有三种情况:

两相异实根: $\lambda_1 \neq \lambda_2$
两相同实根: $\lambda_1 = \lambda_2$
两共轭复根: $\lambda_1 = \alpha + i\beta, \quad \lambda_2 = \alpha - i\beta$

对应的齐次方程的通解也有三种情况:

异实根：y= $C_1exp(\lambda_1 x)+C_2exp(\lambda_2 x)$
同实根：y= $(C_1+C_2x)exp(\lambda_1 x)$
共轭复根：y= $exp(\alpha x)[C_1\cos(\beta x)+C_2sin(\beta x)]$

根据自由项的特点，再通过待定系数法或常数变易法求解非齐次常微分方程。

例 **1.1.12.** 求如下二阶常齐次常微分方程的通解：

$$u''-k^2u'=0$$

证明. 特征方程为：

$$\lambda^2-k^2=0$$

存在两相异实根：$\lambda_1=k,\quad \lambda_2=-k$
通解为： u(t)= $C_1exp(kx)+C_2exp(-kx)$
写成双曲函数形式为：u(t)= $D_1cosh(kx)+C_2sinh(kx)$

例 **1.1.13.** 求如下二阶常齐次常微分方程的初值问题：$\begin{cases}u''=f,(x>0)\\u(0)=0,u'(0)=0\end{cases}$

证明. 对方程两边求积分

$$u'=\int_0^{\xi}f(s)ds+c_1$$

$$u(x)=\int_0^x d\xi\int_0^{\xi}f(s)ds+c_1x+c_2$$

代入零值条件，得 $c_1=0,c_2=0$, 现交换积分次序

$$u(x)=\int_0^x ds\int_s^x f(s)d\xi=\int_0^x(x-s)f(s)ds$$

注. 注意（1）定积分与变上限积分之间的关系（2）交换积分次序时，定积分上下限的变化。

例 **1.1.14.** 求如下二阶常齐次常微分方程的初值问题：
$\begin{cases}u''=f,(x>0)\\u(0)=\alpha,u'(0)=\beta\end{cases}$

证明. 显然，v(x) =α+βx 与 u(x) 享有相同的初值条件。所以它是如下齐次方程的解:
$$\begin{cases} u'' = 0, (x > 0) \\ u(0) = \alpha, u'(0) = \beta \end{cases}$$
令 u(x)=v(x)+w(x),。则 w(x) 满足如下零值问题，
$$\begin{cases} w'' = 0, (x > 0) \\ w(0) = \alpha, w'(0) = \beta \end{cases}$$
由上题的解，写出原方程的解:

$$u(x) = \alpha + \beta x + \int_0^x (x-s)f(s)ds$$

注. 注意本题是如何把非零初值问题转化为零初值问题的

例 1.1.15. 用常数变易法求解常微分方程初值问题:
$$\begin{cases} u'' + \omega^2 u = f, (t > 0) \\ u(0) = 0, u'(0) = 0 \end{cases}$$

证明. 齐次方程的通解为:
$$u = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t)$$
作常数变易，即设非齐次方程的解可写为

$$u = C_1(t) \cos(\omega t) + C_2(t) \sin(\omega t)$$

求导，有

$$u` = [C_1'(t) \cos(\omega t) + C_2'(t) \sin(\omega t)] + [-\omega C_1(t) \sin(\omega t) + \omega C_2(t) \cos(\omega t)]$$

令 $[C_1'(t) \cos(\omega t) + C_2'(t) \sin(\omega t)]$ =0, ... （1）有

$$u' = [-\omega C_1(t) \sin(\omega t) + \omega C_2(t) \cos(\omega t)]$$

进行二次求导:
$$u`` = [-\omega C_1'(t) \sin(\omega t) + \omega C_2'(t) \cos(\omega t)] - \omega^2 u$$
把上次代回原方程，得:

$$[-\omega C_1'(t) \sin(\omega t) + \omega C_2'(t) \cos(\omega t)] = f \qquad (2)$$

联立（1）（2），得方程组:
$$\begin{bmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ -\omega \sin(\omega t) & \omega \cos(\omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1'(t) \\ C_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix}$$

解得:

$$\begin{cases} C_1'(t) = \frac{1}{\omega}\sin(\omega t)f \\ C_2'(t) = \frac{1}{\omega}\cos(\omega t)f \end{cases}$$

积分得:

$$\begin{cases} C_1(t) = \frac{1}{\omega}[\int_0^\tau \sin(\omega\tau)f(\tau)d\tau + c_1] \\ C_2(t) = \frac{1}{\omega}[\int_0^\tau \cos(\omega\tau)f(\tau)d\tau + c_2] \end{cases}$$

原方程的解为:

$$u = \frac{1}{\omega}\cos(\omega t)[\int_0^\tau \sin(\omega\tau)f(\tau)d\tau + c_1] + \frac{1}{\omega}\sin(\omega t)[\int_0^\tau \cos(\omega\tau)f(\tau)d\tau + c_2]$$

代入初值条件，得 $c_1 = c_2 = 0$, 最终得：原方程的解为:

$$u = \frac{1}{\omega}\int_0^\tau \sin\omega(t-\tau)f(\tau)d\tau$$

注. 常数变易后的主要目标变为求 $C_1(t), C_2(t)$.

变系数二阶常微分方程

例 **1.1.16.** 求解欧拉方程:

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + x\frac{dy}{dx} + n^2y = 0$$

证明. 令 $x = exp(t)$ (t=ln x), 代入原方程可转化为:

$$\frac{d^2y}{dt^2} + n^2y = 0$$

这是振动方程，有通解:

$$y(t) = C_1\cos nt + C_2\sin nt$$

原方程的解为:

$$y(t) = C_1\cos n\ln x + C_2\sin n\ln x$$

例 **1.1.17.** 求解如下形式的欧拉方程:

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + 2x\frac{dy}{dx} - n(n+1)y = 0$$

证明. 令 $x = exp(t)$ (t=ln x), 代入原方程可转化为:

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{dy}{dt} - n(n+1)y = 0$$

其特征方程为

$$\lambda^2 + \lambda - n(n+1) = 0$$

其解两相异实根: $\lambda_1 = n, \lambda_2 = -(n+1)$, 原方程的能解:

$$y(t) = C_1 \exp(nt) + C_2 \exp(-(n+1)t)$$

即:

$$y(t) = C_1 x^n + C_2 x^{-(n+1)}$$

注. 由特征方程写通解是门艺术

例 **1.1.18.** 幂级数方法求解 n 阶厄米方程

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + 2ny = 0$$

证明. 设方程有级数解

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

求导得:

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

代回原方程, 得:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [2nc_k - 2kc_k + (k+2)(k+1)c_{k+2}] x^k = 0$$

各项系数为零, 即:

$$2nc_k - 2kc_k + (k+2)(k+1)c_{k+2} = 0$$

得系数递推式:

$$c_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)} c_k, \quad (k = 0, 1, 2, 3, ...)$$

分偶数阶和奇数阶来写, 偶数阶有:

$$\begin{cases} c_2 = -\frac{2n}{2!} c_0 \\ c_4 = \frac{2^2 n(n-2)}{4!} c_0 \\ c_6 = -\frac{2^3 n(n-2)(n-4)}{6!} c_0 \\ c_{2m} = (-1)^m \frac{2^m n(n-2)(n-4)...(n-2m+2)}{(2m)!} c_0 \end{cases}$$

同理，奇数阶有：
$c_{2m+1}=(-1)^m\frac{2^m(n-1)(n-3)(n-5)...(n-2m+1)}{(2m+1)!}c_1$
所有系数求解，即幂级数求得，
$\begin{cases} y_1(x)=[1-\frac{2n}{2!}x^2+\frac{2^2n(n-2)}{4!}x^4-...] \\ y_2(x)=[x-\frac{2(n-1)}{3!}x^3+\frac{2^2(n-1)(n-3)}{5!}x^5-...] \end{cases}$
原方程的解为：

$$y(x)=c_0y_1(x)+c_1y_2(x).$$

注. 级数法更是一门艺术

1.1.3 傅里叶级数和傅里叶变换

傅里叶级数

三角式：

$$f(x)=\frac{a_0}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n\cos\frac{n\pi}{l}x+b_n\cos\frac{n\pi}{l}x\right)$$

$$a_n=\frac{1}{l}\int_{-l}^{l}f(\xi)\cos\frac{n\pi}{l}\xi d\xi$$

$$b_n=\frac{1}{l}\int_{-l}^{l}f(\xi)\sin\frac{n\pi}{l}\xi d\xi$$

复数式：

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}c_ne^{i\omega_nx}$$

$$c_n=\frac{1}{2l}\int_{-l}^{l}f(\xi)e^{-i\omega_nx}d\xi$$

其中：$\omega_n=\frac{n\pi}{l},n=...,-3,-2,-1,0,1,2,3,...$

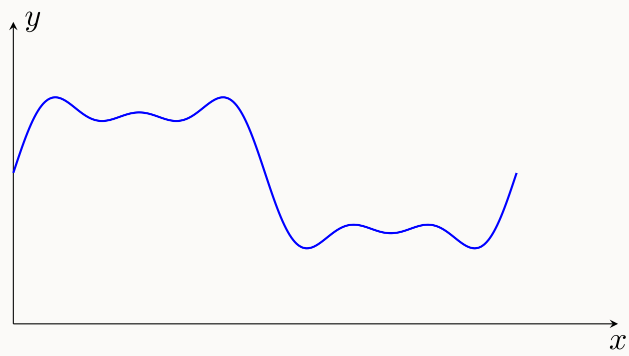
周期 $(2l)$ 与非周期 $(l\ \to\ \infty)$

$$f(x)=\lim_{l\to\infty}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}c_ne^{i\omega_nx}$$

$$=\lim_{l\to\infty}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2l}[\int_{-l}^{l}f(\xi)e^{-i\omega_nx}d\xi]e^{i\omega_nx}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}[\int_{-l}^{l} f(\xi)e^{-i\omega x}d\xi]e^{i\omega x}d\omega$$
$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} G(\omega)e^{i\omega x}d\omega$$

注. $1, \cos(x), \sin(x), \cos(2x), \sin(2x), ..., \cos(nx), \sin(nx)$, 构成正交完全集，$\{exp(i\omega x)\}$ 也构成正交完全集。



$$y = 1 + 0.5\sin(x) + 0.6\sin(3x) + 0.7\sin(5x)$$

例 1.1.19. 求函数的傅里叶展开式： $f(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, \pi] \\ -1, & x \in [-\pi, 0] \end{cases}$

证明. 这是个奇函数，展开式中只有 sin 函数，只需计算 b_n

$$b_n = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin\ \frac{n\pi}{\pi}xdx$$

代入 f (x), 得:

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{1}{\pi}[\int_{-\pi}^{0}\sin nxdx - \int_{0}^{\pi}\sin\ \ nxdx] \\ &= \frac{2}{\pi}\int_{0}^{\pi}\sin nxdx \\ &= \frac{2}{n\pi}[\cos nx] \|_0^\pi \\ &= \frac{2}{n\pi}[(-1)^n - 1] \end{aligned}$$

$$f(x) = \frac{4}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2k+1}\sin(2k+1)dx$$

傅里叶变换

由非周期的傅里叶级数，获得傅里叶变换公式:

$$\begin{cases} G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-i\omega x}dx \\ f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} G(\omega)e^{i\omega x}d\omega \end{cases}$$

可转化为对称形式

$$\begin{cases} G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-i\omega x}dx \equiv F[f(x)] \\ f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} G(\omega)e^{i\omega x}d\omega \equiv F^{-1}[G(\omega)] \end{cases}$$

例 **1.1.20.** 在量子力学中，一维体系中的一个状态在坐标表象中的波函数为:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} c(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp$$

求该状态在动量表象中的波函数 c (p).

证明. 把波函数改写成

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\hbar}c(p)e^{i\frac{p}{\hbar}x}d(\frac{p}{\hbar})$$

根据对称型傅里叶变换公式，有:

$$\begin{cases} \sqrt{\hbar}c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)e^{-i\frac{p}{\hbar}x}dx \\ c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx \end{cases}$$

1.1.4 作业

1、求函数的傅里叶展开式: $f(x) = \begin{cases} \pi + x, & x \in [-\pi, 0] \\ \pi - x, & x \in [0, \pi] \end{cases}$

2、分离变量法求方程

$$\frac{dy}{dt} = ry(1 - \frac{y}{K}), \qquad y(t_0) = y_0$$

3、幂级数方法求解方程

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + 2ny = 0$$

第二章 线性偏微分方程（6 学时）

- 主要内容：波动方程及求解方法、热传导方程及求解方法、拉普拉斯方程及求解方法。
- 重点和难点：齐次弦振动方程的建立与分离变量法，固有值问题。
- 掌握：分离变量法的一般理论；熟练掌握直角坐标系一维和二微分离变量法的求解。
- 理解：分离变量法的适用条件。
- 了解：高维问题求解。

定义 **2.0.1.** 偏微分方程 (PDE) 的未知函数是多元函数，由于这些方程的来源和应用通常具有物理学背景，又称为数学物理方程。

物理量通常是时间变量和空间变量的函数，比如波动方程、热传导方程和拉普拉斯方程等，它们通常可以通过分离变量法求解。

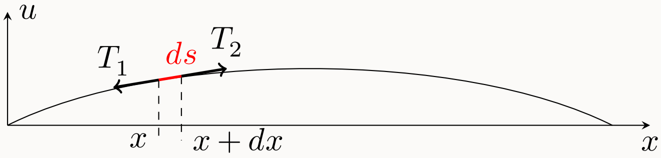
2.1 波动方程

2.1.1 波动方程的建立

自然界普遍存在各种振动，振动在媒介中传播就是波，服从统一的方程。现在建立波动方程。

例 **2.1.1.** 考虑均匀柔软的细弦线，二端固定，受到扰动后在平衡位置作微小运动。分析细弦位移函数 u(x，t) 满足的方程。

证明. 建立如下坐标系：



受力分析：取任意微元 ds (重力不计)，受临近的拉力为 T_1, T_2，则：
则水平合力为零： $T_2 \cos\alpha_2 = T_1 \cos\alpha_1 = T_0$
竖直合力提供加速度：$T_2 \sin\alpha_2 - T_1 \sin\alpha_1 = ma = \rho ds\ u_{tt}$

有： $T_0(\tan\alpha_2 - \tan\alpha_1) = \rho ds\ u_{tt}$

$$T_0[u_x(x+dx,t) - u_x(x,t)] = \rho dx\ u_{tt}$$

$$\frac{T_0}{\rho} \times \frac{u_x(x+dx,t) - u_x(x,t)}{dx} = u_{tt}$$

得波动方程:

$$u_{tt} = a^2 u_{xx}$$

定解条件:
(1) 初始条件 $u(x,t)|_{t=0} = \psi(x)$, $u_t(x,t)|_{t=0} = \Psi(x)$
(2) 边界条件 $u(x,t)|_{x=0} = 0$, $u(x,t)|_{x=l} = 0$
若各质点受到外力作用，则有:

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} + f(x,t)$$

注. 波动方程描述了围绕平衡态小幅震荡的规律，它不仅可以描述琴弦、鼓膜、耳机的震动，也描述着光波、声波、地震波、引力波，甚至弦论中弦的振动。

2.1.2 波动方程的求解

例 **2.1.2.** 现考虑一维波动方程初边值问题 (傅里叶)

$$\begin{cases} u_{tt} = a^2 u_{xx} \\ u(x,t)|_{t=0} = \psi(x), \quad u_t(x,t)|_{t=0} = \Psi(x) \\ u(x,t)|_{x=0} = 0, \quad u(x,t)|_{x=l} = 0 \end{cases}$$

证明. 方程可分离变量：设 $u(x,t) = T(t)X(x)$, 代回方程，有

$$\begin{cases} T''(t)X(x) = a^2 T(t)X''(x) \\ \dfrac{T''}{a^2 T} = \dfrac{X''}{X} = -\lambda \end{cases}$$

即偏微分方程转化为两常微分方程

方程（I）:

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

方程（2）:

$$\begin{cases} T'' + \lambda a^2 T = 0 \\ \ldots\ldots \end{cases}$$

评论. 偏微分方程与常微分方程的分离变量法有何不同?

解方程（I）: 有特征方程,

$$\mu^2 + \lambda = 0$$

其根为: $\begin{cases} \mu_1 = +\sqrt{-\lambda} \\ \mu_2 = -\sqrt{-\lambda} \end{cases}$

分情况讨论:

(1) 相异实根（$\lambda < 0$）有通解: $X = Aexp^{\sqrt{-\lambda}x} + Bexp^{-\sqrt{-\lambda}x}$

分别取 $x = 0, x = l$, 得定解方程组:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ exp^{\sqrt{-\lambda}\ l} & exp^{-\sqrt{-\lambda}\ l} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

有解条件为: $\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ exp^{\sqrt{-\lambda}\ l} & exp^{-\sqrt{-\lambda}\ l} \end{vmatrix} = 0$

很明显，这个行列式不等于 0，所以只有 A=0, B=0,（零解）

(2) 相同实根（$\lambda = 0$）,

则通解为: $X = Ax + B$

分别取 $x = 0, x = l$, 得定解方程组: $\begin{cases} B = 0 \\ Al + B = 0 \end{cases}$

A=B=0, 也只有零解

(3) 虚根（$\lambda > 0$），即: $\mu_1 = i\sqrt{\lambda}$ ， $\mu_2 = -i\sqrt{\lambda}$

则通解为: $X = A\cos\sqrt{\lambda}x + B\sin\sqrt{\lambda}x$

分别取 $x = 0, x = l$, 得定解方程组:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \cos(\sqrt{\lambda}\ l) & \sin(\sqrt{\lambda}\ l) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

系数行列式为零，$\sin(\sqrt{\lambda}\ l) = 0$

$\sqrt{\lambda}\ l = n\ \pi$

固有值为：$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{l^2}$
固有解：$X_n = B_n \sin\frac{n\pi}{l}x = B_n \sin\omega_n x$

求解方程 II : $T'' + \lambda a^2 T = 0$
代入 λ_n，得：$T'' + \lambda_n a^2 T = 0$
变形成：$T'' + \omega_n^2 a^2 T = 0$
特征方程有虚根
通解为 $T_n = C_n \cos\omega_n a t + D_n \sin\omega_n a t$

原方程的基本解为：

$$\begin{aligned} u_n(x,t) &= T_n(t)X_n(x) \\ &= (a_n \cos\omega_n at + b_n \sin\omega_n at)\sin\omega_n x \\ &= (a_n \cos\frac{n\pi at}{l} + b_n \sin\frac{n\pi at}{l})\sin\frac{n\pi x}{l} \end{aligned}$$

叠加解 (解函数)：

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}(a_n \cos\frac{n\pi at}{l} + b_n \sin\frac{n\pi at}{l})\sin\frac{n\pi x}{l}$$

注. 叠加解的思考与讨论：

- 数学理解：一个线性方程的解的线性组合，依然是方程的解
- 物理理解：It is not complicated. It is just a lot of it.
- 核心成果：傅里叶级数与傅里叶变换

最后一步，确定叠加解的系数，

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}(a_n \cos\frac{n\pi at}{l} + b_n \sin\frac{n\pi at}{l})\sin\frac{n\pi x}{l}$$

定解条件：

(1) $u(x,0) = \varphi(x) \quad => \quad \varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\frac{n\pi x}{l}$

(2) $u_t(x,0) = \Psi(x) \quad => \quad \Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{n\pi a}{l}\sin\frac{n\pi x}{l}$

由傅里叶变换（非对称公式），得系数：

$$a_n = \frac{2}{l}\int_0^l \varphi(x)\sin\frac{n\pi x}{l}dx$$

$$b_n = \frac{l}{n\pi a}\frac{2}{l}\int_0^l \Psi(x)\sin\frac{n\pi x}{l}dx = \frac{2}{n\pi a}\int_0^l \Psi(x)\sin\frac{n\pi x}{l}dx$$

2.1.3 固有函数正交性问题

例 **2.1.3.** 试证明固有函数 $X_n = \sin\frac{n\pi}{l}x$ 的正交性。

证明. 固有函数是固有方程的解:

$X_n'' + \lambda_n X_n = 0$

$X_m'' + \lambda_m X_m = 0$

用 X_m 乘以第一式，X_n 乘以第二式,

$X_m X_n'' + \lambda_n X_m X_n = 0$

$X_n X_m'' + \lambda_m X_n X_m = 0$

两式相减:

$(\lambda_n - \lambda_m) X_n X_m = X_n X_m'' - X_m X_n''$

积分得:

$$\begin{aligned}(\lambda_n - \lambda_m)\int_0^l X_n X_m dx &= \int_0^l [X_n X_m'' - X_m X_n'']dx \\ &= [X_n X_m' - X_m X_n']_0^l - \int_0^l [X_n' X_m' - X_m' X_n']dx = 0\end{aligned}$$

由零边界条件可知式中的第一项为零，固有函数求导可得第二项为零:

$(\lambda_n - \lambda_m)\int_0^l X_n X_m dx = 0 \quad \lambda_n - \lambda_m \neq= 0(n \neq m)$

$\int_0^l X_n X_m dx = 0 \quad , \quad (n \neq m)$

当 $n = m \neq 0$

$$\begin{aligned}\int_0^l X_n X_m dx &= \int_0^l X_n X_n dx \\ &= \int_0^l \sin^2\frac{n\pi}{l}xdx \\ &= \frac{l}{2}\end{aligned}$$

2.1.4 波动方程初值问题

例 **2.1.4.** 求解波动方程如下初边值问题

$$\begin{cases} u_{tt} = u_{xx} \quad , \quad 0 < x < 1, t > 0 \\ u(0,t) = u(1,t) = 0 \\ u(x,0) = sin\pi x, u_t(x,0) = 0 \end{cases}$$

证明. 固有值: $\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{l^2} = n^2\pi^2$

固有函数: $X_{\ n} = B_{\ n} \sin \frac{n\pi}{l} x = B_{\ n} \sin n\pi x$

解函数:

$$
\begin{aligned}
u(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos \frac{n\pi at}{l} + b_n \sin \frac{n\pi at}{l}) \sin \frac{n\pi x}{l} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\pi t + b_n \sin n\pi t) \sin n\pi x
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_n &= \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \\
&= 2 \int_0^1 \sin(\pi x) \sin n\pi x dx \\
&= 2 \int_0^1 \sin(\pi x) \sin \pi x dx \\
&= 1 \quad (n = 1) \\
b_n &= \frac{2}{n\pi a} \int_0^l \Psi(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \\
&= \frac{2}{n\pi} \int_0^1 0 \sin n\pi x dx \\
&= 0
\end{aligned}
$$

解函数: $u(x,t) = \cos(\pi t) \sin(\pi x)$

2.1.5 作业: 求解波动方程初边值问题

$$
\begin{cases}
u_{tt} = a^2 u_{xx} \quad , \quad 0 < x < l, t > 0 \\
u(0,t) = u(l,t) = 0 \\
u(x,0) = sin\frac{\pi x}{l}, u_t(x,0) = \sin \pi x
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
u_{tt} = a^2 u_{xx} \quad , \quad 0 < x < l, t > 0 \\
u(0,t) = u(l,t) = 0 \\
u(x,0) = 3sin\frac{3\pi x}{2l} + 6\sin(\frac{5\pi x}{2l}), u_t(x,0) = 0
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
u_{tt} = u_{xx} \quad , \quad 0 < x < 1, t > 0 \\
u(0,t) = u(l,t) = 0 \\
u(x,0) = \sin 2\pi x, u_t(x,0) = x(1-x)
\end{cases}
$$

2.2 输运 (热传导) 方程

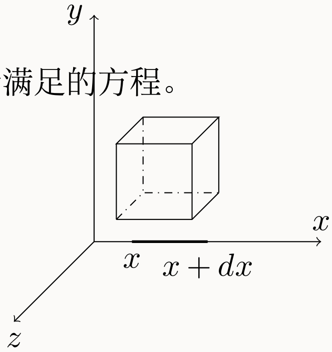
2.2.1 方程的建立

例 2.2.1. 实验上发现，热量总是从温度高的地方传向温度低的地方，并发现有傅里叶热传导定律：

$$q = -k\nabla u$$

式中，q 是热流强度（定义为单位时间通过单位横截面积的热量）；k 是材料的导热系数；∇ 是梯度算子 $(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z})$。

现对于介质中任意小体积（$d\tau$），试建立温度函数 u(x,y,z,t) 所满足的方程。



证明. 建立如下坐标系：对于各向同性介质，

傅里叶热传导定律有分量形式

$$q_{x_i} = -k\frac{\partial}{\partial x_i}u$$

考虑单位时间 x 方向的净流入：

$$-(q_x|_{x+dx} - q_x|_x)dydz$$
$$= -\frac{\partial q_x}{\partial x}dxdydz$$
$$= \frac{\partial}{\partial x}(k\frac{\partial u}{\partial x})dxdydz$$

则总的净流入为：

$$[\frac{\partial}{\partial x}(k\frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(k\frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial u}{\partial z})]dxdydz$$

流入的热量导致介质温度发生变化（热量守恒定律）

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t}dxdydz = [\frac{\partial}{\partial x}(k\frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(k\frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial u}{\partial z})]dxdydz$$

其中 c 是比热，ρ 是质量密度。对于各向同性的均匀介质：

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t} = k[\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\frac{\partial u}{\partial z})]$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}[\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\frac{\partial u}{\partial z})]$$

$$u_t = a^2[u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}]$$

$$u_t = a^2\nabla^2 u = a^2\triangle u$$

注. $\dfrac{\partial u}{\partial t}$ 是时间元（单位时间）升高的温度，$\rho dxdydz$ 是体系元质量，c 是单位质量物体温度升高单位度所需热量。

对于一维导线：$u_t = a^2 u_{xx}$
如果有热源 F(x,y,z,t), 令 $f = \dfrac{F}{c\rho}$：$u_t = a^2 u_{xx} + f$
如果时间足够长，温度应不再随时间变化 $(u_t = 0)$，
得无源 Laplace 方程：$\nabla^2 u = 0$
和有源 Poisson 方程：$\nabla^2 u = f$

评论. 传导方程描述了，热、电等传输的基本规律。

2.2.2 热传导方程的求解

例 **2.2.2.** 对于有限长的导线，求解如下一维热传导方程的初边值问题

$$\begin{cases} u_t = a^2 u_{xx}, \quad (0 < x < l, t > 0) \\ u(x,t)|_{t=0} = \psi(x) \\ u(x,t)|_{x=0} = 0, \quad u(x,t)|_{x=l} = 0 \end{cases}$$

证明. 方程可分离变量：设 $u(x,t) = T(t)X(x)$，代回方程，有

$$\begin{cases} T'(t)X(x) = a^2 T(t)X''(x) \\ \dfrac{T'}{a^2 T} = \dfrac{X''}{X} = -\lambda \end{cases}$$

即偏微分方程转化为两常微分方程
方程（I）:

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

方程（II）:

$$\begin{cases} T' + \lambda a^2 T = 0 \\ \ldots\ldots \end{cases}$$

评论. 热传导方程分离变量后，得到的是两个什么方程?

方程（I）是固有值问题，...
固有值：$\lambda_n = \dfrac{n^2\pi^2}{l^2}$
固有函数：$X_n = \sin\dfrac{n\pi}{l}x$

解方程 II : $T' + \lambda a^2 T = 0$

代入 λ_n, 得: $T' + \lambda_n a^2 T = 0$

变形成: $T' + r_n T = 0$

这是衰减数学模型，有公式:

$$T = B_n exp(-rt)$$

得通解: $T_n = B_n \exp(-(\frac{n\pi a}{l})^2 t)$

原方程的基本解为:

$$\begin{aligned} u_n(x,t) &= T_n(t) X_n(x) \\ &= B_n \exp(-(\frac{n\pi a}{l})^2 t) \sin \frac{n\pi}{l} x \end{aligned}$$

叠加解 (解函数):

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp(-(\frac{n\pi a}{l})^2 t) \sin \frac{n\pi}{l} x$$

代入定解条件:

$$u(x,0) = \psi(x) \quad => \quad \psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \frac{n\pi}{l} x$$

由傅里叶变换（非对称公式），得系数:

$$B_n = \frac{2}{l} \int_0^l \psi(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx, \quad (n = 1, 2, 3, ...)$$

2.2.3 热传导方程初值问题

例 **2.2.3.** 求解如下初边值问题

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} \quad , \quad 0 < x < L, t > 0 \\ u(0,t) = 0, u(L,t) = 0 \\ u(x,0) = x(L-x) \end{cases}$$

证明. 由边界条件知固有值和固有函数分别为:

固有值: $\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2}{l^2} = (\frac{n\pi}{L})^2$

固有函数: $X_n = \sin \frac{n\pi}{l} x = \sin \frac{n\pi}{L} x$

解函数:

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp(-(\frac{n\pi a}{l})^2 t) \sin \frac{n\pi}{l} x \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp(-(\frac{n\pi a}{L})^2 t) \sin \frac{n\pi}{L} x \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
B_n &= \frac{2}{l}\int_0^l \psi(x)\sin\frac{n\pi}{l}xdx \\
&= \frac{2}{L}\int_0^L x(L-x)\sin\frac{n\pi}{L}xdx \\
&= \frac{2}{L}\times 2\times(\frac{L2}{n\pi})^3[1-\cos n\pi] \\
&= 4\frac{L^2}{(n\pi)^3}[1-(-1)^n]
\end{aligned}
$$

解函数：$u(x,t)=(\frac{4L^2}{\pi^3})\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^3}[1-(-1)^n]\exp(-(\frac{n\pi a}{L})^2t)\sin\frac{n\pi}{L}x$

2.2.4 固有函数与边界条件的相关性

固有函数的具体形式是与边界条件相关的，如果边界条件改变，则要先求对应的固有值和固有函数

例 **2.2.4.** 求解如下初边值问题

$$
\begin{cases}
u_t = u_{xx} \quad , \quad 0<x<l, t>0 \\
u_x(0,t)=0, u_x(l,t)=0 \\
u(x,0)=\psi(x)
\end{cases}
$$

证明. 分离变量后，偏微分方程可转化为两常微分方程

方程（I）:

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

方程（II）:

$$
\begin{cases}
T' + \lambda a^2 T = 0 \\
\ldots\ldots
\end{cases}
$$

注意到方程（I）是导数边界条件，与原有的固值问题不同，先求方程（I）。根据以前的讨论，只有在 $\lambda>0$ 即特征方程有虚根时，方程才有非零解。因此，方程的通解可写成:

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

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

代入边界条件（分别取 $x=0, x=l$），得方程组

$$
\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\sin(\sqrt{\lambda}\,l) & \cos(\sqrt{\lambda}\,l) \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

由方程组有非零解的充要条件为系数矩阵行列式为零，即得 $\sin\sqrt{\lambda}\,l=0$，得固有值:

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

代回方程组，得解待定系数：$[A,B]^T=[1,0]^T$，即通解为：

$$X_n=\cos\frac{n\pi}{l}x\ ,\quad (n=0,1,2,......)$$

对应的级数解为：

$$u(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}B_n\exp(-(\frac{n\pi a}{l})^2t)\cos\frac{n\pi}{l}x$$

系数计算公式为：$\begin{cases}B_0&=\frac{1}{l}\int_0^l\psi(x)dx\\ B_n&=\frac{2}{l}\int_0^l\psi(x)\cos\frac{n\pi}{l}xdx,\quad (n=1,2,......)\end{cases}$

评论. 边界条件导致固有函数由 sin 变成了 cos, 进而导致 n=0, 变得有意义。$X_0(x)=\cos\frac{n\pi}{l}=1$。

例 2.2.5. 求解如下初边值问题

$$\begin{cases}u_t=u_{xx}\quad ,\quad 0<x<\pi,t>0\\ u_x(0,t)=0,u_x(l,t)=0\\ u(x,0)=x^2(\pi-x)^2\end{cases}$$

证明. 注意到本方程是导数边界条件，由边界条件知固有值和固有函数分别为:

固有值：$\lambda_n=\frac{n^2\pi^2}{l^2}=(\frac{n\pi}{\pi})^2=n^2$

固有函数：$X_n=\cos\frac{n\pi}{l}x=\cos nx$

解函数：

$$\begin{aligned}u(x,t)&=\frac{B_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}B_n\exp(-(\frac{n\pi a}{l})^2t)\cos\frac{n\pi}{l}x\\&=\frac{B_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}B_n\exp(-(na)^2t)\cos nx\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}B_0&=\frac{1}{l}\int_0^l\psi(x)dx\\&=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}x^2(\pi-x)^2dx\\&=\frac{\pi^4}{15}\\ B_n&=\frac{2}{l}\int_0^l\psi(x)\cos\frac{n\pi}{l}xdx\\&=\frac{2}{\pi}\int_0^{\pi}x^2(\pi-x)^2\cos nxdx\\&=\frac{2}{\pi}\times(-\frac{12\pi}{n^4})[\cos n\pi+1]\\&=-\frac{24}{n^4}[(-1)^n+1]\end{aligned}$$

解函数：$u(x,t)=\dfrac{\pi^4}{30}-24\sum_{n=1}^{\infty}\dfrac{(-1)^n+1}{n^4}\exp(-(na)^2t)\cos nx$

评论. 定积分的计算：$B_n=\dfrac{2}{\pi}\int_0^{\pi}x^2(\pi-x)^2\cos nxdx$

令 $\psi(x)=x^2(\pi-x)^2$ ，求导得：

$$
\begin{aligned}
\psi'(x) &= 2x(2x-\pi)(x-\pi)\\
\psi''(x) &= 2\pi^2-12\pi x+12x^2\\
\psi'''(x) &= 24x-12\pi\\
\psi^{(4)}(x) &= 24
\end{aligned}
$$

令 $\nu^{(4)}(x)=\cos nx$ ，则：

$$
\begin{aligned}
\nu'''(x) &= \frac{1}{n}\sin nx\\
\nu''(x) &= -\frac{1}{n^2}\cos nx\\
\nu'(x) &= -\frac{1}{n^3}\sin nx\\
\nu(x) &= \frac{1}{n^4}\cos nx
\end{aligned}
$$

我们有：

$$\int_0^{\pi}\psi^{(4)}(x)\nu(x)dx=\frac{24}{n^4}\int_0^{\pi}\cos nxdx=0$$

应用分部积分公式，有

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\pi}\psi(x)\nu^{(4)}(x)dx &= [\psi\nu'''-\psi'\nu''+\psi''\nu'-\psi'''\nu]|_0^{\pi}+\int_0^{\pi}\psi^{(4)}(x)\nu(x)dx\\
&= [\psi\nu'''-\psi'\nu''+\psi''\nu'-\psi'''\nu]|_0^{\pi}
\end{aligned}
$$

所以有

$$\int_0^{\pi}\psi(x)\nu^{(4)}(x)dx=[-\psi'''\nu]|_0^{\pi}=-\frac{12\pi}{n^4}[\cos n\pi+1]$$

2.2.5 作业：

1、求解热传导方程初边值问题

$$
\begin{cases}
u_t=a^2u_{xx} \quad , \quad 0<x<l,t>0\\
u(0,t)=u(l,t)=0\\
u(x,0)=x(l-x)
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
u_t=a^2u_{xx} \quad , \quad 0<x<l,t>0\\
u_x(0,t)=u_x(l,t)=0\\
u(x,0)=x(l-x/2)
\end{cases}
$$

2、求固有值问题

$$\begin{cases} X''(x)+\lambda X=0 \quad , \quad 0<x<L \\ X'(0)=0, X(L)=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} X''(x)+\lambda X=0 \quad , \quad 0<x<L \\ X(0)=0, X'(L)=0 \end{cases}$$

3. 什么是固有值？有何用处？

4. 什么是固有函数？与固有值有何关系？

5. 分离变量法的数学思想是什么？

6. 什么是叠加原理？与分离变量法有何关系

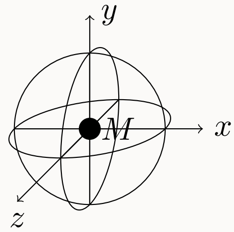
7. 正交性是什么意思？有何用处？

8. 较复杂的分部积分法怎么用？

2.3 拉普拉斯（场）方程

2.3.1 方程的建立

例 2.3.1. 对于位于原点的质量为 M 的质点，试建立其引力势函数 u(x,y,z,t) 所满足的方程.



证明. 建立如图坐标系后，在空间任一点（x,y,z）放置试验质点 m, m 感受的力为:
$\vec{F} = -G\dfrac{Mm}{r^3}\vec{r} \quad , \quad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$
说明 M 激发的引力场场强为
$\vec{A} = \dfrac{GM}{r^3}\vec{r}$
取无穷远处场强为零，则引力势为
$u = -\displaystyle\int_r^{\infty} \vec{A}\cdot d\vec{r} = -\int_r^{\infty} \frac{GM}{r^2}dr = -\frac{GM}{r}$
即有: $\vec{A} = -\nabla u$
封闭球面 S 内的质量通量为
$\displaystyle\oint_S \vec{A}\cdot d\vec{S} = \frac{GM}{r^2}4\pi r^2 = \int 4\pi G\rho d\tau$
由高斯定理可知:
$\displaystyle\oint_S \vec{A}\cdot d\vec{S} = \int \nabla\cdot\vec{A}d\tau$
因此:

$$\nabla\cdot\vec{A} = 4\pi G\rho$$

由于 $\nabla\cdot\vec{A} = \nabla\cdot(-\nabla u) = -\nabla^2 u$
得泊松方程:

$$\nabla^2 u = -4\pi G\rho$$

对于无源区域，得拉普拉斯方程

$$\nabla^2 u = 0$$

定义拉普拉斯算子:

$$\triangle = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

评论. 拉普拉斯（场）方程是物理学描述各种势场的基本方程。

2.3.2 矩形区域上拉普拉斯方程的求解

拉普拉斯方程（泊松方程）是描述各种场的基本方程。求解拉普拉斯方程是数理方程的一个基本任务。

例 **2.3.2.** 对于矩形区域，　求解有如下边值问题

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=f_1(x),u(x,b)=f_2(x) \\ u(0,y)=g_1(y),u(a,y)=g_2(y) \end{cases}$$

证明. 这是第一类边界条件，可将问题分解成两个具有零边界条件的问题

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=0,u(x,b)=0 \\ u(0,y)=g_1(y),u(a,y)=g_2(y) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=f_1(x),u(x,b)=f_2(x) \\ u(0,y)=0,u(a,y)=0 \end{cases}$$

同理，还可以再分解，变成四个问题。

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=0,u(x,b)=0 \\ u(0,y)=g_1(y),u(a,y)=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=f_1(x),u(x,b)=0 \\ u(0,y)=0,u(a,y)=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=0,u(x,b)=0 \\ u(0,y)=0,u(a,y)=g_2(y) \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, & (0<x<a,0<y<b) \\ u(x,0)=0,u(x,b)=f_2(x) \\ u(0,y)=0,u(a,y)=0 \end{cases}$$

例 **2.3.3.** 　求解有如下边值问题

$$\begin{cases} u_{xx}+u_{yy}=0, \quad (0<x<1, 0<y<1) \\ u(x,0)=0, u(x,1)=0 \\ u(0,y)=g_1(y)=\sin \pi y, u(1,y)=0 \end{cases}$$

证明. 设有 $u(x,y)=X(x)Y(y)$ ，代回原方程，得

$$X''(x)Y(y)+X(x)Y''=0$$

$$-\frac{X''}{X}=\frac{Y''}{Y}=-\lambda$$

得两个常微分方程:
方程（I）:
$$\begin{cases} Y''+\lambda Y=0 \ , \ 0<y<1 \\ Y(0)=0 \ , \ Y(1)=0 \end{cases}$$
方程（II）:
$$\begin{cases} X'-\lambda X=0 \ , \ 0<x<1 \\ X(0)=\sin \pi y \ , \ X(1)=0 \end{cases}$$

方程（I）是固有值问题,
固有值: $\lambda_n=\frac{n^2\pi^2}{l^2}=n^2\pi^2$
固有函数: $Y_n=\sin\frac{n\pi}{l}y=\sin n\pi y$

求解方程 II : $X''-\lambda Y=0$
代入 λ_n, 得: $X''-n^2\pi^2X=0$
特征方程有两相异实根，方程的通解为:
$X_n(x)=C_n exp(n\pi x)+D_n exp(-n\pi x)$

结合（I）（II），原方程的解为:
$$\begin{aligned} u_n(x,y) &= [C_n exp(n\pi x)+D_n exp(-n\pi x)]\sin(n\pi y) \\ &= [a_n\cosh(n\pi x)+b_n\sinh(n\pi x)]\sin(n\pi y) \\ u(x,y) &= \sum_{n=1}^{\infty}[a_n\cosh(n\pi x)+b_n\sinh(n\pi x)]\sin(n\pi y) \end{aligned}$$

代入定解条件: $u(0,y)=0$, 得
$\sum_{n=1}^{\infty}a_n\sin(n\pi y)=0$, $=> a_n=0$
因此:

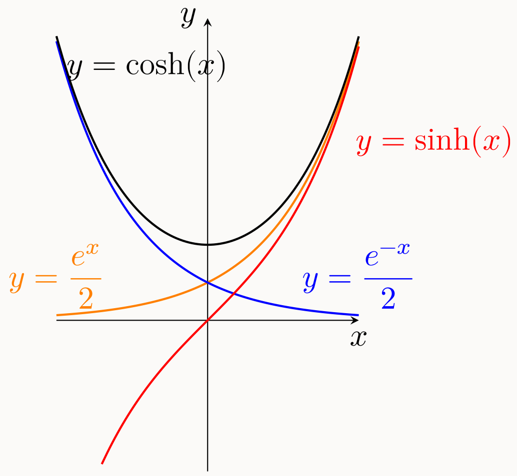
$u(x,y)=\sum_{n=1}^{\infty} b_n \sinh(n\pi x)\sin(n\pi y)$
代入定解条件：$u(1,y)=\sin\pi y$，得

$$u(1,y)=\sum_{n=1}^{\infty} b_n \sinh(n\pi)\sin(n\pi y)=\sin\pi y$$

由正交性，得：$b_1\sinh\pi=1$ ，$b_n=0$，$(n>1)$
原方程得解：

$$u(x,y)=\frac{\sinh\pi x}{\sinh\pi}\sin(\pi y)$$

评论. 双曲函数: $\begin{cases} \sinh(x)=-i\sin(ix)=\dfrac{e^x-e^{-x}}{2} \\ \cosh(x)=\cos(ix)=\dfrac{e^x+e^{-x}}{2} \end{cases}$



评论. 其他三个边值问题也需构造出 x 或 y 的固有值问题, 原理同上。

2.3.3 圆域上拉普拉斯方程的求解

直角坐标 (x,y,z) : $\nabla^2=\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$

球坐标 (r,θ,φ) : $\nabla^2=\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}(r^2\dfrac{\partial}{\partial r})+\dfrac{1}{r^2\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta})+\dfrac{1}{r^2\sin\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

极坐标 (r,θ) : $\nabla^2=\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2}$

例 **2.3.4.** 求解如下边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u}{\partial r}+\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 u}{\partial\theta^2}=0, & 0<r<r_0 \\ u(r_0,\theta)=f(\theta), & 0<\theta<2\pi \end{cases}$$

证明. 方程可分离变量，令 $u(r,\theta)=R(r)\Theta(\theta)$，代入原方程

$$R''\Theta+\frac{1}{r^2}R\Theta''+\frac{1}{r}R'\Theta=0$$

$$\frac{r^2R''+rR'}{R}=-\frac{\Theta''}{\Theta}=\lambda$$

分离变量后，得两常微分方程：

I、$\Theta''+\lambda\theta=0$

定解条件：$\Theta(\theta+2\pi)=\Theta(\theta)$

II、$r^2R''+rR'-\lambda R=0$

定解条件：......

求解方程 I：根据以前的分析，在 $\lambda>0$ 时，有通解

$$\Theta(\theta)=A\cos\sqrt{\lambda}\theta+B\sin\sqrt{\lambda}\theta$$

由定解条件：$\Theta(2\pi)=\Theta(0)$ ， $\Theta'(2\pi)=\Theta'(0)$ 得方程：

$$\begin{bmatrix}\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)-1 & \sin(\sqrt{\lambda}2\pi)\\ -\sin(\sqrt{\lambda}2\pi) & \cos(\sqrt{\lambda}2\pi)-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A\\ B\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

系数行列式应为零，得

$$(\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)-1)^2+\sin^2(\sqrt{\lambda}2\pi)=0$$

$$\cos(\sqrt{\lambda}2\pi)=1$$

固有值为：$\lambda_n=n^2$ ， $(n=0,1,2,...)$

解为：$\Theta(\theta)=A_n\cos n\theta+B_n\sin n\theta$

求解方程 II：$r^2R''+rR'-\lambda R=0$

把 $\lambda_n=n^2$ 代入， 得

$$r^2R''+rR'-n^2R=0$$

令 $r=exp(t)$ ，有 $t=\ln r$，先求导

$$\frac{dR}{dr}=\frac{dR}{dt}\frac{dt}{dr}=\frac{1}{r}\frac{dR}{dt}$$

$$\frac{d^2R}{dr^2}=-\frac{1}{r^2}\frac{dR}{dt}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(\frac{dR}{dt})$$ ，得：

$$\frac{d^2R}{dr^2}=\frac{1}{r^2}(\frac{d^2R}{dt^2}-\frac{dR}{dt})$$

代回方程，得：

$$\frac{d^2R}{dt^2}-n^2R=0$$

由特征方程有两相异实根，得通解：

$$R=C_nexp(nt)+D_nexp(-nt)$$

把 $t=\ln r$ 代回，得

$$R=C_nr^n+D_nr^{-n}$$

第二项发散，应删除，得

$$R=C_nr^n,\quad (n=0,1,2,......)$$

利用叠加原理，得解:

$$\begin{aligned} u_n(r,\theta) &= (a_n\cos n\theta + b_n\sin n\theta)r^n \\ u(r,\theta) &= \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos n\theta + b_n\sin n\theta)r^n \end{aligned}$$

代入定解条件: $u(r_0,\theta) = f(\theta)$

$$= \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos n\theta + b_n\sin n\theta)r_0^n$$

获得系数:

$$a_n = \frac{1}{r_0^n\pi}\int_0^{2\pi} f(\theta)\cos n\theta d\theta$$

$$b_n = \frac{1}{r_0^n\pi}\int_0^{2\pi} f(\theta)\sin n\theta d\theta$$

例 **2.3.5.** 求解如下边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u}{\partial r} + \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 u}{\partial\theta^2} = 0, & 0 < r < r_0 \\ u(r_0,\theta) = A\cos(\theta), & 0 < \theta < 2\pi \end{cases}$$

证明. 求系数:

$$a_1 = \frac{1}{r_0^1\pi}\int_0^{2\pi} A\cos(\theta)\cos\theta d\theta$$

$$a_1 = \frac{A}{r_0\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2(\theta)d\theta = \frac{A}{r_0 1 n\pi}\int_0^{2\pi}(1+\cos 2\theta)d\theta = \frac{A}{r_0}$$

$$a_n = \frac{1}{r_0^n\pi}\int_0^{2\pi} A\cos(\theta)\cos n\theta d\theta = 0\ ,\ (n\neq 1)$$

$$b_n = \frac{1}{r_0^n\pi}\int_0^{2\pi} A\cos(\theta)\sin n\theta d\theta = 0$$

叠加解:

$$\begin{aligned} u(r,\theta) &= \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos n\theta + b_n\sin n\theta)r^n \\ &= \frac{1}{2}a_0 + a_1 r\cos\theta \\ &= \frac{A}{r_0}r\cos\theta \end{aligned}$$

评论. 若将边界条件修改为: $A\cos 2\theta$ ，或 $A\sin 2\theta$ ，考虑解会如何变化。

2.3.4 作业：

1、求解固有值问题

$$\begin{cases} Y'' + \lambda Y = 0 \quad , \quad 0 < y < 2\pi \\ Y(0) = Y(2\pi), \quad Y'(0) = Y'(2\pi) \end{cases}$$

2、求解边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u}{\partial r} + \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = 0, \quad 0 < r < 1 \\ u(1,\theta) = A\cos 2\theta + B\cos 4\theta \end{cases}$$

3、求解边值问题

$$\begin{cases} u_{xx} + u_{yy} = 0, \qquad (0 < x, y < 1) \\ u(x,0) = u(0,y) = u(x,1) = 0 \\ u(1,y) = \sin 2\pi y \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_{xx} + u_{yy} = 0, \qquad (0 < x, y < 1) \\ u(1,y) = u(0,y) = u(x,0) = 0 \\ u(x,1) = \sin n\pi x \end{cases}$$

第三章　薛定谔方程 I（6 学时）

- 主要内容：Schrödinger 方程分离变量法、量子谐振子与 Hermite 多项式，Hermite 多项式的性质。
- 重点和难点：一维 Schrödinger 方程分解的物理意义，无限深势井的 Schrödinger 方程推导，Hermite 多项式性质。
- 掌握：一维 Schrödinger 方程的分离变量法、量子谐振子模型与分析方法、Hermite 多项式性质。
- 理解：Hermite 多项式的递推公式。
- 了解：Hermite 方程的求解过程。

薛定谔方程是量子力学的基本方程，地位相当于牛顿力学中的牛顿第二定理。薛丁谔方程的解称为波函数，完全描述体系的状态。

3.1　薛定谔方程分离变量法

3.1.1　方程的建立

例 **3.1.1.** 物质波的状态由波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 完全描述，试建立波函数所满足的方程。

观点 **1**：最小作用量原理方法

观点 **2**：波动性和粒子性相结合的方法

观点 **3**：基本假设，不能从其他原理推导出来

3.1.2 含时薛定谔方程

1926 年, 奥地利物理学家薛定谔, 提出描述物质状态的波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 服从如下方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r}t)\right]\Psi(\vec{r},t)$$

若取 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad\rightarrow\quad \hat{E}$, $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r},t) \quad\rightarrow\quad \hat{H}$, 方程有如下算符形式:

$$\hat{E}\ \Psi(\vec{r},t)=\hat{H}\ \Psi(\vec{r},t)$$

评论. 薛定谔方程为什么难求解?

实际体系的势函数: $V(\vec{r},t)$ 一般比较复杂

多粒子体系的波函数: $\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2},...,\vec{r_n},t)$

多粒子体系的哈密顿量: $\hat{H}\ =\sum_{i=1}^{n}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_i^2+\sum_{i,j=1,i\neq j}^{n}V(\vec{r_i},\vec{r_j},t)$

分离变量法可能吗? 条件呢?

3.1.3 定态薛定谔方程

若势函数不显含时间 t, 则时间变量可分离

方程: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t)$

解: 设 $\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r})f(t)$, 代回方程

$$i\hbar\Psi(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}f(t)=f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})$$

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial}{\partial t}f(t)=\frac{1}{\Psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})=E$$

得两个微分方程:

I、$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial}{\partial t}f(t)=E$

解方程, 得: $f(t)=e^{-iEt/\hbar}$

II、$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r})$

方程 II 称为定态薛定谔方程。

3.1.4 单粒子定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z)$$

能否求解, 依赖于势函数的具体形式.....

如果 $V(x,y,z)=V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)$, 则方程可分离变量:

设：$\Psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$ ，$E=E_x+E_y+E_z$，则：

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}(XYZ)=\frac{d^2X}{x^2}YZ;\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}=\frac{d^2Y}{y^2}ZX;\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}=\frac{d^2Z}{z^2}XY$$

方程变为：

$$YZ\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2X}{dx^2}\right]+ZX\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2Y}{dy^2}\right]+XY\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2Z}{dz^2}\right]$$
$$=\left[-(V_1-E_x)-(V_1-E_y)-(V_1-E_z)\right]XYZ$$

两边同除以 XYZ，得到三个一维薛定谔方程：

$$\begin{cases}\left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_1(x)\right]X(x)=E_xX(x)\\ \\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+V_2(y)\right]Y(y)=E_yY(y)\\ \\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+V_3(z)\right]Z(z)=E_zZ(z)\end{cases}$$

评论. 定态薛定谔方程容易求解吗？

实际体系的势函数：$V(\vec{r})$ 一般比较复杂

多粒子体系的波函数：$\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_n,t)$

多粒子体系的哈密顿量：$\hat{H}\ =\sum_{i=1}^{n}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_i^2+\sum_{i,j=1,i\neq j}^{n}V(\vec{r}_i,\vec{r}_j,t)$

分离变量法依然很难!!!

例 3.1.2. 设有一粒子处于如下一维无限深势阱中，求解薛定谔方程

$$V(x)=\begin{cases}0 & 0<x<a\\ +\infty & x<0,x>a\end{cases}$$

证明. 势函数不显含时间 t，只要求解如下定态薛定谔方程

$$\begin{cases}\left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+0\right]\Psi(x)=E\Psi(x)\qquad 0<x<a,\qquad (1)\\ \\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\infty\right]\Psi(x)=E\Psi(x)\qquad x<0,\ x>a\qquad (2)\end{cases}$$

很明显，方程（2）的解为 $\Psi(x)=0$

令 $k^2=\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$，方程（1）可变为如下边值问题：

$$\begin{cases}\Psi''(x)+k^2\Psi(x)=0\\ \Psi(0)=0\ ,\quad \Psi(a)=0\end{cases}$$

很明显，特征方程有两虚根，所以方程的通解为：

$\Psi(x)=A\cos(kx)+B\sin(kx)$

代入定解条件，得：A=0，$\sin ka=0$

$ka = n\pi => k = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$

得量子化能级：$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}(n = 1, 2, 3, ...)$

固有函数为：$\Psi_n(x) = B_n \sin(\frac{n\pi}{a}x)$

*** 归一化：$\int_0^a \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)dx = \int_0^a |B_n|^2 \sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx = 1$

得系数：$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$

归一化固有函数：$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x)$

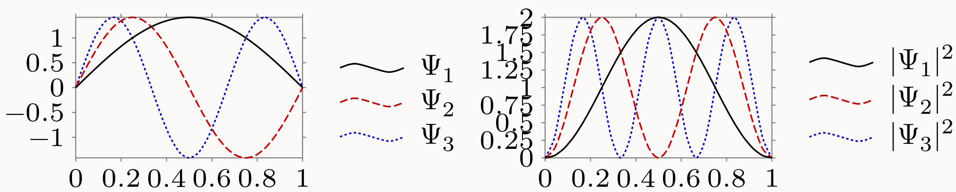
则波函数为：

$$\Psi_n(x,t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

评论. 1、金属中的自由电子被限制在一个有限的范围（金属内）运动，在金属外出现的概率为零，可粗略近似为无限深势阱

2、 能级间隔：$\triangle E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}(2n+1)$

- 当导线的直径（a）很小时，能级量子化非常明显。
- 宏观物体的质量 (μ) 很大，能级量子化现象消失。



例 3.1.3. 设有一粒子处于如下一维无限深势阱中，求解薛定谔方程

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ +\infty & |x| > a \end{cases}$$

证明. 势函数与上例存在平移关系，$x' = x + a/2$

有：$\sin(\frac{n\pi}{a}x') = \sin(\frac{n\pi}{a}(x + a/2)) = \sin\frac{n\pi}{a}x \cos\frac{n\pi}{2} + \cos\frac{n\pi}{a}x \sin\frac{n\pi}{2}$

n 为偶数时，$\Psi_{2m}(x) = B_{2m}\sin(\frac{2m\pi}{a}x)$, $E_{2m} = \frac{2m^2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$

n 为奇数时，$\Psi_{2m+1}(x) = B_{2m+1}\cos(\frac{(2m+1)\pi}{a}x)$, $E_{2m+1} = \frac{(2m+1)^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$

归一化，求出系数...

例 3.1.4. 求解一维无限深势阱的非定常问题

$$
\begin{cases}
i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\Psi = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial^2 x^2}, \quad (0 < x < L, t > 0) \\
\Psi(0,t) = 0, \quad \Psi(L,t) = 0 \\
\Psi(x,0) = f(x)
\end{cases}
$$

证明. 令 $\Psi(x,t) = \Psi(x)T(t)$ ，代回方程，得:

$$
\begin{cases}
\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0 \\
\Psi(0) = 0 \ , \quad \Psi(a) = 0
\end{cases}
$$

固有值： $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}(n = 1, 2, 3, ...)$

固有函数： $\Psi_n(x) = \sin(\dfrac{n\pi}{a}x)$

时间函数： $T_n(t) = \exp(-iE_n t/\hbar)$

方程的级数解为： $\Psi(x,t) = \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp(-iE_n t/\hbar)\sin(\frac{n\pi}{a}x)$

取 t=0, 代入初值条件，得： $f(x) = \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin(\frac{n\pi}{a}x)$

得系数： $B_n = \dfrac{2}{a}\displaystyle\int_0^a \sin(\frac{n\pi}{a}x)dx, \quad (n = 1, 2, 3, ...)$

3.1.5 作业：

1、求定态薛定谔方程

$$
\begin{cases}
\Psi''(x) + \dfrac{2\mu E}{\hbar^2}\Psi(x) = 0, \quad |x| < a/2 \\
\Psi(-a/2) = \Psi(a/2) = 0
\end{cases}
$$

2、求解初边值问题

$$
\begin{cases}
i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\Psi = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial^2 x^2}, \quad (0 < x < L, t > 0) \\
\Psi(0,t) = 0, \quad \Psi(L,t) = 0 \\
\Psi(x,0) = f(x)
\end{cases}
$$

3、求三维无限势阱问题

$$
V(x,y,z) = \begin{cases}
0 \ , \quad 0 < x, y, z < a \\
\quad +\infty, \quad others
\end{cases}
$$

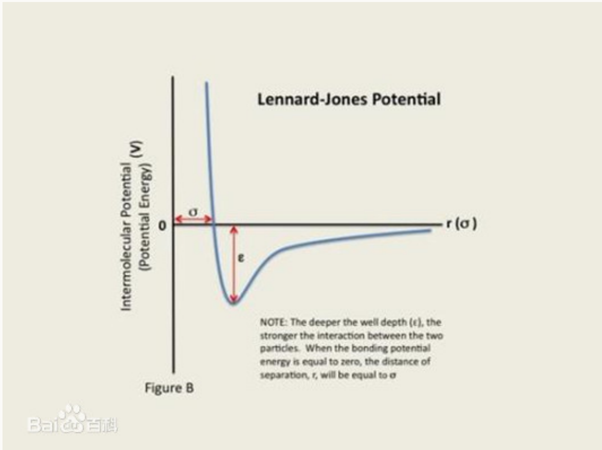
3.2 量子谐振子与厄密方程

自然界广泛存在简谐振动，任何体系在平衡位置附近的小振动，例如分子振动、晶格振动、原子核表面振动以及辐射场等往往都可以分解成若干彼此独立的一维简谐振动。简谐振动往往还作为各种复杂运动的初步近似。研究简谐振动，无论在理论还是在应用上都是很重要的。

3.2.1 谐振子的势函数

例 3.2.1. 试求相互作用势函数 V(x) 在平衡位置附近的二阶近似

证明. 半经验的 Lennard-Jones 势，如图所示



量子的势函数比 L-J 势更加复杂，但不管有多复杂在平衡位置（$x=a$）附近都可做泰勒展开

$$V(x)=V(a)+\frac{1}{1!}\frac{\partial V}{\partial x}|_{x=a}(x-a)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}|_{x=a}(x-a)^2+...$$

很明显，一阶导应为零，因此，二阶近似可写为

$$\begin{aligned}V(x) &\approx V(a)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}|_{x=a}(x-a)^2\\ &=V_0+\frac{1}{2}k(x-a)^2\end{aligned}$$

取坐标原点为（a,V_0），得:

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2$$

评论. 弹簧力正是势函数 V(x) 在平衡位置附近的二阶近似

$$F=-\frac{\partial V}{\partial x}=-kx$$

因此，势函数 V(x) 可写成：

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

3.2.2 谐振子薛定谔方程

例 **3.2.2.** 求解谐振势条件下的薛定谔方程

证明. 把势函数代入薛定谔方程，得：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2]\Psi(x,t)$$

令 $\Psi(x,t)=\Psi(x)T(t)$，代回方程，时间和位置变量可分离变量：
解得时间函数：$T_(t)=\exp(-iEt/\hbar)$
固有函数满足定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right]\Psi(x)=E\Psi(x)$$

整理：

$$\frac{1}{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2}+\left(\frac{2E}{\omega\hbar}-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2\right)\Psi=0$$

令：　$\xi=\alpha x$，做自变量伸缩变换

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x}=\alpha\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}$$
$$\frac{\mathrm{d}\Psi^2}{\mathrm{d}x^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\alpha\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi})=\alpha^2\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2}$$

代回方程，得

$$\left[\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi^2}+(E-\frac{\mu\omega^2\xi^2}{2\alpha^2})\right]\Psi(\xi)=0$$

同除二阶导数项系数，得

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2\alpha^2}(E-\frac{\mu\omega^2\xi^2}{2\alpha^2})\right]\Psi(\xi)=0$$

令 $\frac{\mu^2\omega^2}{\hbar^2\alpha^4}=1$，得伸缩系数：

$$\alpha^2=\frac{\mu\omega}{\hbar}$$

再引入特征值

$$\lambda=\frac{2E}{\omega\hbar}$$

得二阶常微分方程的标准形式:

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

评论. n 阶厄密方程有如下形式

$$\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+2ny=0$$

为了利用 n 阶厄密方程的结果，我们还得对谐振子固有值方程进一步简化。

考虑渐近行为，当 $|x|\to\infty,\xi\to\infty$，有 $\xi^2\gg\lambda$，方程可近似为

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2}-\xi^2\right)\Psi=0$$

该方程并没有表达式解，但通过检验平方指数函数的导数

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\exp(\frac{\xi^2}{2})=(\xi^2+1)\exp(\frac{\xi^2}{2})$$
$$\frac{d^2}{d\xi^2}\exp(-\frac{\xi^2}{2})=(\xi^2-1)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

当 $\xi\to\infty$，这两导数可近似为:

$$(\xi^2)\exp(\frac{\xi^2}{2})\quad,\quad(\xi^2)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

因此，极限状态解应与函数

$$C_1\exp(\frac{\xi^2}{2})+C_2\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

相关联。但考虑到波函数的有界性，应删除发散项（第一项），得极限状态波函数的简洁形式

$$\Psi_\infty(\xi)\sim\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

现考虑非极限状态，解函数可写成:

$$\Psi(\xi)=H(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

解函数的确定等价于多项式函数 H 的确定。

对上式求导:

$$\Psi'(\xi) = H'(\xi)e^{-\xi^2/2} - H(\xi)\xi e^{-\xi^2/2}$$
$$\Psi''(\xi) = \left[\left(\xi^2-1\right)H - 2\xi H' + H''\right]e^{-\xi^2/2}$$

代回原方程$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\Psi = 0$
得到关于多项式 $H(\xi)$ 的方程:

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0$$

取 $\lambda - 1 = 2n$，方程转化为 n 阶厄密方程

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

由

$$\lambda = 2n + 1 = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

解出能量特征值 (能级)

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

幂级数方法求解 n 阶厄密方程，

$$H = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k$$

可得系数递推式:

$$c_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)}c_k, \quad (k = 0, 1, 2, 3, ...)$$

分偶数阶和奇数阶写

$$c_{2m} = (-1)^m \frac{2^m n(n-2)(n-4)...(n-2m+2)}{(2m)!}c_0$$

显然有 $c_{2m} = 0$ ， $(2m > n)$

$$c_n = (-1)^m \frac{2^m n\ !!}{n!}c_0, \quad (2m = n)$$

$$c_{2m+1} = (-1)^m \frac{2^m (n-1)(n-3)(n-5)...(n-2m+1)}{(2m+1)!}c_1$$

显然有 $c_{2m+1} = 0$ ， $(2m+1 > n)$

$$c_n = (-1)^m \frac{2^m n!!}{n!}c_1, \quad (2m+1 = n)$$

所有系数求解，幂级数解求得，

$$\begin{cases} H_1(\xi) = [1 - \frac{2n}{2!}\xi^2 + \frac{2^2 n(n-2)}{4!}\xi^4 - ...] \\ H_2(\xi) = [\xi - \frac{2(n-1)}{3!}\xi^3 + \frac{2^2(n-1)(n-3)}{5!}\xi^5 - ...] \end{cases}$$

n 阶厄密的解为：

$$H(\xi) = c_0 H_1(\xi) + c_1 H_2(\xi).$$

根据波函数的有界性性质，H 应取多项式（不能为无穷级数）。当 n 为偶数时，$C_1 = 0$ ，当 n 为奇数时，$C_0 = 0$ 。

为了更好地描述，可以将多项式表示为降幂排列形式，令最高次项系数为：

$$c_n = 2^n$$

系数递推式可写为：

$$c_{k-2} = -\frac{k(k-1)}{2(n-k+2)}c_k$$

$$c_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{2\times 2}c_n$$

$$c_{n-4} = (-1)^2\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2\times 2\times 4}2^n$$

$$c_{n-2m} = (-1)^m\frac{n!}{2^m(2m)!!(n-2m)!}2^n = (-1)^m\frac{n!}{m!(n-2m)!}2^{n-2m}$$

n 阶厄密方程的解为厄米多项式：

$$H(\xi) = \sum_{m=0}^{M}(-1)^m\frac{n!}{m!(n-2m)!}2^{n-2m}\xi^{n-2m}, \quad M = [n/2]$$

原方程的解为

$$\Psi_n(\xi) = N_n \exp(-\frac{\xi^2}{2})H(\xi)$$

归一化得系数后，为

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}\exp(-\frac{\alpha^2 x^2}{2})H(\alpha x)$$

定态波函数为

$$\Psi_n(x,t) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}\exp(-\frac{\alpha^2 x^2}{2} - \frac{i}{\hbar}E_n t)H(\alpha x)$$

3.2.3 作业：

1、计算积分

$$\int_0^{+\infty} e^{-x^2/2dx}$$

2、　根据厄米多项式表达式,写出前五个厄米多项式表达式,并分析 $H_n'(x)$ 与 $H_{n-1}(x)$ 之间的联系

3、求解厄米方程

$$\frac{d^2H}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+4nH=0$$

4、　列出厄米方程的几种形式，说明厄米方程的特点

3.3 厄密多项式及其性质

自然界广泛存在简谐振动，其量子力学固有解是厄密多项式。因此，了解厄密多项式的性质是很有必要的

3.3.1 生成函数

例 **3.3.1.** 是否存在一个函数，它的展开系数刚好就是 Hermite 多项式。试证明，二元函数 $w(x,t)=e^{2xt-t^2}$ 是 Hermite 多项式的一个母函数。

证明. 把函数做关于变量 t 的 Taylor 展开：

$$w(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}c_n(x)t^n$$

则需证明：$\left[\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}+2n\right]c_n(x)=0$

(1)、由 $\frac{\partial w}{\partial x}=2te^{2xt-t^2}=2t\ w(x,t)$ 得

$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}c\,'_n(x)t^n=2t\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}c_n(x)t^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}2c_n(x)t^{n+1}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{n!}2c_{n-1}(x)t^n$

比较系数，有：

$c\,'_n(x)=2nc_{n-1}(x)$

$c\,''_n(x)=2nc\,'_{n-1}(x)=4n(n-1)c\,_{n-2}(x)$

(2) 由 $\frac{\partial w}{\partial t}=2(x-t)e^{2xt-t^2}=2(x-t)\ w(x,t)$ 得

$\frac{\partial w}{\partial t}+2(t-x)\ w(x,t)=0$

把展开式代入上式

$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}nc_n(x)t^{n-1}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}2(t-x)c_n(x)t^n=0$

$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}c_{+1}(x)t^n+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-2x}{n!}c_n(x)t^n+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2n}{n!}c_{-1}(x)t^n=0$

比较系数，有：

$c_{n+1}(x)-2xc_n(x)+2nc_{n-1}(x)=0$

$c_n(x)-2xc_{n-1}(x)+2(n-1)c_{n-2}(x)=0$

(3) 把 $c\,'_n(x)=2nc_{n-1}(x)$, $\quad c\,''_n(x)=4n(n-1)c\,_{n-2}(x)$ 代入上式

得： $c_n(x)-\frac{x}{n}c\,'_n(x)+\frac{1}{2n}c\,''_n(x)=0$

整理，得： $\left[\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}+2n\right]c_n(x)=0$

即：$c_n(x)=H_n(x)$ 证毕！

评论. 还记得傅立叶变换吗，$1, \cos(x), \sin(x), \cos(2x), \sin(2x), ..., \cos(nx), \sin(nx)$ 构成正交完全集。傅立叶级数是展开系数。$x^0, x^1, x^2, ..., x^n$ 也构成正交完全集，所以一般的函数都可以做 Taylor 展开，$w(x,t) = e^{2xt-t^2}$ 的展开系数正是厄密多项式。

3.3.2 递推公式

既然：$c_n(x) = H_n(x)$

$c\,'_n(x) = 2nc_{n-1}(x)$

$\rightarrow\ H\,'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$

$c_n(x) - 2xc_{n-1}(x) + 2(n-1)c_{n-2}(x) = 0$

$\rightarrow H_n(x) - 2xH_{n-1}(x) + 2(n-1)H_{n-2}(x) = 0$

有：$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x,$

3.3.3 微分形式

$$w(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c_n(x) t^n$$

$$w(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n$$

由 Taylor 展式，知：

$$H_n(x) = \left[\frac{\partial^n w}{\partial t^n}\right]_{t=0}$$

$$w(x,t) = e^{2xt-t^2} = e^{x^2} e^{-(x-t)^2}$$

$$H_n(x) = \left[\frac{\partial^{\,n} w}{\partial t^n}\right]_{t=0}$$

$$= e^{x^2} \left[\frac{\partial^n}{\partial t^n} e^{-(x-t)^2}\right]_{t=0}$$

$$= (-1)^n e^{x^2} \left[\frac{d^{\,n}}{d\,u^n} e^{-u^2}\right]_{u=x}$$

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

3.3.4 正交性

例 **3.3.2.** 试证明 Hermite 多项式是带权函数（$\rho(x) = exp(-x^2)$）的正交函数系：

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi &= \quad 0 \\ \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi &= \quad 2^n n! \sqrt{\pi} \end{cases}$$

证明. 谐振子方程: $\dfrac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)\Psi=0$

有 $\lambda=2n+1$

$\rightarrow \Psi_n''+(2n+1-\xi^2)\Psi_n=0$

解为: $u_n(x)=H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$

$u_n''+(2n+1-\xi^2)u_n=0$, $u_m''+(2n+1-\xi^2)u_m=0$

$u_m u_n''+(2n+1-\xi^2)u_m u_n=0$, $u_n u_m''+(2n+1-\xi^2)u_n u_m=0$

$u_m u_n''-u_n u_m''+2(n-m)u_n u_m=0$

$\int_{-\infty}^{+\infty}[u_m u_n''-u_n u_m'']d\xi=[u_m u_n''-u_n u_m'']\mid_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}[u_m' u_n'-u_n' u_m']d\xi=0$

因此 $2(n-m)\int_{-\infty}^{+\infty}u_n u_m d\xi=0$

即: $\int_{-\infty}^{+\infty}H_m(\xi)H_n(\xi)d\xi=0$ 由递推公式:

$H_n-2xH_{n-1}+2(n-1)H_{n-2}=0$

$=>\ H_n^2-2xH_nH_{n-1}+2(n-1)H_nH_{n-2}=0$

$H_{n+1}-2xH_n+2nH_{n-1}=0$

$=>\ H_{n+1}H_{n-1}-2xH_nH_{n-1}+2nH_{n-1}^2=0$

两次相减, 乘以权重函数, 求积分, 得积分递推式:

$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}H_n^2(\xi)d\xi=2n\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}H_{n-1}^2(\xi)d\xi$

$=2n\times 2(n-1)\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}H_{n-2}^2(\xi)d\xi$

$=2n\times 2(n-1)...(2(n-n))\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}H_0^2(\xi)d\xi$

$=2^n n!\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}H_0^2(\xi)d\xi$

$=2^n n!\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\xi^2}d\xi$

$=2^n n!\sqrt{\pi}$

评论. 厄密多项式是正交完全集, 一般函数都可按厄密多项式展开。

3.3.5 谐振子波函数的归一化

谐振子的解: ....

$\Psi_n(\xi)=N_n e^{-\xi^2}H_n(\xi)$

归一化能量固有函数:

$\Psi_n(x)=\left(\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}e^{-a^2x^2}H_n(\alpha x)$

定态波函数:

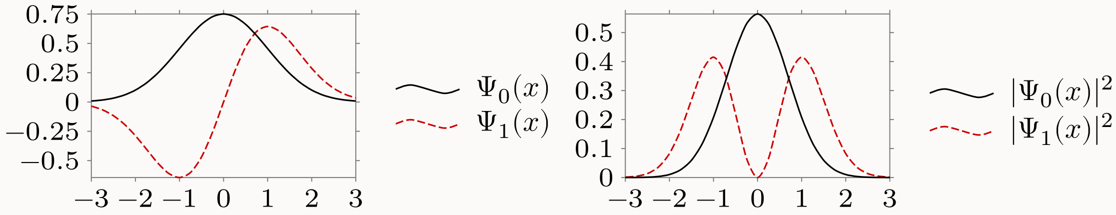
$\Psi_n(x,t) = \Psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

$= \left(\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} e^{-a^2x^2-\frac{i}{\hbar}E_n t} H_n(\alpha x)$

叠加解:

$\Psi(x,t) = \sum a_n Psi_n(x,t)$

下图给出了基态和第一激发态函数及概率分布



3.3.6 作业:

1、将函数 $f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$ 按厄米多项式展开

参考答案: $f(x) = \dfrac{1}{8}H_3 + \dfrac{1}{2}H_2 + \dfrac{3}{4}H_1 + 2H_0$

2、写出厄米多项式的递推公式, 并求 $H_n(0), H_n'(0), H_n(1), H_n'(1)$

3、求解如下初值问题

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{1}{2}\mu\omega^2 x\right]\Psi \\ \Psi(x,0) = \psi(x) \end{cases}$$

第四章 氢原子（10 学时）

- 主要内容：氢原子 Schrodinger 方程球坐标下的分离变量法分解、Laguerre 方程，Laguerre 多项式，Laguerre 多项式的微分形式，缔合 Laguerre 多项式，Laguerre 多项式的递推公式，Laguerre 多项式的正交归一性。
- 重点和难点：径向方程和角向方程，广义 Laguerre 方程导出，Laguerre 多项式性质，Legendre 多项式性质。
- 掌握：氢原子 Schrödinger 方程分解，径向方程和角向方程求解方法、Laguerre 多项式的基本特点，Legendre 多项式性质。
- 理解：Laguerre 多项式的递推公式。
- 了解：Laguerre 方程的求解过程。

4.1 氢原子薛定谔方程分离变量

4.1.1 相对坐标系

氢原子薛定谔方程 氢原子含一原子核和一核外电子，是二体问题。

- 哈密顿量为：

$$H=\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2+V(\vec{r}_1,t)\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2+V(\vec{r}_2,t)\right]+U(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)$$

其中 V 为背景势，U 为库仑势 (相互作用势)：

$$U(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)=-\frac{e_s^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\quad,\quad e_s=\frac{Ze}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$$

- 薛定谔方程为：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,t)=H(\vec{r}_1,\vec{r}_2,t)\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,t)$$

- 当背景势 V 不显含时间 t，时空可分离变量。解得的时间函数为：

$$f(t)=e^{-iEt/\hbar}$$

空间函数服从定态薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2+V_1-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2+V_2+U_{1,2}\right]\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2})=E\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2})$$

对于自由氢原子, 背景势 V=0，方程简化为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2+U(|\vec{r_1}-\vec{r_2}|)\right]\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2})=E\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2})$$

其中,

$$U(|\vec{r_1}-\vec{r_2}|)=-\frac{e_s^2}{|\vec{r_1}-\vec{r_2}|}$$

这是一个 6 维势, 决定着方程求解的难度.

相对坐标 ● 引入相对坐标和质心坐标

令：(1) $\begin{cases}\vec{r}(x,y,z)=\vec{r_1}-\vec{r_2}, & \text{(相对坐标)}\\ \vec{R}(X,Y,Z)=\dfrac{m_1\vec{r_1}+m_2\vec{r_2}}{m_1+m_2}, & \text{(质心坐标)}\end{cases}$

(2) $\begin{cases}m=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}, & \text{(折合质量)}\\ M=m_1+m_2, & \text{(质心质量)}\end{cases}$

可实现变量分离!

有坐标函数: $\begin{cases}\vec{r_1}=f_1(\vec{r},\vec{R})\\ \vec{r_2}=f_2(\vec{r},\vec{R})\end{cases}$

对其求导:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx_1}&=\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1}=\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial x}\\ \frac{d^2}{dx_1^2}&=\frac{m_1^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2m_1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X\partial x}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\\ \nabla_1^2&=\frac{m_1^2}{M^2}\nabla_R^2+\frac{2m_1}{M}(\frac{\partial^2}{\partial X\partial x}+\frac{\partial^2}{\partial Y\partial y}+\frac{\partial^2}{\partial Z\partial z})+\nabla_r^2\\ \nabla_2^2&=\frac{m_2^2}{M^2}\nabla_R^2-\frac{2m_2}{M}(\frac{\partial^2}{\partial X\partial x}+\frac{\partial^2}{\partial Y\partial y}+\frac{\partial^2}{\partial Z\partial z})+\nabla_r^2\end{aligned}$$

结合在一起，得:

$$\frac{1}{m_1}\nabla_1^2+\frac{1}{m_2}\nabla_2^2=\frac{1}{M}\nabla_R^2+\frac{1}{m}\nabla_r^2$$

代回简化后的方程，得:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{R},\vec{r})=E\Psi(\vec{R},\vec{r})$$

相对和质心坐标可分离变量!
令：$\Psi(\vec{R},\vec{r})=\psi(\vec{R})\Psi(\vec{r})$, 代入上方程,

质心运动方程 得方程（1）:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\psi(\vec{R})=E_c\psi(\vec{R}).....(1)$$

这是质心运动方程，解为自由粒子平面波:

$$\psi(\vec{R},t)=-\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}(E_ct-\vec{p}\cdot\vec{R})}$$

相对运动方程 不失一般性, 方程（2）写为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r}).....(2)$$

这是相对运动方程，是核与核外电子相对于质心的运动方程.
可以近似地看成是核外电子相对于核的运动方程.

其中,

$$U(\vec{r})=U(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)=-\frac{e_s^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}=-\frac{e_s^2}{r}\quad,\quad r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

有

$$U(r)=-\frac{e_s^2}{r}$$

是一个与角量无关的物理量。
若改用球坐标系描述方程（2）, 则经向 r 可分离变量!

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(r)\right]\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r}).....(2)$$

因此要求普拉斯算子 ∇^2 的球坐标系形式

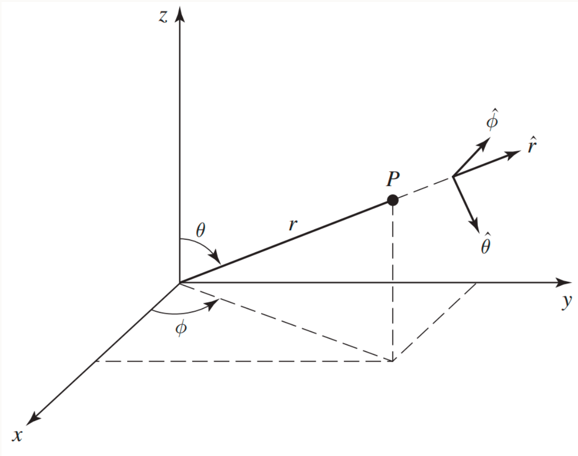
4.1.2 球坐标拉普拉斯

球坐标拉普拉斯算子

例 **4.1.1.** 例-1. 已知 x,y,z）坐标系下的拉普拉斯算子为:

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

求（r,θ,φ）坐标系下的拉普拉斯算子



解： 坐标变换关系为：

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

对函数 $u(x,y,z)$，进行 r,θ,φ 求导，有：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial r} = \dfrac{\partial u}{\partial x}\dfrac{\partial x}{\partial r} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\dfrac{\partial y}{\partial r} + \dfrac{\partial u}{\partial z}\dfrac{\partial z}{\partial r} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \theta} = \dfrac{\partial u}{\partial x}\dfrac{\partial x}{\partial \theta} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\dfrac{\partial y}{\partial \theta} + \dfrac{\partial u}{\partial z}\dfrac{\partial z}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \varphi} = \dfrac{\partial u}{\partial x}\dfrac{\partial x}{\partial \varphi} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\dfrac{\partial y}{\partial \varphi} + \dfrac{\partial u}{\partial z}\dfrac{\partial z}{\partial \varphi} \end{cases}$$

写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial r} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ r\cos\theta\cos\varphi & r\cos\theta\sin\varphi & -r\sin\theta \\ -r\sin\theta\sin\varphi & r\sin\theta\cos\varphi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial x} \\ \dfrac{\partial u}{\partial y} \\ \dfrac{\partial u}{\partial z} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial r} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial u}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & r\sin\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ \cos\theta\cos\varphi & \cos\theta\sin\varphi & -\sin\theta \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial x} \\ \dfrac{\partial u}{\partial y} \\ \dfrac{\partial u}{\partial z} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial x} \\ \dfrac{\partial u}{\partial y} \\ \dfrac{\partial u}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u}{\partial \theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial u}{\partial \varphi} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{e}_r & \vec{e}_\theta & \vec{e}_\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial u}{\partial \varphi} \end{bmatrix}$$

球坐标系下, 有:

$$\nabla = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \nabla\cdot\nabla \\ &= (\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi})\cdot(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + (\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}) + (\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}) \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

- 利用球坐标单位矢 (1) 正交归一性和 (2) 微分性质完成计算（见讲义 15 页）

直角坐标 (x,y,z):

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

球坐标 (r,θ,φ)：

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

令角向部分为:

$$L^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]$$

有:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{r^2}L^2$$

的确它由径向和角向二部分加和构成, 因此可实现径向和角向的分离变量!

角向与角动量的关系 角向 (方) 算子:

$$L^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]$$

角动量 (方) 算子:

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]$$

动量的切向分量

$$p_\perp^2 = \frac{L^2}{r^2}$$

动量的径向分量

$$p_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})$$

得动量算子:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2$$

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad \text{or} \quad i\hbar\nabla$$

在球坐标系下,

$$\hat{p} = -i\hbar(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

位置算子 $\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$

矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r\sin\theta\cos\varphi \\ r\sin\theta\sin\varphi \\ r\cos\theta \end{bmatrix} = r\vec{e}_r$$

球坐标系下, 位置算子:

$$\hat{r} = r\vec{e}_r$$

角动量: $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$,

球坐标系下, 角动量算子:

$$\hat{L} = \hat{r}\times\hat{p} = -i\hbar r\vec{e}_r\times\nabla$$

$$\hat{L} = -i\hbar(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin\theta}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= -\hbar^2(e_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin\theta}e_\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})\cdot(e_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin\theta}e_\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ &= -\hbar^2(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})\end{aligned}$$

正是前面的假设, 完全自洽!

同样, 可得到角动量的 Z 分量 (不证):

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

4.1.3 球坐标系氢原子方程

球坐标系氢原子方程 球坐标下的哈密顿量（折合质量 m 计为 μ):

$$\begin{aligned}H &= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}L^2 - \frac{e_s^2}{r} \\ &= \frac{1}{2\mu}p_r^2 + \frac{1}{2\mu r^2}L^2 - \frac{e_s^2}{r}\end{aligned}$$

球坐标系氢原子定态方程:

$$\left[(\frac{1}{2\mu}p_r^2-\frac{e_s^2}{r})+\frac{1}{2\mu}p_\perp^2\right]\Psi(r,\theta,\varphi)=E\Psi(r,\theta,\varphi)$$

方程可做动量的径向/切向分离.......

为了与数学方程统一, 先不考虑物理意义, 仅采用角向 (方) 算子 L^2（与角动量 (方) 算子差 $\hbar^2$）:

$$L^2=-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

球坐标系下的方程为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}L^2-\frac{e_s^2}{r}\right]\Psi=E\Psi$$

数学上的径向/角向分离变量，令:

$$\Psi=R(r)Y(\theta,\varphi)$$

代回原方程，得:

$$\frac{L^2Y}{Y}=\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})=\lambda$$

氢原子的定态方程在球坐标系下变量分离, 得两个方程:

(1) 角向方程:

$$L^2Y=\lambda Y$$

(2) 径向方程:

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})R=\lambda R$$

下面分别求解数学上的角向/径向方程...

作业 1、求基向量 $(\vec{e}_r,\vec{e}_\theta,\vec{e}_\varphi)$ 点积和叉积的运算规律

2、求如下偏分

$$\frac{\partial}{\partial\theta}e_\theta,\qquad \frac{\partial}{\partial\theta}e_r$$

3、角向算子与角动量算子有什么区别?

4、为什么只有氢原子薛定谔方程可以精确求解?

4.2 角向方程与勒让德多项式

4.2.1 经/纬分离

角向方程分离变量 (1) 角向方程:

$$L^2Y=\lambda Y$$

令 $\lambda = l(l+1)$ 课外参考 点这里

$$L^2 Y = l(l+1) Y$$

代入角向算子：

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + l(l+1)\right] Y = 0$$

方程可进一步分离变量，令：

$$Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

代回上方程, 得:

$$\Phi\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \Theta\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + l(l+1)\Theta\Phi = 0$$

整理：

$$\frac{\sin^2\theta}{\Theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \sin^2\theta l(l+1) = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \lambda$$

（1）经度方程：

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \lambda\Phi = 0, (0 < \varphi \leq 2\pi)$$

（2）纬度方程：

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{\lambda}{\sin^2\theta}\right]\Theta = 0, (0 < \theta \leq \pi)$$

4.2.2 解经度方程

解经度方程 经度方程是周期性边界条件下的固有值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \lambda\Phi = 0, 0 < \varphi < 2\pi \\ \Phi(0) = \Phi(2\pi), \Phi'(0) = \Phi'(2\pi) \end{cases}$$

特征方程有两虚根，对应固有值和固有函数为：

$$\begin{cases} \lambda = m^2, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \\ \Phi_m(\varphi) = A\cos m\varphi + B\sin m\varphi \end{cases}$$

指数形式

$$\Phi_m(\varphi) = A_m e^{im\varphi}$$

求归一化系数:

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1$$

$$\int_0^{2\pi} A_m e^{im\varphi} A_m e^{-im\varphi} d\varphi = 1$$

$$A_m^2 \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = 1$$

$$A_m^2 2\pi = 1$$

$$A_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\to \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

4.2.3 解纬度方程

解纬度方程 把固有值 $\lambda = m^2$ 代回纬度方程，得 m 阶连带勒让德方程:

$$\boxed{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta = 0}$$

解: 微分展开，得:

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta = 0$$

(勒让德) 令: $x = \cos\theta$, $y(x) = y(\cos\theta) = \Theta(\theta)$, 有:

$$\frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta$$

$$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dy}{dx}\frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta\frac{dy}{dx}$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = \sin^2\theta\frac{d^2y}{dx^2} - \cos\theta\frac{dy}{dx}$$

代回方程, 注意 $(\cos\theta = x,\ \sin\theta = 1 - x^2)$,
得标准连带勒让德方程:

$$(1 - x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - x^2}\right]y = 0, \quad (|x| \le 1)$$

若 m=0，就是 (0 阶) 勒让德方程:

$$(1 - x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + l(l+1)y = 0$$

4.2.4 解勒让德方程

解勒让德方程

$$\boxed{(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+l(l+1)y=0}$$

解：(勒让德) 令方程有级数解，

$$y=\sum_{k=0}^{\infty}a_kx^k$$

求导，并代回方程，得:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{(k+1)(k+2)a_{k+2}+[l(l+1)-k(k+1)]a_k\right\}x^k=0$$

系数项为零:

$$(k+1)(k+2)a_{k+2}+[l(l+1)-k(k+1)]a_k=0$$

得递推式:

$$a_{k+2}=-\frac{(l-k)(l+k+1)}{(k+1)(k+2)}a_k$$

k 为偶数:

$$y_1(x)=\left[1-\frac{l(l+1)}{2}x^2+\frac{l(l+1)(l+3)(l-2)}{4!}x^4+\cdots\right]$$

k 为奇数:

$$y_2(x)=\left[x-\frac{(l-1)(l+2)}{3!}x^3+\frac{(l+2)(l+3)(l-1)(l-3)}{5!}x^5+\cdots\right]$$

方程的级数解:

$$y(x)=a_0y_1(x)+a_1y_2(x)$$

$$a_{k+2}=-\frac{(l-k)(l+k+1)}{(k+1)(k+2)}a_k$$

说明存在最高项 $k=l$

逆向递推式为

$$a_k=-\frac{(k+1)(k+2)}{(l-k)(l+k+1)}a_{k+2}$$

- 逆向递推式

$$a_{k-2}=-\frac{(k-1)(k)}{(l-k+2)(l+k-1)}a_k$$

注意到级数最高项 $k=l$, 现以 n 描述, 有

$$a_{n-2}=-\frac{(n-1)n}{2(2n-1)}a_n$$

令最高项系数:

$$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}=\frac{(2n-2)!\times 2n\times(2n-1)}{2^n(n-1)!\times n\times(n-2)!\times n\times(n-1)}$$

得逆向递推式:

$$a_{n-2}=-\frac{(2n-2)!}{2^n1!(n-1)!(n-2)!}$$

$$a_{n-2\times 2}=(-)^2\frac{(2n-2\times 2)!}{2^n2!(n-2)!(n-2\times 2)!}$$

一般式:

$$a_{n-2m}=(-1)^m\frac{(2n-2m)!}{2^nm!(n-m)!(n-2m)!}$$

得勒让德方程的多项式解:

$$y(x)=\sum_{k=0}^{\infty}a_kx^k=\sum_{m=0}^{[n/2]}(-1)^m\frac{(2n-2m)!}{2^nm!(n-m)!(n-2m)!}x^{n-2m}=P_n(x)$$

TIPS 指标计算:

$$k=n-2m$$

$$k=0,\to m=[n/2]$$

$$k=l=n,\to m=0$$

称此多项式为勒让德多项式 $P_n(x)$, 即 $P_l(x)$。

4.2.5 勒让德多项式及其性质

勒让德多项式

$$P_n(x)=\sum_{m=0}^{[n/2]}(-1)^m\frac{(2n-2m)!}{2^nm!(n-m)!(n-2m)!}x^{n-2m}$$

$$n=0,m=[n/2]=0;\qquad n=1,m=[n/2]=0;\qquad n=2,m=0,1;\cdots$$

取 x=cos θ, 得下表右列:

$P_0(x)=1$	$P_0(\cos\theta)=1$
$P_1(x)=x$	$P_1(\cos\theta)=\cos\theta$
$P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$	$P_2(\cos\theta)=\frac{1}{4}[3\cos 2\theta+1]$
$P_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$	$P_3(\cos\theta)=\frac{1}{8}[5\cos 3\theta+3\cos\theta]$
$P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$	$P_4(\cos\theta)=\frac{1}{64}[35\cos 4\theta+20\cos 2\theta+9]$

勒让德多项式性质 **性质 1**：勒让德多项式有如下微分形式:

$$P_n(x)=\frac{1}{2^nn!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n,\quad (n=0,1,2,3,\cdots\cdots)$$

证明: 由二项式定理，有:

$$\begin{aligned}\left(x^2-1\right)^n &= \sum_{m=0}^{n} C_n^m(-1)^m\left(x^2\right)^{n-m} \\ &= \sum_{m=0}^{n}\frac{(-1)^m n!}{m!(n-m)!}x^{2n-2m}\end{aligned}$$

求 n 次导,

$$\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n = \sum_{m=0}^{n}\frac{(-1)^m n!}{m!(n-m)!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^{2n-2m}\right)$$

当 $2n-2m<n$ 时，上次的右边导数为零，即非零的最高项为 $[n/2]$， 有:

$$\begin{aligned}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n &= \sum_{m=0}^{[n/2]}\frac{(-1)^m n!}{m!(n-m)!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^{2n-2m}\right) \\ &= \sum_{m=0}^{[n/2]}(-1)^m\frac{(2n-2m)!n!}{m!(n-m)!(n-2m)!}x^{n-2m}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n &= \sum_{m=0}^{[n/2]}(-1)^m\frac{(2n-2m)!}{2^n m!(n-m)!(n-2m)!}x^{n-2m} \\ &= P_n(x)\end{aligned}$$

证毕!

性质 2: 勒让德多项式具有如下母函数:

$$w(x,z)=\left(1-2zx+z^2\right)^{-1/2}$$

证明:即要证

$$\left(1-2zx+z^2\right)^{-1/2}=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)z^n$$

由二项式定理有:

$$(1+v)^p=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{p(p-1)\cdots(p-k+1)}{k!}v^k$$

取 $p=-1/2$，得:

$$\begin{aligned}(1+v)^{-1/2} &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\frac{1}{2}\frac{3}{2}\cdots\frac{2k-1}{2}}{k!}v^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\frac{1}{2}\frac{2}{2}\frac{3}{2}\frac{4}{2}\cdots\frac{2k-1}{2}\frac{2k}{2}}{(k!)^2}v^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{(2k)!}{2^{2k}(k!)^2}v^k\end{aligned}$$

取 $v=-2zx+z^2=-z(2x-z)$，有：

$$v^k=(-1)^k z^k(2x-z)^k=(-1)^k z^k\sum_{m=0}^{k}C_k^m(2x)^{k-m}(-z)^m$$

代回

$$(1-2zx+z^2)^{-\frac{1}{2}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(2k)!}{2^{2k}(k!)^2}\sum_{m=0}^{k}(-1)^m C_k^m(2x)^{k-m}z^{k+m}$$

令：$k+m=n$，则有关 z^n 的展开系数为

$$\begin{aligned}
&\sum_{k+m=n}\frac{(2k)!}{2^{2k}(k!)^2}(-1)^m C_k^m(2x)^{k-m}\\
&=\sum_{m=0}^{n}\frac{(2(n-m))!}{2^{2(n-m)}((n-m)!)^2}(-1)^m C_{n-m}^m(2x)^{n-2m}\\
&=\sum_{m=0}^{n}(-1)^m\frac{(2n-2m)!}{2^{2(n-m)}((n-m)!)^2}\frac{(n-m)!}{m!(n-2m)!}2^{n-2m}x^{n-2m}\\
&=\sum_{m=0}^{n}(-1)^m\frac{(2n-2m)!}{2^n m!(n-m)!(n-2m)!}x^{n-2m}\\
&=P_n(x)
\end{aligned}$$

证毕！

性质 3：勒让德多项式具有如下递推关系：

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

证明： 对于母函数的形式级数：

$$w(x,z)=(1-2zx+z^2-1/2)=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)z^n$$

求关于 z 的偏导：

$$\frac{\partial w}{\partial z}=\sum_{n=1}^{\infty}nP_n(x)z^{n-1}=\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)P_{n+1}z^n$$

$$\frac{\partial w}{\partial z}=(x-z)(1-2zx+z^2)-3/2$$

$$(1-2zx+z^2)\frac{\partial w}{\partial z}=(x-z)(1-2zx+z^2)-1/2$$

$$(1-2zx+z^2)\frac{\partial w}{\partial z}-(x-z)w=0$$

$$(1-2zx+z^2)\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)P_{n+1}z^n-(x-z)\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)z^n=0$$

整理，得

$$\sum_{n=1}^{\infty}[(n+1)P_{n+1}-(2n+1)xP_n+nP_{n-1}]z^n=0$$

系数项等于零，证毕!

性质 4：勒让德多项式具有正交性:

证明: 勒让德多项式满足勒让德方程 $(n=l)$

$$\left(1-x^2\right) P_n''(x)-2xP_n'(x)+n(n+1)P_n(x)=0$$

等价形式:

$$\left[\left(1-x^2\right) P_n'(x)\right]'+n(n+1)P_n(x)=0\cdots(1)$$

同理:

$$\left[\left(1-x^2\right) P_m'(x)\right]'+m(m+1)P_m(x)=0\cdots(2)$$

(1) 式 $\times P_m$, (2) 式 $\times P_n$, 所得两式相减并积分:

$$[n(n+1)-m(m+1)]\int_{-1}^{1} P_mP_ndx=\int_{-1}^{1}(P_n[\left(1-x^2\right) P_m']'-P_m[\left(1-x^2\right) P_n']')dx$$

上式右端分部积分,

$$\begin{aligned}&=(P_n[\left(1-x^2\right) P_m']-P_m[\left(1-x^2\right) P_n'])|_{-1}^{1}\\&\quad-\int_{-1}^{1}[\left(1-x^2\right) P_n'P_m'-\left(1-x^2\right) P_m'P_n']dx\\&=0\end{aligned}$$

因此，式子的左端

$$[n(n+1)-m(m+1)]\int_{-1}^{1} P_mP_ndx=0$$

有:

$$\int_{-1}^{1} P_mP_ndx=0,\cdots(n\neq m)$$

证毕!

性质 5：勒让德多项式平方可积

$$\int_{-1}^{1} P_nP_ndx=\frac{2}{2n+1}$$

证明: 由递推公式

$$nP_n-(2n-1)xP_{n-1}+(n-1)P_{n-2}=0$$

$$nP_n^2=(2n-1)xP_nP_{n-1}-(n-1)P_nP_{n-2}$$

$$\int_{-1}^{1} P_n^2dx=\frac{(2n-1)}{n}\int_{-1}^{1} xP_nP_{n-1}dx,\cdots(1)$$

递推式可写成

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

$$xP_n=\frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}+\frac{n}{2n+1}P_{n-1},\cdots(2)$$

把 (2) 代入 (1) 式,

得积分递推式

$$\int_{-1}^{1} P_n^2 dx = \frac{2n-1}{2n+1}\int_{-1}^{1} P_{n-1}^2 dx$$
$$= \frac{2n-1}{2n+1}\cdot\frac{2(n-1)-1}{2(n-1)+1}\int_{-1}^{1} P_{n-2}^2 dx$$

反复递推:

$$\int_{-1}^{1} P_n^2 dx = \frac{1}{2n+1}\int_{-1}^{1} P_0^2 dx = \frac{2}{2n+1}$$

证毕!

例 1: 利用勒让德多项式正交性计算积分:

$$\int_{-1}^{+1} x^2 P_n(x)dx$$

解: 由 $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n$, 得:

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1)$$

x^2 的勒让德多项式展开式:

$$x^2 = \frac{2}{3}P_2 + \frac{1}{3}P_0$$

原式为:

$$\int_{-1}^{+1} x^2 P_n dx = \int_{-1}^{+1} (\frac{2}{3}P_2 + \frac{1}{3}P_0)P_n dx$$

分情况讨论:

(1) $n = 0$,

$$\int_{-1}^{+1} x^2 P_n dx = \int_{-1}^{+1} \frac{1}{3}P_0 P_0 dx = \frac{1}{3}\frac{2}{2n+1} = \frac{2}{3}$$

(2) $n = 2$,

$$\int_{-1}^{+1} x^2 P_n dx = \int_{-1}^{+1} \frac{2}{3}P_2 P_2 dx = \frac{2}{3}\frac{2}{2n+1} = \frac{4}{15}$$

(3) $n \neq 0, 2$

$$\int_{-1}^{+1} x^2 P_n dx = 0$$

Tips: 得记住

$$1 = P_0$$
$$x = P_1$$
$$x^2 = \frac{1}{3}(2P_2 + P_0)$$
$$x^3 = \frac{1}{5}(2P_3 + 3P_1)$$

4.2.6 连带勒让德多项式

连带勒让德多项式 勒让德方程:

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+l(l+1)y=0$$

解为勒让德多项式

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}\left(x^2-1\right)^l,\quad (l=0,1,2,3,\cdots\cdots)$$

连带勒让德方程:

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]y=0$$

解为连带勒让德多项式

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x),\quad (m<l,l=0,1,2,3,\cdots\cdots)$$

证明思路：把勒让德多项式 $P_l(x)$ 代入勒让德方程，然后对勒让德方程逐级求导, m 次后得连带勒让德方程

$$(1-x^2)P_l''(x)-2xP_l'(x)+l(l+1)P_l(x)=0$$
$$(1-x^2)P_l^3(x)-2(1+1)xP_l''(x)+(l(l+1)-1(1+1)P_l'(x)=0$$
$$(1-x^2)P_l^4(x)-2(2+1)xP_l^3(x)+(l(l+1)-2(2+1)P_l''(x)=0$$
$$\cdots\cdots$$
$$(1-x^2)P_l^{m+2}(x)-2(m+1)xP_l^{m+1}(x)+(l(l+1)-m(m+1)P_l^m(x)=0$$

即：连带勒让德多项式 $P_l^m(x)$ 是连带勒让德方程的解,$(m<l)$

连带勒让德多项式性质:

(1) 正交性:

$$\int_{-1}^{1}P_{l'}^m P_l^m dx=0,\cdots(l'\neq l)$$

(2) 归一性:

$$\int_{-1}^{1}P_l^m P_l^m dx=\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{2}{2l+1}$$

(3) 递推式:

$$(l+1-m)P_{l+1}^m-(2l+1)xP_l^m+(l+m)P_{l-1}^m=0$$

球谐函数 [小结:] 氢原子角向方程:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+l(l+1)\right]Y=0$$

其解为球谐函数:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$$

经度函数为:

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},\qquad (m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l)$$

纬度函数为:

$$\Theta_{lm}(\theta)=P_l^m(\cos\theta),\quad (m\le l, l=01,2,3,\cdots(n-1))$$

Tips: n 由径向方程决定!

球谐函数归一化

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=A_{lm}P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}$$

求归一化系数

$$\iint|Y_{lm}|^2d\sigma=1$$

$$\iint A_{lm}^2|P_l^m(cos\theta)|^2|\Phi(\varphi)|^2d\sigma=1$$

$$A_{lm}^2 2\pi\int_0^\pi|P_l^m(cos\theta)|^2\sin\theta d\theta=1$$

$$A_{lm}^2 2\pi\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{2}{2l+1}=1$$

$$A_{lm}=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}$$

取出经度函数的实部和虚部, 球谐函数化为

$$Y_{lm}=A_{lm}P_l^m(\cos\theta)\Phi_m(\varphi)=A_{lm}\begin{cases}P_l^m(\cos\theta)\cos m\varphi\\ P_l^m(\cos\theta)\sin m\varphi\end{cases}$$

- 谐波是指频率为基波频率整数倍的波, 比如琴弦的一维谐波, 比如鼓面的二维谐波. 球谐函数描述的是球面上的三维谐波.

- 每一个基波都有自己的谐波! 因此球谐函数 Y_l^m 具有如下三角形排布 ● 称 l 为自由度,

$$\begin{array}{lllll}
Y_1^0 & Y_1^1 & & & \\
Y_2^0 & Y_2^1 & Y_2^2 & & \\
Y_3^0 & Y_3^1 & Y_3^2 & Y_3^3 & \\
Y_4^0 & Y_4^1 & Y_4^2 & Y_4^3 & Y_4^4
\end{array}$$

描述一个基波有多少个谐波,

- 称 m 为阶, 描述每一个谐波的阶, 阶高的称为高阶谐波.

作业 1、将 $x=\cos x$ 代入勒让德多项式, 写出前 4 个勒让德多项式表达式

2、求 x^4 的勒让德展开式

3、计算积分

$$\int_{-1}^1(x^2+x)P_l(x)dx,\qquad \int_{-1}^1x^kP_l(x)dx,\quad (k<l)\qquad \int_{-1}^1x^lP_l(x)dx$$

4.3 径向方程与拉盖尔多项式

4.3.1 广义拉盖方程

径向方程与拉盖方程 径向方程:

$$\boxed{\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})=\lambda R}$$

解: 取 $\lambda=l(l+1)$

$$\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})R=l(l+1)R$$

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r^2}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})R-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0$$

令 $\xi=\alpha r$, $U(\xi)=R(\xi/\alpha)$, $\alpha=\sqrt{-\frac{8\mu E}{\hbar^2}}$, $\beta=\frac{2\mu e_s^2}{\alpha\hbar^2}$,
进行伸缩变换......,

得一般形式:

$$\frac{d^2U}{d\xi^2}+\frac{2}{\xi}\frac{dU}{d\xi}-[\frac{1}{4}-\frac{\beta}{\xi}+\frac{l(l+1)}{\xi^2}]U=0\cdots(1)$$

考虑方程解的渐近行为:
(1) $r\to\infty$, $\xi\to\infty$, 有方程:

$$\frac{d^2U}{d\xi^2}-\frac{1}{4}U=0$$

特征方程有两互异实根，通解为:

$$U=C_1exp(\frac{1}{2}\xi)+C_2exp(-\frac{1}{2}\xi)$$

考虑到有界性，有特解:

$$U_\infty=Cexp(-\frac{1}{2}\xi)$$

(2) $r\to0$, $\xi\to0$，有欧拉方程:

$$\frac{d^2U}{d\xi^2}+\frac{2}{\xi}\frac{dU}{d\xi}+[-\frac{l(l+1)}{\xi^2}]U=0$$

通解为:

$$U=C_1\xi^{-(l+1)}+C_2\xi^l$$

考虑到有界性，有特解:

$$U_0=C\xi^l$$

作常数变异，令方程的解为:

$$U=H(\xi)\xi^lexp(-\frac{1}{2}\xi)$$

问题变为求多项式 $H(\xi)$

对上式求导，并把结果代回原方程（1），得

$$\xi H'' + [2(l+1) - \xi]H' + [\beta - (l+1)]H = 0$$

令

$$m = 2l+1, \qquad n = \beta - (l+1),$$

方程变为标准的连带拉盖方程

$$\boxed{xH'' + [m+1-x]H' + nH = 0}$$

取 $m=0$, 得一般拉盖方程：

$$\boxed{xy'' + [1-x]y' + ny = 0}$$

4.3.2 拉盖方程与拉盖多项式

解拉盖方程

$$\boxed{xy'' + [1-x]y' + ny = 0}$$

解： 设方程有级数解

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

求导，代回上方程，得

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(n-k)c_k + (k+1)^2 c_{k+1}]x^k = 0$$

得系数递推式：

$$c_{k+1} = -\frac{n-k}{(k+1)^2} c_k, \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

反复递推，有：

$$c_k = (-1)^k \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{(k!)^2} c_0, \qquad (k = 1, 2, \cdots, n)$$

当 $k=n$ 时，最高项系数为：

$$c_n = (-1)^n \frac{1}{n!} c_0,$$

级数解转化为多项式解（拉盖多项式），取

$$c_0 = n!, \quad c_n = (-1)^n = (-1)^k$$

拉盖多项式的系数为：

$$c_k = (-1)^k \frac{(n!)^2}{(k!)^2 (n-k)!}, \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots, n)$$

拉盖多项式:

$$
\begin{aligned}
L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k x^k &= \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{(n!)^2}{(k!)^2(n-k)!} x^k \\
&= \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{(n!)}{(k!)(n-k)!} \frac{n!}{k!} x^k \\
&= \sum_{k=0}^{n} (-1)^k C_n^k \frac{n!}{k!} x^k, \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots, n)
\end{aligned}
$$

Tips:

$$
\begin{aligned}
L_0(x) &= 1 \\
L_1(x) &= 1 - x \\
L_2(x) &= 2 - 4x + x^2 \\
L_3(x) &= 6 - 18x + 9x^2 - x^3
\end{aligned}
$$

课堂作业:

求 x, x^2, x^3 的拉盖尔展开式

拉盖多项式的性质 **性质 1**: 拉盖多项式微分形式

$$
L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})
$$

证明: 由高阶导数莱布尼兹公式

$$
(u \cdot v)^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} C_n^k u^{(k)} V^{(n-k)},
$$

得:

$$
\begin{aligned}
(e^{-x} \cdot x^n)^{(n)} &= \sum_{k=0}^{n} C_n^k [e^{-x}]^{(k)} [(x^n)^{(n-k)}] \\
&= \sum_{k=0}^{n} C_n^k [(-1)^k e^{-x}][\frac{n!}{k!} x^k]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
e^x \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} \cdot x^n) &= e^x \sum_{k=0}^{n} C_n^k [(-1)^k e^{-x}][\frac{n!}{k!} x^k] \\
&= \sum_{k=0}^{n} (-1)^k C_n^k \frac{n!}{k!} x^k \\
&= L_n(x)
\end{aligned}
$$

证毕!

性质 2: 拉盖多项式生成函数

$$
w(t, x) = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t}
$$

证明： 对函数在 $t=0$ 做泰勒展开

$$
\begin{aligned}
w(t,x) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{d^n w}{dt^n}|_{t=0}\frac{t^n}{n!}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}e^x\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}\cdot x^n)\frac{t^n}{n!}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}L_n\frac{t^n}{n!}
\end{aligned}
$$

性质 3： 拉盖多项式递推式

$$
\begin{aligned}
L_{n+1} &= (2n+1-x)L_n - n^2 L_{n-1}\\
L_1 &= (1-x)L_0
\end{aligned}
$$

证明：

$$
\begin{aligned}
w(t,x) &= \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t}\\
\frac{\partial w}{\partial t} &= [\frac{1}{(1-t)^2}-\frac{x}{(1-t)^3}]e^{-xt/(1-t)}\\
(1-t)^2\frac{\partial w}{\partial t} &= [1-t-x]w, \cdots\cdots(1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
w(t,x) &= \sum_{n=0}^{\infty}L_n\frac{t^n}{n!}\\
\frac{\partial w}{\partial t} &= \sum_{n=1}^{\infty}L_n\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}L_{(n+1)}\frac{t^n}{(n)!}\\
&= \sum_{n=2}^{\infty}L_{(n-1)}\frac{t^{n-2}}{(n-2)!}
\end{aligned}
$$

代入（1）式的左边，有：

$$
(1-t)^2\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty}L_{n+1}\frac{t^n}{(n)!} - 2\sum_{n=1}^{\infty}L_n\frac{t^n}{(n-1)!} + \sum_{n=2}^{\infty}L_{n-1}\frac{n(n-1)}{(n)!}t^n
$$

（1）式的右边，有：

$$
\begin{aligned}
[1-t-x]w &= (1-x)w - tw\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(1-x)L_n\frac{t^n}{n!} - \sum_{n=0}^{\infty}L_n\frac{t^{n+1}}{n!}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(1-x)L_n\frac{t^n}{n!} - \sum_{n=1}^{\infty}L_{n-1}\frac{t^n}{(n-1)!}
\end{aligned}
$$

（1）式的左边 = 右边，整理得递推式！

$$
L_{n+1} = (2n+1-x)L_n - n^2 L_{n-1}
$$

性质 4: 拉盖多项式带权 (e^{-x}) 正交

证明: 拉盖多项式满足拉盖方程:

$$\begin{aligned}
xL_n'' + [1-x]L_n' + nL_n &= 0 \\
[xe^{-x}L_n']' + ne^{-x}L_n &= 0 \\
[xe^{-x}L_m']' + me^{-x}L_m &= 0 \\
L_m[xe^{-x}L_n']' + ne^{-x}L_mL_n &= 0 \\
L_n[xe^{-x}L_m']' + me^{-x}L_nL_m &= 0 \\
(m-n)\int_0^\infty e^{-x}L_nL_m dx &= \int_0^\infty [L_n[xe^{-x}L_m']' - L_m[xe^{-x}L_n']']dx \\
&= -\int_0^\infty L_n'[xe^{-x}L_m']dx + L_m'[xe^{-x}L_n']dx \\
&= \int_0^\infty [xe^{-x}L_m'L_n' - xe^{-x}L_n'L_m']dx = 0
\end{aligned}$$

性质 5: 拉盖多项式带权 (e^{-x}) 平方可积

证明: 有递推式

$$\begin{aligned}
L_{n+1} &= (2n+1-x)L_n - n^2L_{n-1} \\
L_n &= (2n-1-x)L_{n-1} - (n-1)^2L_{n-2} \\
L_n^2 &= (2n-1-x)L_nL_{n-1} - (n-1)^2L_nL_{n-2} \\
L_{n-1}L_{n+1} &= (2n+1-x)L_{n-1}L_n - n^2L_{n-1}^2 \\
\int_0^\infty e^{-x}L_n^2 dx &= n^2\int_0^\infty e^{-x}L_{n-1}^2 dx \\
&= (n!)^2\int_0^\infty e^{-x}L_0^2 dx \\
&= (n!)^2
\end{aligned}$$

4.3.3 连带拉盖多项式

连带拉盖多项式 连带拉盖方程

$$\boxed{xH'' + [m+1-x]H' + nH = 0}$$

量子力学为实现归一化, 在 $m=0$ 时定义了广义拉盖多项式, 与数学上的拉盖多项式差 $\dfrac{1}{n!}$

$$L_n^0(x) = \frac{1}{n!}L_n(x) = \frac{1}{n!}\sum_{k=0}^{n}(-1)^k C_n^k \frac{n!}{k!}x^k$$

连带拉盖多项式是在 $m \neq 0$ 时的广义拉盖多项式

$$L_n^m(x) = \frac{1}{n!}\sum_{k=0}^{n}(-1)^k C_n^k \frac{(n+m)!}{(m+k)!}x^k$$

微分形式:

$$L_n^m(x) = \frac{x^{-m}e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^{m+n}e^{-x})$$

递推式:

$$(n+1)L_{n+1}^m = (2n+1+m-x)L_n^m - (n+m)L_{n-1}$$

正交性:

$$\int_0^\infty e^{-x}x^m L_n^m L_k^m dx = 0, \qquad (k \neq n)$$

归一性:

$$\int_0^\infty e^{-x}x^m [L_n^m]^2 dx = \frac{(n+m)!}{n!}$$

归一性推论:

$$\int_0^\infty e^{-x}x^{m+1}[L_n^m]^2 dx = \frac{(n+m)!}{n!}(2n+m+1)$$

能量固有值问题 注意到 $\xi = \alpha r$, $U(\xi) = R(\xi/\alpha)$, $\alpha = \sqrt{-\frac{8\mu E}{\hbar^2}}$, $\beta = \frac{2\mu e_s^2}{\alpha\hbar^2} = n, \beta - (l+1)$
能量固有值:

$$\begin{aligned} n =& \beta = \frac{2\mu e_s^2}{\alpha\hbar^2} \\ E_n =& -\frac{1}{n^2}\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2} = \frac{E_1}{n^2}, \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots) \end{aligned}$$

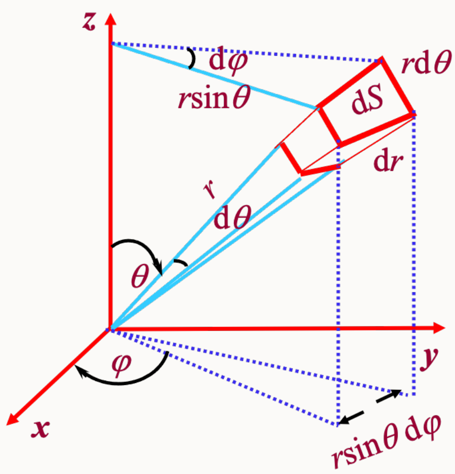
由于 $n - (l+1) \geq 0$, 有:

$$n = 1, 2, 3, \cdots, \qquad l = 0, 1, 2, 3, \cdots, n-1$$

能量固有解 (氢原子径向函数):

$$R_{nl}(r) = N_{nl}R(r) = N_{nl}\xi^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi)e^{-\xi/2}, \qquad (\xi = \alpha r)$$

* 求归一化系数



$$dS = (rd\theta)\cdot(r\sin\theta d\varphi) = r^2\sin\theta d\theta d\varphi$$
$$d\tau = dS\cdot dr = r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$$

* 求 N_{nl}

$$\iiint \Psi(r,\theta,\varphi)d\tau = 1$$
$$\iiint |N_{nl}R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi = 1$$
$$\int_0^\infty N_{nl}^2 R^2(r) r^2 dr = 1$$
$$\frac{1}{\alpha^3}\int_0^\infty N_{nl}^2 R^2(\xi)\xi^2 d\xi = 1$$
$$\frac{1}{\alpha^3}\int_0^\infty N_{nl}^2 \xi^{2l+2}[L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi)]^2 e^{-\xi} d\xi = 1$$
$$\frac{1}{\alpha^3}\int_0^\infty N_{nl}^2 \xi^{M+1}[L_N^M(\xi)]^2 e^{-\xi} d\xi = 1$$

$$\frac{1}{\alpha^3}N_{nl}^2\frac{(N+M)!}{N!}(2N+M+1) = 1$$

$\rightarrow$

$$N_{nl}^2\frac{2n[(n+1)!]^3}{\alpha^3(n-l-1)!} = 1$$
$$N_{nl} = \sqrt{\alpha^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}}$$

4.4 氢原子量子描述

小结: 解氢原

第一次分离变量

- 氢原子定态薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + U(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

- 质心运动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\psi(\vec{R}) = E_c\psi(\vec{R})$$

- 相对运动方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

第二次分离变量

- 角向方程:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+l(l+1)\right]Y=0$$

- 径向方程:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r^2}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})R-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0$$

第三次分离变量

- 经度方程:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+\lambda\Phi=0,(0<\varphi\leq 2\pi)$$

- 纬度方程:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{\lambda}{\sin^2\theta}\right]\Theta=0,(0<\theta\leq\pi)$$

- 径向方程:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r^2}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})R-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0$$

经度方程的解

- 经度方程:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+\lambda\Phi=0,(0<\varphi\leq 2\pi)$$

固有值和固有函数:

$$\begin{cases}\lambda=m^2, & (m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l)\\ \Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\end{cases}$$

物理上对应角动量 Z 方向投影:

$$L_z=m\hbar$$

纬度方程的解

- 纬度方程:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta=0,(0<\theta\leq\pi)$$

固有值

$$\begin{cases} m^2, & (m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l) \\ l(l+1), & (l=1,2,\cdots,n-1) \end{cases}$$

固有函数:

$$\Theta_{lm}(\theta)=P_l^m(\cos\theta)$$

角向方程的解

- 角向方程:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+l(l+1)\right]Y=0$$

角动量固有值

$$\begin{cases} m\hbar, & (m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l) \\ l(l+1)\hbar^2, & (l=1,2,\cdots,n-1) \end{cases}$$

固有函数:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}$$

径向方程的解

- 径向方程:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r^2}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+\frac{e_s^2}{r})R-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0$$

能量固有值

$$E_n=-\frac{1}{n^2}\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2}=\frac{E_1}{n^2}, \qquad (n=1,2,3,\cdots)$$

固有函数:

$$R_{nl}(r)=\sqrt{(\frac{2}{na_0})^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}}(\frac{2}{na_0}r)^lL_{n-l-1}^{2l+1}(\frac{2}{na_0}r)e^{-\frac{r}{na_0}}$$

氢原子的解

- 氢原子波函数:

$$\Psi_{nlmm_s}(r,\theta,\varphi,s) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)S_{m_s}(s)$$

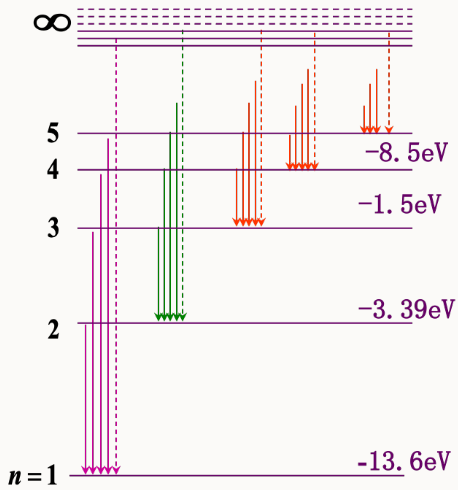
  - 主量子数: $n = 1, 2, 3, \cdots$, 能级, 轨道能量 (主 K, L, M, N, O, P, Q)
  - 角量子数: $l = 0, 1, 2, \cdots, n-1$, 角动量大小, 轨道形状 (次 s, p, d, f)
  - 磁量子数: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l$, 角动量方向, 轨道空间取向
  - 自旋量子数: $m_s = \pm 1/2$

轨道波函数

n	l	m	ψ
1	0	0	$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{Z}{a_0})^{3/2}e^{-\sigma}$ $\quad(\sigma = \frac{Z}{a_0}r)$
2	0	0	$\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{Z}{a_0})^{3/2}(2-\sigma)e^{-\frac{\sigma}{2}}$
2	1	0	$\psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{Z}{a_0})^{3/2}\sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}\cos\theta$
2	1	±1	$\psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{Z}{a_0})^{3/2}\sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}\sin\theta\cos\phi$ $\psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{Z}{a_0})^{3/2}\sigma e^{-\frac{\sigma}{2}}\sin\theta\sin\phi$
3	0	0	$\Psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}(27-18\sigma+2\sigma^2)e^{-\frac{\sigma}{3}}$

能级与光谱

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \cdots), \qquad \nu = \frac{E_n - E_m}{h} = R_H c[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}]$$



角动量量子化

- 角动量大小 $L^2 = l(l+1)\hbar^2$

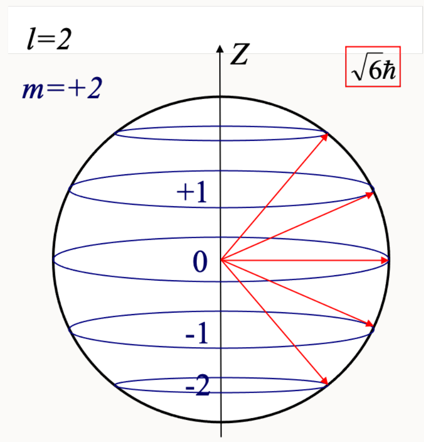
$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (l = 1, 2, \cdots, n-1)$

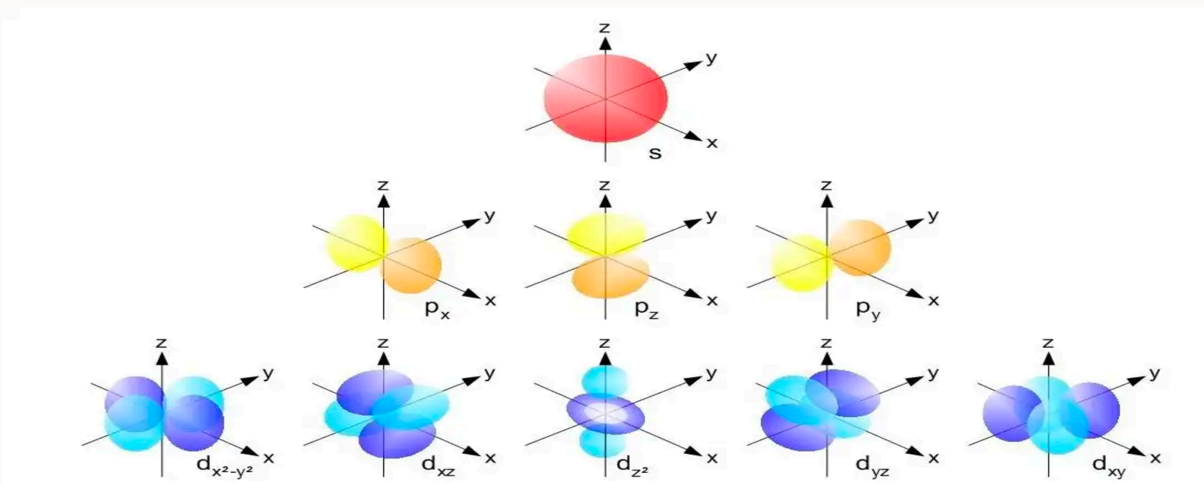
- 角动量 Z 投影 $L_z^2 = m^2\hbar^2$

$L_z = m\hbar, \quad (m = 0, \pm1, \pm2, \cdots, \pm l)$

- 大小和方向皆量子化

轨道的形态





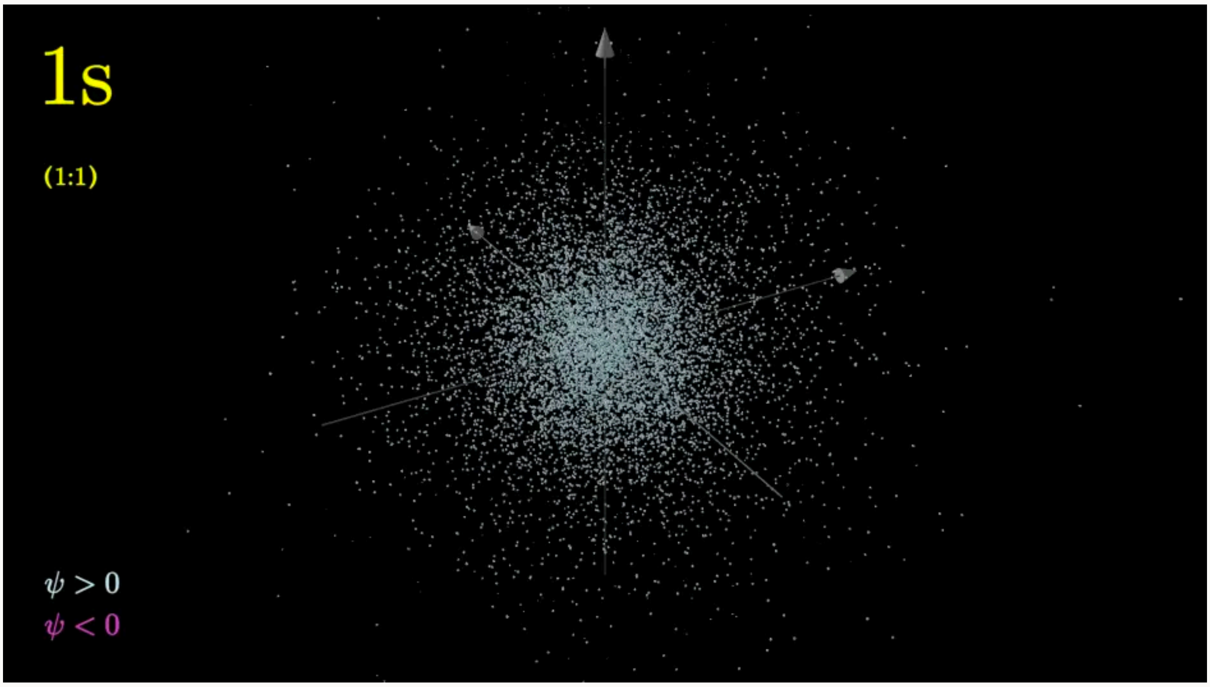
例 **4.4.1.** 例-求电子云的形态:

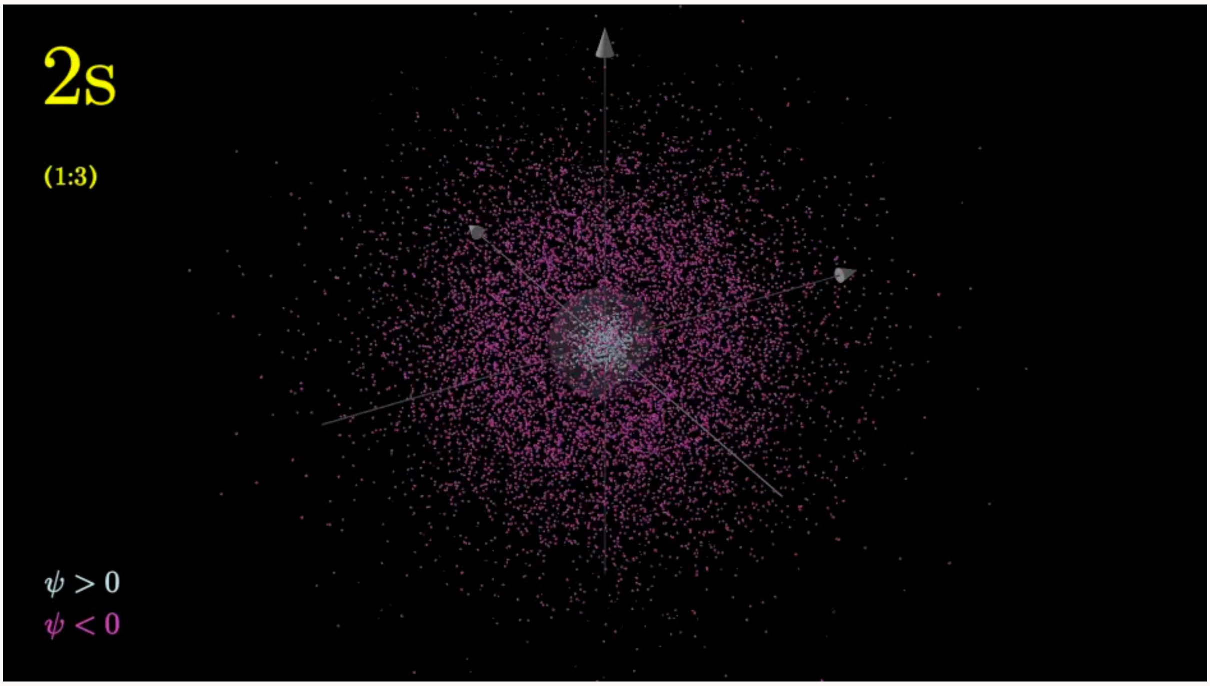
- 径向分布 ($r-r+dr$ 找到粒子的概率)

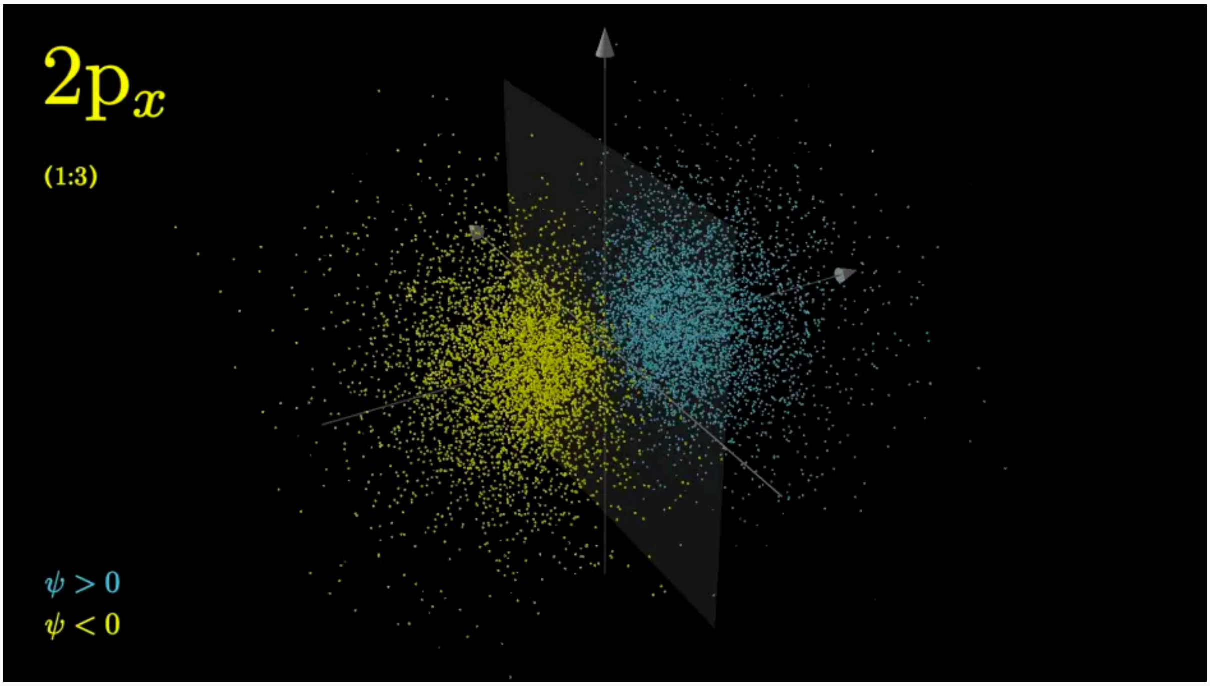
$$
\begin{aligned}
\omega_{nl}dr &= \int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}|R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2r^2\sin\theta drd\theta d\varphi \\
&= R_{nl}^2(r)r^2dr
\end{aligned}
$$

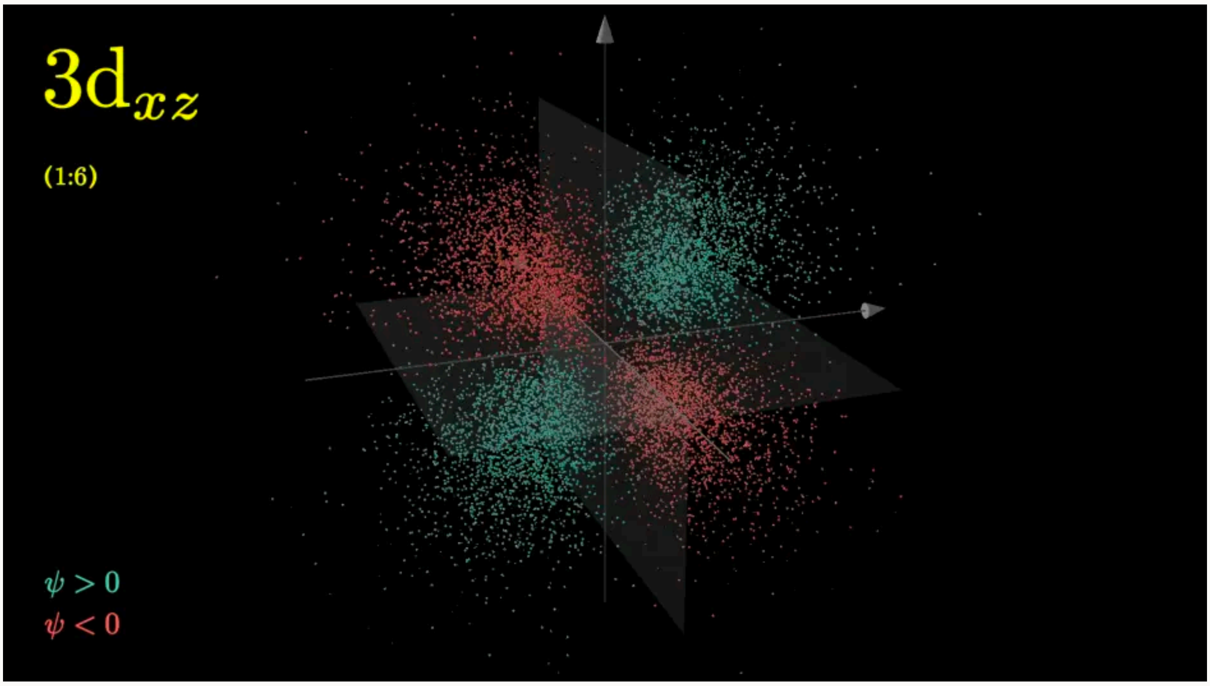
- $((\theta,\varphi)-(\theta+d\theta,\varphi+d\varphi)$ 找到粒子的概率)

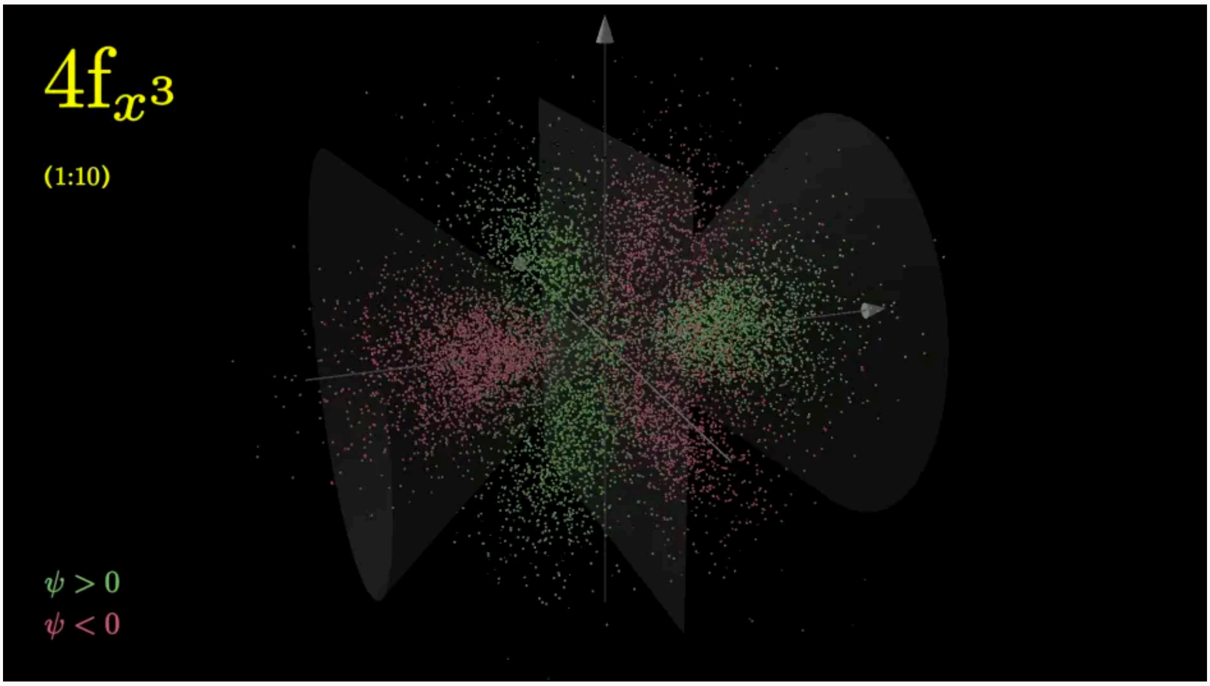
$$
\begin{aligned}
\omega_{lm}d\Omega &= \int_{r=0}^{\infty}|R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2r^2drd\Omega \\
&= |Y_{lm}|^2d\Omega
\end{aligned}
$$






$2p_x$
(1:3)
$\psi > 0$
$\psi < 0$


$3d_{xz}$
(1:6)
$\psi > 0$
$\psi < 0$



作业 1、证明拉盖多项式的正交性

2、求方程的解

$$\frac{d^2U}{d\xi^2}+\frac{2}{\xi}\frac{dU}{d\xi}+[\frac{\beta}{\xi}-\frac{l(l+1)}{\xi^2}]U=0$$

3、计算积分:

$$\int_0^{\infty} e^{-x}(L_1(x))^2dx, \qquad \int_0^{\infty} e^{-x}(L_2(x))^2dx,$$

4、写出 $L_1(x)$ 和 $L_1^0(x)$ 之间的关系式

随堂测试

例 **4.4.2.** 1. 粒子处于如下势场中:

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+1$$

求能量固有值和定态波函数。

例 **4.4.3.** 2. 基于厄米多项式的正交性求积分:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(x^3+1)e^{-x^2}H_n(x)dx$$

例 **4.4.4.** 1. 粒子处于如下势场中:

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+1$$

求能量固有值和定态波函数。

解: (1) 含时分离变量, 得时间函数: $T(t)=\exp(-iEt/\hbar)$

(2) 定态薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+1\right]\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right]\Psi(x)=(E-1)\Psi(x)$$

令 $E'=E-1$, 得:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right]\Psi(x)=E'\Psi(x)$$

此方程就是谐振子标准方程!

能量固有值 (能级 E_n)

$$E'_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\quad(n=0,1,2,...)$$

$$E_n=E'_n+1=1+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

定态波函数为

$$\Psi_n(x,t)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^nn!}\right)^{1/2}\exp(-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{\hbar}E_nt)H(\alpha x),\qquad(\alpha^2=\frac{\mu\omega}{\hbar})$$

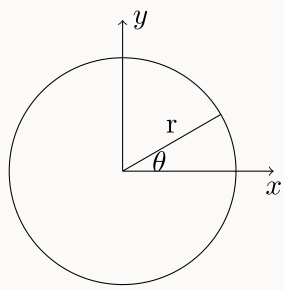
第五章　贝塞尔函数（8 学时）

- 主要内容：Bessel 方程求解、Bessel 函数的零点与固有值，Bessel 函数微分性质与递推公式，Gamma 函数及其性质，Bessel 函数的正交性，圆域上热传导方程级数解
- 重点和难点：Bessel 方程求解、Bessel 函数性质、圆域上热传导方程问题,Gamma 函数及其性质
- 掌握：求解 Bessel 方程，Bessel 函数基本性质和简单应用。
- 理解：Bessel 函数的母函数及递推公式。
- 了解：Bessel 方程及其推导过程。

5.1　贝塞尔方程

方程的建立

例 5.1.1. 例 1、建立贝塞尔方程 对于半径为 r_0 的侧面绝缘的薄均匀圆盘，边界温度始终保持为 0 度，当盘的初始温度已知时 $(\Psi(x, y))$，求体系的温度分布函数。



解：　这是一个温度场，是非稳恒场，服从热传导方程：

$$\begin{cases} u_t = a^2[u_{xx} + u_{yy}] \quad (0 < x^2 + y^2 < r_0^2, t > 0) \\ u(x, y, t)|_{x^2+y^2=r_0^2} = 0 \\ u(x, y, t)|_{t=0} = \Psi(x, y) \end{cases}$$

考虑到圆域边界条件，得使用极坐标描述

试证明极坐标拉普拉斯算子为:

$$[u_{xx}+u_{yy}]=[\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2}]$$

证明: 基本变换关系为

$$\begin{cases} x=r\cos\theta \\ y=r\sin\theta \end{cases}$$

对于函数 $u(x,y)=u(r\cos\theta,r\sin\theta)$ 计算导数:

$$\frac{\partial u}{\partial r}=\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial r}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial r}=\cos\theta\frac{\partial u}{\partial x}+\sin\theta\frac{\partial u}{\partial y}$$
$$\frac{\partial u}{\partial\theta}=\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial\theta}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta}=-r\sin\theta\frac{\partial u}{\partial x}+r\cos\theta\frac{\partial u}{\partial y}$$

改写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial r}\\ \frac{\partial u}{\partial\theta}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -r\sin\theta & r\cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial x}\\ \frac{\partial u}{\partial y}\end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial r}\\ \frac{\partial u}{\partial\theta}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial x}\\ \frac{\partial u}{\partial y}\end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial x}\\ \frac{\partial u}{\partial y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1/r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial r}\\ \frac{\partial u}{\partial\theta}\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial x}\\ \frac{\partial u}{\partial y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial r}\\ \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\theta}\end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial x}\\ \frac{\partial u}{\partial y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\vec{e}_r & \vec{e}_\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial u}{\partial r}\\ \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\theta}\end{bmatrix}$$
$$\nabla=\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$$
$$\begin{aligned}\nabla^2&=\nabla\cdot\nabla\\ &=(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta})\cdot(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta})\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 &= \vec{e}_r\cdot\frac{\partial}{\partial r}(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta})+\vec{e}_\theta\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta})\\
&= \vec{e}_r\cdot(\frac{\partial\vec{e}_r}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_r\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial r}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial r}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}))\\
&\quad+\vec{e}_\theta\cdot(\frac{1}{r}\frac{\partial\vec{e}_r}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}))\\
&= \vec{e}_r\cdot(0\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_r\frac{\partial^2}{\partial r^2}+0\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial r}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}))\\
&\quad+\vec{e}_\theta\cdot(\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}(-\vec{e}_r)\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2})\\
&= \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}
\end{aligned}
$$

Tips: $\dfrac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta}=-\vec{e}_r;\quad \dfrac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial r}=0;\quad \dfrac{\partial\vec{e}_r}{\partial r}=0;\quad \dfrac{\partial\vec{e}_r}{\partial\theta}=\vec{e}_\theta$

极坐标系下的方程
$$
\begin{cases}
u_t=a^2[\dfrac{\partial^2u}{\partial r^2}+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u}{\partial r}+\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2u}{\partial\theta^2}], & (0<r<r_0,t>0)\\
u(r_0,\theta)=0, & 0<\theta<2\pi\\
u(r,\theta,t=0)=\Psi(r,\theta), & 0<\theta<2\pi
\end{cases}
$$

令：$u(r,\theta,t)=R(r)\Theta(\theta)T(t)$, 代回原方程，得:

$$R\Theta T'=a^2[R''\Theta T+\frac{1}{r}R'\Theta T+\frac{1}{r^2}R\Theta''T(t)]$$

整理:

$$\frac{T'}{a^2T}=\frac{R''}{R}+\frac{1}{r}\frac{R'}{R}+\frac{1}{r^2}\frac{\Theta''}{\Theta}=-\lambda$$

转化为两个方程:

$$T'(t)+\lambda a^2T(t)=0 \qquad .... \qquad (1)$$

方程 1 是衰减模型，已求解！

$$r^2\frac{R''(r)}{R(r)}+r\frac{R'(r)}{R(r)}+\lambda r^2+\frac{\Theta''(\theta)}{\Theta(\theta)}=0 \qquad ...... \quad (2)$$

方程 2 是固有值问题，可继续分离变量:

$$r^2\frac{R''(r)}{R(r)}+r\frac{R'(r)}{R(r)}+\lambda r^2=-\frac{\Theta''(\theta)}{\Theta(\theta)}=\mu$$

角向固有值问题:
$$
\begin{cases}
\Theta''(\theta)+\mu\Theta(\theta)=0\\
\Theta(\theta)=\Theta(\theta+2\pi)\\
\Theta'(\theta)=\Theta'(\theta+2\pi)
\end{cases}
$$

径向固有值问题:
$$
\begin{cases}
r^2R''(r)+rR'(r)+(\lambda r^2-\mu)R(r)=0\\
R(r_0)=0
\end{cases}
$$

角向固有值问题有解,

固有值:

$$\mu = n^2, \qquad (n = 0, 1, 2, 3...)$$

固有函数:

$$\Theta_n(\theta) = a_n \cos(n\theta) + b_n \sin(n\theta), \qquad (n = 0, 1, 2, 3...)$$

$$\Theta_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-in\theta}, \qquad (n = 0, 1, 2, 3...)$$

把 $\mu = n^2$, 代回径向方程，得径向固有值问题:

$$\boxed{\begin{cases} r^2 R''(r) + rR'(r) + (\lambda r^2 - n^2)R(r) = 0 \\ R(r_0) = 0 \end{cases}}$$

称为贝塞尔方程

例 5.1.2. 例 2、试证明圆域波动方程的径向固有值问题也是贝塞尔方程:

证明: 圆域波动方程如下:

$$\begin{cases} u_{tt} = a^2[u_{xx} + u_{yy}] \quad (0 < x^2 + y^2 < r_0^2, t > 0) \\ u(x, y, t)|_{x^2+y^2=r_0^2} = 0 \\ u(x, y, t)|_{t=0} = \Psi(x, y) \\ u_t(x, y, t)|_{t=0} = \varphi(x, y) \end{cases}$$

考察方程, 发现当使用极坐标拉普拉斯算子后, 整个的分离变量过得与热传导方程高度一致,(*P115)

其固有值问题也是贝塞尔方程!

$$\begin{cases} r^2 R''(r) + rR'(r) + (\lambda r^2 - n^2)R(r) = 0 \\ R(r_0) = 0 \end{cases}$$

结论: 贝塞尔方程是圆域极坐标条件下的一个普适的径向本征方程!

$$\begin{cases} r^2 R''(r) + rR'(r) + (\lambda r^2 - n^2)R(r) = 0 \\ R(r_0) = 0 \end{cases}$$

在正式求解之前, 先预处理一下

令:

$$x = \sqrt{\lambda} r, \qquad y(x) = R(r) = R(\frac{x}{\sqrt{\lambda}})$$

有:

$$\frac{dy}{dx}=\frac{dR}{dr}\frac{dr}{dx}=\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\frac{dR}{dr}$$

$$\frac{d^2y}{dx^2}=\frac{1}{\lambda}\frac{dR^2}{dr^2}$$

代回原方程,

得:

$$\boxed{x^2\frac{d^2y}{dx^2}+x\frac{dy}{dx}+(x^2-n^2)y=0}$$

称为 n 整数阶贝塞尔方程.

- 与欧拉方程比较:

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2}+x\frac{dy}{dx}+n^2y=0$$

欧拉方程是一个变系数微分方程, 可通过变量代换 (令 $t=\ln x$) 转化为常系数微分方程

$$\frac{d^2y}{dt^2}-n^2y=0$$

若同样令 $t=\ln x$, 贝塞尔方程转化为

$$\frac{d^2y}{dt^2}+(x^2-n^2)y=0$$

依然是变系数微分方程, 无法进一步进行求解.
因此, 贝塞尔方程没有通常意义的初等函数表达式解!

方程的求解

例 **5.1.3.** 例 2、求解贝塞尔方程

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2}+x\frac{dy}{dx}+(x^2-n^2)y=0$$

解: 没有通常意义的初等函数表达式解, 即没有通常意义的级数解,
尝试, 设方程有如下非一般意义的级数解:

$$y=\sum_{k=0}^{\infty}a_kx^{s+k},\qquad (a_0\neq 0)$$

求导:

$$y'=\sum_{k=0}^{\infty}(s+k)a_kx^{s+k-1}$$

$$y''=\sum_{k=0}^{\infty}(s+k)(s+k-1)a_kx^{s+k-2}$$

代回原方程 (注意脚标的变化), 得:

$$\sum_{k=0}^{\infty}[(s+k)^2-n^2]a_kx^{s+k}+\sum_{k=2}^{\infty}a_{k-2}x^{s+k}=0$$

第一项 (k=0) 系数应为零:

$$(s+k)^2-n^2=0, \quad \to s_1=-n, \qquad s_2=n.$$

第二项 (k=1) 系数应为零:

$$[(s+k)^2-n^2]a_1=0, \qquad \to a_1=0.$$

后面各项系数都为零:

$$[(s+k)^2-n^2]a_k+a_{k-2}=0, \quad (k=2,3,4,...)$$

存在递推关系:

$$a_k=-\frac{1}{(s+k)^2-n^2}a_{k-2}$$

由 $a_1=0$, 可推出奇数项为零

$$a_{2m+1}=0$$

现取 $s=n$, (-n 不影响解题过程), 得:

$$a_{2m}=\frac{-1}{(n+2m)^2-n^2}a_{2m-2}=\frac{-1}{2m(2n+2m)}a_{2m-2}, \qquad (m=1,2,3,...)$$

归纳，得:

$$a_{2m}=(-1)^m\frac{1}{2^{2m}m!(n+m)(n+m-1)...(n+1)}a_0$$

取：$a_0=1/2^n n!$，得:

$$a_{2m}=(-1)^m\frac{1}{2^{2m+n}m!(n+m)!}$$

贝塞尔方程有级数特解:

$$y(x)=\sum_{m=0}^{\infty}a_{2m}x^{n+2m}$$

分析收敛性，发现:

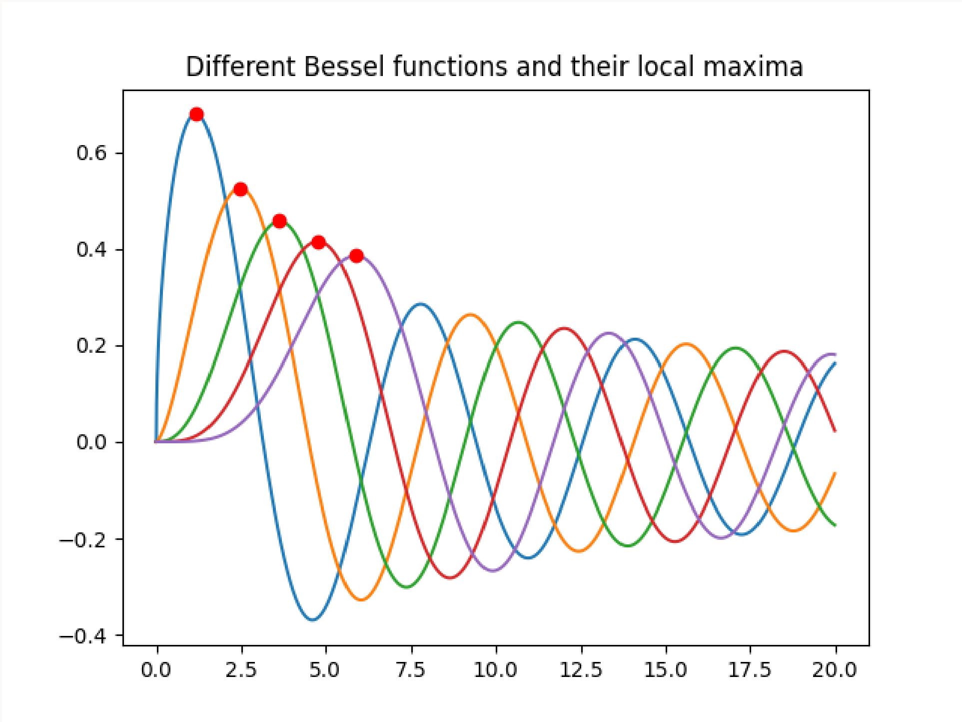
$$\lim_{m\to\infty}|\frac{a_{2m+2}}{a_{2m}}|=\lim_{m\to\infty}\frac{1}{4(m+1)(n+m+1)}=0$$

说明此级数必为某函数的展开式，称之为贝塞尔函数。

记为:

$$\boxed{J_n(x)=\sum_{m=0}^{\infty}a_{2m}x^{n+2m}}$$

称为 n 整数阶贝塞尔函数!



由图可知, 阶贝塞尔函数的确是收敛的函数.

* 作图代码如下

```
from scipy import optimize, special
from numpy import *
from matplotlib import pyplot as pb

x = arange(0,20,0.01)

for k in arange(0.5,5.5):
    y = special.jv(k,x)
    pb.plot(x,y)
    f = lambda x: -special.jv(k,x)
    x_max = optimize.fminbound(f,0,6)
    pb.plot([x_max], [special.jv(k,x_max)],'ro')
    pb.title('Different Bessel functions and their local maxima')
    pb.savefig('myplot.png')
pb.show()
```

贝塞尔（Bessel，Friedrich Wilhelm，1784～1846）德国天文学家，数学家，天体测量学的奠基人. 提出贝塞尔函数，讨论该函数的一系列性质及其求值方法，为解决物理学、天文学和信息学有关问题提供了重要工具。

作业 1、由圆域波动方程导出贝塞尔方程

2、求衰减模型

$$T'(t) + \lambda a^2 T(t) = 0$$

3、求角向固有值及归一化的固有函数:

$$\begin{cases} \Theta''(\theta) + \mu\Theta(\theta) = 0 \\ \Theta(\theta) = \Theta(\theta + 2\pi) \\ \Theta'(\theta) = \Theta'(\theta + 2\pi) \end{cases}$$

4、求欧拉方程

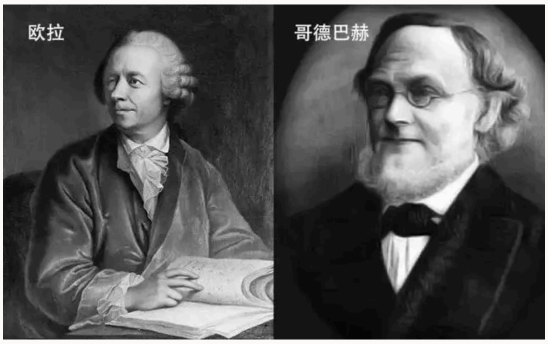
5.2 2. 贝塞尔函数与 Gamma 函数

贝塞尔函数 零阶贝塞尔函数:

$$J_0(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!m!} (\frac{x}{2})^{2m}$$

n 阶贝塞尔函数:

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!(n+m)!} (\frac{x}{2})^{n+2m}$$



(a)

第二类贝塞尔函数:

$$Y_\alpha(x) = \frac{J_\alpha(x)\cos(\alpha\pi) - J_{-\alpha}(x)}{\sin(\alpha\pi)}$$

贝塞尔函数在除 $x = 0$ 点外的整个实数轴上收敛。

Γ 函数 为进一步讨论贝塞尔函数的性质，先讨论 Gamma 函数.

- 1728 年，哥德巴赫在考虑数列插值的问题, 比如我们可以计算 2!,3!, 是否可以计算 2.5! 呢?
- 他写信请教尼古拉斯・伯努利和他的弟弟丹尼尔・伯努利, 欧拉当时正好与丹尼尔・伯努利在一块，他因此得知了这个问题
- 1729 年欧拉解决了这个问题!

Γ 函数的定义

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}dt, \qquad (x > 0)$$

Euler 创造的 Γ 函数, 将积分和阶乘联系在起来

例 5.2.1. 例-1. 试证明:

$$\Gamma(1) = 1$$

证明:

$$\begin{aligned}\Gamma(1) &= \int_0^\infty t^{1-1}e^{-t}dt \\ &= \int_0^\infty e^{-t}dt = 1\end{aligned}$$

Γ 函数的性质 **性质 1：** 试证明 Gamma 函数有如下递推式:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x), \qquad (x > 0)$$

证明:

$$\begin{aligned}\Gamma(x+1) &= \int_0^{\infty} t^{x+1-1}e^{-t}dt \\ &= -t^x e^{-t}|_0^{\infty} + x\int_0^{\infty} t^{x-1}e^{-t}dt \\ &= x\int_0^{\infty} t^{x-1}e^{-t}dt \\ &= x\Gamma(x)\end{aligned}$$

推论:

$$\Gamma(x+n) = (x+n-1)(x+n-2)\cdots(x+1)x\Gamma(x)$$

性质 2: 试证明自变量为正整数的 Gamma 函数与阶乘有如下关系:

$$\Gamma(n+1) = n!$$

证明 1: 由递推公式

$$\begin{aligned}\Gamma(x+1) &= x\Gamma(x) \\ \Gamma(n+1) &= n\Gamma(n) \\ &= n(n-1)\cdots 1\Gamma(1) \\ &= n!\int_0^{\infty} e^{-t}dt \\ &= n!\end{aligned}$$

证明 2: 在推论中: 取 $x=1$

$$\begin{aligned}\Gamma(x+n) &= (x+n-1)(x+n-2)\cdots(x+1)x\Gamma(x) \\ \Gamma(1+n) &= (1+n-1)(1+n-2)\cdots(1+1)1\Gamma(1) \\ \Gamma(n+1) &= n!\end{aligned}$$

Tips: 阶乘只是 $\Gamma(x)$ 函数的特例!$(x=1,2,3,\cdots)$ 对应 $(0!,1!,2!,\cdots)$

性质 3: 试证明半正整数 Γ 函数有如下性质

$$\begin{aligned}\Gamma(\frac{1}{2}) &= \sqrt{\pi} \\ \Gamma(n+\frac{1}{2}) &= \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

证明： (1) 由 Gamma 函数定义

$$\Gamma(x)=\int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}dt,\qquad (x>0)$$

$$\Gamma(\frac{1}{2})=\int_0^\infty t^{\frac{1}{2}-1}e^{-t}dt$$

$$=\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}}e^{-t}dt$$

令 $x=\sqrt{t}$

$$\Gamma(\frac{1}{2})=2\int_0^\infty e^{-x^2}dx$$

$$=2\sqrt{\iint_0^\infty e^{-x^2}e^{-y^2}dxdy}$$

$$=2\sqrt{\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^\infty e^{-r^2}rdrd\theta}$$

$$=2\sqrt{\frac{\pi}{2}\int_0^\infty re^{-r^2}dr}$$

$$=2\sqrt{\frac{\pi}{2}[-\frac{1}{2}e^{-r^2}]_0^\infty}$$

$$=\sqrt{\pi}$$

* x,y 皆取正数, 是第一象限!

(2) 由递推公式 $\Gamma(1+x)=x\Gamma(x),\qquad (x>0)$

$$\Gamma(1+\frac{1}{2})=\frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2})=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(2+\frac{1}{2})=\Gamma(1+\frac{3}{2})=\frac{3}{2}\Gamma(1+\frac{1}{2})=\frac{3}{2}\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(3+\frac{1}{2})=\frac{5}{2}\frac{3}{2}\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(n+\frac{1}{2})=\frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}$$

$$=\frac{(2n)!}{2^{2n}n!}\sqrt{\pi}$$

证毕!

性质 4： 试证明半正整数的阶乘为

$$(\frac{1}{2})!=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$(m-\frac{1}{2})!=\frac{(2m)!}{2^{2m}m!}\sqrt{\pi}$$

证明： 把如下公式从正整数向正实数延拓!

$$\Gamma(n+1)=n!\qquad\rightarrow\qquad\Gamma(x+1)=x!,(x>0)$$

(1) 取:$x = m - \frac{1}{2}, \qquad (m = 1, 2, 3, \cdots)$

$$\begin{aligned}(m-\frac{1}{2})! &= \Gamma(m-\frac{1}{2}+1)\\ &= \Gamma(m+\frac{1}{2})\\ &= \frac{(2m)!}{2^{2m}m!}\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

(2) 在上式中取 $m = 1$

$$(\frac{1}{2})! = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

* 一般分数的阶乘如何求?(余元公式,Gamma 函数定义式)

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin x\pi}, \qquad 0 < x < 1$$

$$\Gamma(\frac{1}{2}+x)\Gamma(\frac{1}{2}-x) = \frac{\pi}{\cos x\pi}, \qquad 0 < x < \frac{1}{2}$$

* 例如, 求 $(\pi)!$

$$(\pi)! = \Gamma(\pi+1) = \int_0^{\infty} t^{\pi}e^{-t}dt = ?$$

性质 5: 试求半负整数 Γ 函数的值

$$\begin{aligned}\Gamma(-\frac{1}{2}) &= -2\sqrt{\pi}\\ \Gamma(-\frac{3}{2}) &= \frac{4}{3}\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

解: (1) 把递推公式 $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$ 从正实数向实数延拓!
并令 $x = -\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}\Gamma(-\frac{1}{2}) &= -2\Gamma(1-\frac{1}{2})\\ &= -2\Gamma(\frac{1}{2})\\ &= -2\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

(2) 在递推公式 $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$ 中, 令 $x = -\frac{3}{2}$

$$\begin{aligned}\Gamma(-\frac{3}{2}) &= -\frac{2}{3}\Gamma(1-\frac{3}{2})\\ &= -\frac{2}{3}\Gamma(-\frac{1}{2})\\ &= (-\frac{2}{3})(-2\sqrt{\pi})\\ &= \frac{4}{3}\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

* 从正实数 $x>0$ 向实数延拓 $x\in\mathbb{R}$, 导致严重的问题, 比如:

$$n! = (n-1)(n-2)(n-3)\cdots 1$$

$$(-1)! = (-1)(-2)(-3)\cdots - \infty?$$

$$\Gamma(0) = (-1)! \quad ?, \qquad \Gamma(-1) = ?, \cdots$$

性质 6: 试证明 Gamma 函数在非正整数点的极限为无穷大

$$\lim_{x\to -n}\Gamma(x) = \infty, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

$$\frac{1}{\Gamma(-n)} = 0, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

证明: 由递推公式

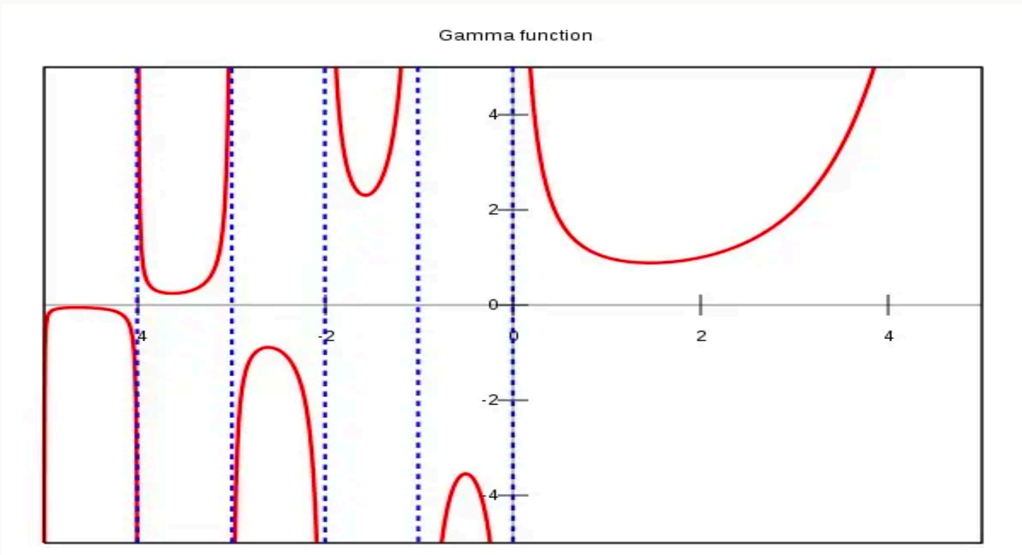
$$\begin{aligned}
\Gamma(x) &= \frac{1}{x}\Gamma(x+1)\\
\lim_{x\to 0}\Gamma(x) &= \lim_{x\to 0}\frac{1}{x}\Gamma(x+1) = \infty\\
\lim_{x\to -1}\Gamma(x) &= \lim_{x\to -1}\frac{1}{x}\Gamma(x+1) = \lim_{x\to 0}\frac{1}{x-1}\Gamma(x) = \infty\\
&\cdots\cdots\\
\lim_{x\to -n}\Gamma(x) &= \lim_{x\to -n}\frac{1}{x}\Gamma(x+1) = \lim_{x\to -(n-1)}\frac{1}{x-1}\Gamma(x) = \infty
\end{aligned}$$

证毕!

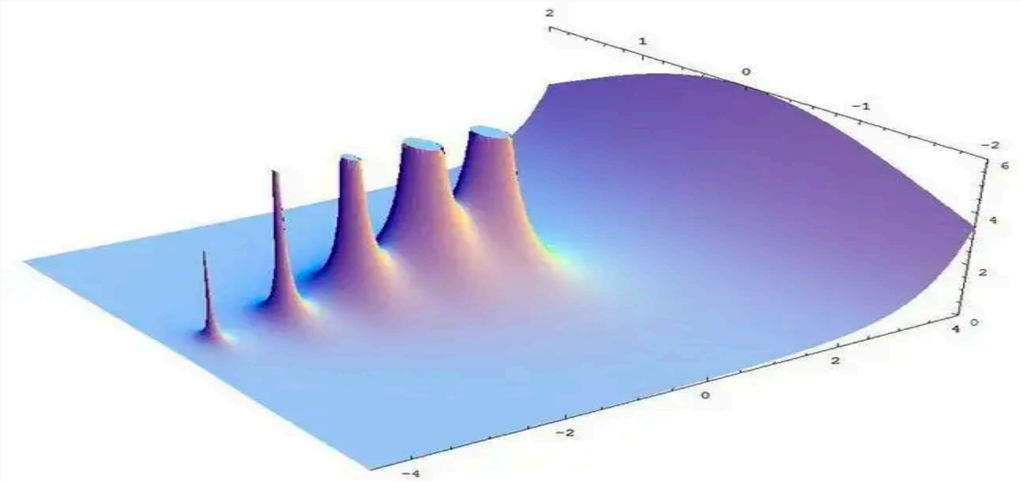
Tips:

延拓到实数域后, Γ 函数存在奇点 $x = 0, -1, -2, \cdots$, 如果进一步延拓到复数域, 这些奇点依然存在. 它们是 Γ 函数的一阶极点!

实数域 Gamma 函数



复数域 Gamma 函数



网络教学资源, 点这里

Gamma 函数的应用实例

例 **5.2.2.** 例-1. 计算如下积分:

$$(1)\ \int_0^\infty x^2 e^{-x^2}dx, \qquad (2)\ \int_0^\infty x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2}dx$$

解: 比较（1）式与 Gamma 函数的定义式的结构,

$$\Gamma(x)=\int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}dt, \qquad (x>0)$$

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x^2 e^{-x^2}dx &= \int_0^\infty (x^2)^1 e^{-(x^2)}\frac{1}{2x}d(x^2)\\ &= \frac{1}{2}\int_0^\infty (x^2)^{\frac{1}{2}}e^{-(x^2)}d(x^2)\\ &= \frac{1}{2}\int_0^\infty t^{\frac{1}{2}}e^{-t}d(t)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x^2 e^{-x^2}dx &= \frac{1}{2}\int_0^\infty t^{\frac{3}{2}-1}e^{-t}d(t)\\ &= \frac{1}{2}\Gamma(\frac{3}{2})\\ &= \frac{1}{2}\Gamma(1+\frac{1}{2})\\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2})\\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{4}\end{aligned}$$

课外作业

1. 求 0!, $\int_0^{\infty} x^2 e^{-\frac{1}{2}x^2} dx$
2. 试证明 $\frac{1}{\Gamma(-n)} = 0, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$
3. 试证明半正整数 Γ 函数值的一般性公式

$$(m - \frac{1}{2})! = \frac{(2m)!}{2^{2m} m!}\sqrt{\pi} \qquad (m = 1, 2, 3, \cdots)$$

4. 试求出半负整数 Γ 函数值的一般性公式

$$\Gamma(m - \frac{1}{2}) = ?, \qquad (m = 0, -1, -2, -3, \cdots)$$

5.3 3. 贝塞尔函数的性质

现在讨论贝塞尔函数的性质:

性质 1: 负数阶贝塞尔函数与正数阶贝塞尔函数有如下关系

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$$

证明: 用 Γ 函数重写出贝塞尔函数:

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!(n+m)!} (\frac{x}{2})^{n+2m}$$

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n+m+1)} (\frac{x}{2})^{n+2m}$$

负数阶塞尔函数可写成

$$J_{(-n)}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(-n+m+1)} (\frac{x}{2})^{-n+2m}$$

对于 $m < n$ 的项，分母中的 Gamma 函数为无穷大，因此都为零, 要去除:

$$J_{(-n)}(x) = \sum_{m=n}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(-n+m+1)} (\frac{x}{2})^{-n+2m}$$

令 $m - n = k$, 有 $m = n + k$,

$$J_{(-n)}(x) = (-1)^n \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{(n+k)!\Gamma(k+1)} (\frac{x}{2})^{n+2k}$$

$$J_{-n}(x) = (-1)^n \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{(n+k)!k!} (\frac{x}{2})^{n+2k} = (-1)^n J_n(x)$$

证毕!

性质 2: 半整数阶贝塞尔函数与三角函数有如下关系

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x, \qquad J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x$$

证明： 基于 Gamma 函数，可以写出半整数阶贝塞尔函数

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n+m+1)} (\frac{x}{2})^{n+2m}$$

$$J_{1/2}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(1/2+m+1)} (\frac{x}{2})^{1/2+2m}$$

其中，

$$\begin{aligned}\Gamma(1/2+m+1) &= (\frac{2m+1}{2})\Gamma(1/2+m) \\ &= (\frac{2m+1}{2}\frac{2m-1}{2})\Gamma(1/2+m-1) \\ &\cdots\cdots \\ &= \frac{(2m+1)!!}{2^{m+1}}\Gamma(1/2) \\ &= \frac{(2m+1)!!}{2^{m+1}}\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

代回，有:

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{x^{2m+1}}{(2m+1)!}$$

$$J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x$$

同理，有

$$J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x$$

证毕!

课堂作业

1. 求

$$\Gamma(-\frac{1}{2}), (-\frac{1}{2})!$$

2. 证明:

$$J_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x$$

性质 3： 贝塞尔函数的导数与递推式

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}[x^n J_n(x)] &= x^n J_{n-1}(x), & \cdots(1) \\ \frac{d}{dx}[x^{-n} J_n(x)] &= -x^{-n} J_{n+1}(x), & \cdots(2) \\ 2nJ_n(x) &= xJ_{n-1}(x) + xJ_{n+1}(x), & \cdots(3) \\ 2J_n'(x) &= J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x), & \cdots(4)\end{aligned}$$

由贝塞尔函数的 Γ 函数形式

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n+m+1)} (\frac{x}{2})^{n+2m}$$

证明 (1) 式：上等式两端同乘 x^n 再求导：

$$\frac{d}{dx}[x^n J_n(x)] = \frac{d}{dx}\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n+m+1)}(\frac{x^{2n+2m}}{2^{n+2m}})$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}[x^n J_n(x)] &= \sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n+m+1)}(\frac{(2n+2m)x^{2n-1+2m}}{2^{n+2m}}) \\ &= x^n \sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m \frac{1}{m!\Gamma(n-1+m+1)}(\frac{x^{n-1+2m}}{2^{n-1+2m}}) \\ &= x^n J_{n-1}(x), \qquad \cdots(1)\end{aligned}$$

证明 (2) 式: 同理，得:

$$\frac{d}{dx}[x^{-n} J_n(x)] = -x^{-n} J_{n+1}(x), \qquad \cdots(2)$$

证明 (3) 和 (4) 式: 把 (1)(2) 二式左端求导

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}[x^n J_n(x)] &= nx^{n-1}J_n(x) + x^n J_n'(x) = x^n J_{n-1}(x) \\ \frac{d}{dx}[x^{-n} J_n(x)] &= -nx^{-n-1}J_n(x) + x^{-n} J_n'(x) = -x^{-n} J_{n+1}(x)\end{aligned}$$

两式消去 $J_n'(x)$ 得:

$$2nJ_n(x) = xJ_{n-1}(x) + xJ_{n+1}(x), \qquad \cdots(3)$$

两式消去 $J_n(x)$ 得:

$$2J_n'(x) = J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x), \qquad \cdots(4)$$

证毕!

性质 4: 证明 n 阶贝塞尔函数有如下零点近似公式

$$\mu_m^n \approx m\pi + \frac{n\pi}{2} + \frac{3\pi}{4}$$

解: 对 n(整数) 阶贝塞尔方程

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + x\frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0$$

做变量代换

$$y = \frac{u}{\sqrt{x}}$$

得到 u(x) 的方程:

$$u'' + [1 + \frac{\frac{1}{4} - n^2}{x^2}]u = 0$$

当 $x \to \infty$ 有方程:

$$u'' + u = 0$$

通解为:

$$u = A\cos(x+\theta)$$

确定 A 和 θ (不证), 得 n 阶贝塞尔函数的渐近公式

$$J_n(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\left(x-\frac{n\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right)$$

令 $J_n(x)=0$, 由上式可得 n 阶贝塞尔函数的零点近似公式:

$$\mu_m^n \approx m\pi + \frac{n\pi}{2} + \frac{3\pi}{4}$$

固有值问题 对于圆域热传导方程或波动方程，其径向方程为

$$\begin{cases} r^2R''(r) + rR'(r) + (\lambda r^2 - n^2)R(r) = 0 \\ R(r_0) = 0 \end{cases}$$

解为 n 阶贝塞尔函数 $R(r) = J_n(x) = J_n(\sqrt{\lambda}r)$

- 零边界条件 $R(r_0) = 0$ 对应 $J_n(\sqrt{\lambda}r_0) = 0$

因此零边界条件下的本征解, 正是贝塞尔函数的零点!

基此确定:

(1) 固有值:

$$\sqrt{\lambda}r_0 = \mu_m^n \qquad \to \qquad \lambda_m^n = (\frac{\mu_m^n}{r_0})^2$$

(2) 固有函数:

$$R_m^n(r) = J_n(\frac{\mu_m^n}{r_0}r)$$

性质 5: 试证明 n 阶贝塞尔函数有如下零点递推式

$$J_n'(\mu_m^n) = -J_{n+1}(\mu_m^n)$$

证明: 由微分公式 (2)

$$\frac{d}{dx}\left[x^{-n}J_n(x)\right] = -\,x^{-n}J_{n+1}(x), \qquad \cdots(2)$$

$$-nx^{-n-1}J_n(x) + x^{-n}J_n'(x) = -x^{-n}J_{n+1}(x)$$

$$-nJ_n(x) + xJ_n'(x) = -xJ_{n+1}(x)$$

$$-n0 + xJ_n'(\mu_m^n) = -xJ_{n+1}(\mu_m^n)$$

$$J_n'(\mu_m^n) = -J_{n+1}(\mu_m^n)$$

性质 6: 贝塞尔函数正交归一性

固有函数体现塞尔函数的正交归一性:

$$\int_0^{r_0} rJ_n(\frac{\mu_m^n}{r_0}r)J_n(\frac{\mu_k^n}{r_0}r)dr = ?$$

证明：对径向方程做等价变换

$$r^2R''+rR'+(\lambda r^2-n^2)R=0$$

$$rR''+R'+((\frac{\mu_m^n}{r_0})^2r-\frac{n^2}{r})R=0$$

$$(rR')'+((\frac{\mu_m^n}{r_0})^2r-\frac{n^2}{r})R=0$$

令：

$$J_n(\frac{\mu_m^n}{r_0}r)=R_1,\qquad J_n(\frac{\mu_k^n}{r_0}r)=R_2$$

有

$$(rR_1')'+((\frac{\mu_m^n}{r_0})^2r-\frac{n^2}{r})R_1=0\cdots(1)$$

$$(rR_2')'+((\frac{\mu_m^n}{r_0})^2r-\frac{n^2}{r})R_2=0\cdots(2)$$

$(1)\times R_2,(2)\times R_1$, 所得两次相减，并做积分，有

$$\int_0^{r_0}\left[\left(\frac{\mu_m^{(n)}}{r_0}\right)^2-\left(\frac{\mu_k^{(n)}}{r_0}\right)^2\right]rR_1R_2dr=\int_0^{r_0}[R_1\left(rR_2'\right)'-R_2\left(rR_1'\right)']dr$$

$$\begin{aligned}&=[rR_1R_2']|_0^{r_0}-[rR_2R_1']|_0^{r_0}+\int_0^{r_0}rR_2'R_1dr-\int_0^{r_0}rR_1'R_2dr\\&=\int_0^{r_0}rR_2'R_1dr-\int_0^{r_0}rR_1'R_2dr\\&=0\end{aligned}$$

$$\rightarrow\qquad\int_0^{r_0}rR_1R_2dr=0$$

正交性，证毕！

证明归一性:

$$r^2R''+rR'+(\lambda r^2-n^2)R=0$$

$$2r^2R'R''+2r(R')^2+(\lambda r^2-n^2)R'R=0$$

整理:

$$[r^2(R')^2+(\lambda r^2-n^2)R^2]'=2\lambda rR^2$$

$$
\begin{aligned}
\int_0^{r_0} rR^2 dr =&\frac{1}{2\lambda}\int_0^{r_0}[r^2(R')^2+(\lambda r^2-n^2)R^2]'dr\\
=&\frac{1}{2\lambda}|r^2(R')^2+(\lambda r^2-n^2)R^2|_0^{r_0}\\
=&\frac{1}{2\lambda}r_0^2(R'(r_0))^2\\
=&\frac{1}{2}r_0^2[J_n'(\mu_m^n)]^2\\
=&\frac{r_0^2}{2}[J_{n+1}(\mu_m^n)]^2
\end{aligned}
$$

课外作业

1. 试证明

$$\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi},\qquad J_{-1/2}(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos x$$

2. 试证明零点递推公式

$$J_n'(\mu_m^n)=-J_{n+1}(\mu_m^n)$$

3. 设函数 $f(r)$ 的贝塞尔展开式为

$$f(r)=\sum_{m=1}^{\infty}c_m J_n(\frac{\mu_m^n}{r_0}r)$$

试证明其展开系数为:

$$c_m=\frac{2}{r_0^2 J_{n+1}^2(\mu_m^n)}\int_0^{r_0}f(r)J_n(\frac{\mu_m^n}{r_0}r)rdr$$

5.4 4. 贝塞尔函数的应用

应用实例 求解圆域热传导问题

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t}=a^2\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial u}{\partial r}+\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 u}{\partial \theta^2}\right), 0<r<R, 0<\theta<2\pi\\
u|_{r=R}=0,\ u|_{t=0}=\varphi(r,\theta)
\end{cases}
$$

解: 令

$$u(r,\theta,t)=T(t)V(r,\theta)$$

代入方程，进行第一次分离变量，得衰减方程:

$$T'+\lambda a^2 T=0,\qquad \cdots(1)$$

及亥姆霍兹方程: $\begin{cases}\dfrac{\partial^2 V}{\partial r^2}+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial V}{\partial r}+\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 V}{\partial \theta^2}+\lambda V=0, 0<r<R, 0\le\theta\le 2\pi\\ V|_{r=R}=0, 0\le\theta\le 2\pi\end{cases}$

令

$$V(r,\theta)=F(r)G(\theta)$$

, 代入亥姆霍兹方程，得两个方程

$$G'' + \mu G = 0, \qquad \cdots(2)$$

$$r^2F'' + rF' + (\lambda r^2 - \mu)F = 0, \qquad \cdots(3)$$

方程（1）的解为：

$$T(t) = Ae^{-\lambda a^2 t}$$

方程（2）的解为：

$$G(\theta) = C_1 \cos\sqrt{\mu}\theta + C_2 \sin\sqrt{\mu}\theta$$

由周期性边界条件，有 $G(2\pi) = G(0)$, 必有 $\cos\sqrt{\mu}\theta = 1$, 得
固有值：

$$\mu = n^2, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

固有函数：

$$G_0(\theta) = \frac{1}{2}a_0, G_n(\theta) = a_n \cos n\theta + b_n \sin n\theta, \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

固有函数也可写成 $G_n(\theta) = a_n e^{-in\theta} = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-in\theta}$

将固有值代入方程（3），得方程

$$r^2F'' + rF' + (\lambda r^2 - n^2)F = 0$$

令 $x = \sqrt{\lambda}r, y(x) = F(x/\sqrt{\lambda})$, 方程转化为标准整数贝赛尔方程：

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + x\frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0$$

则方程（3）的零边界条件解用贝赛尔函数的零点表示：
固有值：

$$\lambda_m^n = (\frac{\mu_m^n}{R})^2$$

固有函数：

$$F_m^n(r) = J_n(\frac{\mu_m^n}{R}r)$$

原方程的基本解为：

$$u(r, \theta, t) = F_m^n(r)G_n(\theta)e^{-\lambda_m a^2 t}$$

叠加解为：

$$u(r, \theta, t) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} A_m^n F_m^n(r)G_n(\theta)e^{-\lambda_m a^2 t}$$

应用初值条件，

$$\varphi(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} A_m^n F_m^n(r)G_n(\theta)$$

利用正交归一性确定系数 A_m^n

$$\int_0^{2\pi} G_k^*(\theta)\varphi(r,\theta)d\theta = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} A_m^n F_m^n(r)\int_0^{2\pi} G_n(\theta)G_k(\theta)d\theta$$
$$\int_0^{2\pi} G_n^*(\theta)\varphi(r,\theta)d\theta = \sum_{m=0}^{\infty} A_m^n F_m^n(r)$$
$$\int_0^R\int_0^{2\pi} G_n^*(\theta)rJ_n(\frac{\mu_k^n}{R}r)\varphi(r,\theta)d\theta dr = \sum_{m=0}^{\infty} A_m^n \int_0^R rJ_n(\frac{\mu_k^n}{R}r)J_n(\frac{\mu_m^n}{R}r)dr$$
$$\int_0^R\int_0^{2\pi} G_n^*(\theta)rJ_n(\frac{\mu_m^n}{R}r)\varphi(r,\theta)d\theta dr = A_m^n\frac{R^2}{2}[J_{n+1}(\mu_m^n)]^2$$
$$A_m^n = \frac{2}{R^2[J_{n+1}(\mu_m^n)]^2}\int_0^R\int_0^{2\pi} G_n^*(\theta)rJ_n(\frac{\mu_m^n}{R}r)\varphi(r,\theta)d\theta dr$$

课外作业 1、证明

$$J_{3/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}}[\frac{1}{x}\sin x - \cos x]$$

2、证明

$$\frac{d}{dx}[x^{-n}J_n(x)] = -x^{-n}J_{n+1}(x)$$

3、用分离变量法求解圆域热传导方程

$$\begin{cases} u_t = a^2(u_{xx}+u_{yy}), & (0<r<1) \\ u\mid_{r=1} = 0 \\ u\mid_{t=0} = \cos^2\theta \end{cases}$$

5.5 5. Dirac 函数

5.5.1 定义

引入 ● 设有一条质量为 1，长度为 $2l$ 的均匀直线 (段). 则直线的线密度为 $\rho = 1/2l$ 若将直线的中点放置于坐标轴的原点，则密度函数为:

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{2l}, & (-l\le x\le l) \\ 0, & (x<-l, x>l) \end{cases}$$

积分得质量:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)dx = 1$$

显然:

$$\int_a^b \rho(x)dx = 1, \qquad (-l,l)\subset(a,b)$$

δ 函数的定义 ● 考虑当 $l \to 0$ 时, 线段变为质点. 质点的密度函数记为 $\delta(x)$, 有

$$\delta(x)=\begin{cases}\infty, & (x=0)\\ 0, & (x\neq 0)\end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)dx=1$$

量子力学中, 这么定义:

$$\delta(x)=\begin{cases}1, & (x=0)\\ 0, & (x\neq 0)\end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)dx=1$$

考虑到量子化, 一般写成一个连续实函数的序列:

$$\lim_{n\to\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_n(x)dx=1$$

Tips: 在很多问题中，我们需要用数学语言描述“点”的相关性质，这就需要推广古典函数概念, 引入广义函数（a generalized function）.Dirac 函数是历史上第一个广义函数, 也是使用最广的.

5.5.2 性质

δ 函数的性质

$$\int_a^b\delta(x)dx=1,\quad 0\in(a,b)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\psi(x)dx=\psi(0)$$

$$\int_a^b\delta(x)\psi(x)dx=\psi(0),\quad 0\in(a,b)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_0)\psi(x)dx=\psi(x_0)$$

$$\delta(-x)=\delta(x)$$

$$\delta'(-x)=-\delta'(x)$$

$$\delta(\alpha x)=\frac{\delta(x)}{|\alpha|}$$

$$x\delta'(x)=-\delta(x)$$

$$x\delta_\lambda(x)=\lambda\delta_\lambda(x)$$

$$f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$$

$$\delta(\sin x)=\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-n\pi)$$

例 **5.5.1.** 例-1. 试证明 δ 函数是偶函数:

$$\delta(-x)=\delta(x)$$

证明:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(-x)\psi(x)dx&=\int_{+\infty}^{-\infty}\delta(x')\psi(-x')d(-x')\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x')\psi(-x')d(x')\\&=\psi(-x')|_{x'=0}\\&=\psi(0)\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\psi(x)dx\end{aligned}$$

得证!

例 **5.5.2.** 例-2. 试证明 δ 函数的导数是奇函数:

$$\delta'(-x)=-\delta'(x)$$

证明:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta'(x)\psi(x)dx&=\delta(x)\psi(x)|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\psi'(x)dx\\&=-\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\psi'(x)dx\\&=-\psi'(0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta'(-x)\psi(x)dx&=\int_{+\infty}^{-\infty}\delta'(x')\psi(-x')d(-x')\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta'(x')\psi(-x')d(x')\\&=\psi'(-x')_{x'=0}\\&=\psi'(0)\end{aligned}$$

评毕!

推论:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta^{(n)}(-x)\psi(x)dx=(-1)^n\psi^{(n)}(0)$$

例 **5.5.3.** 例-3. 试证明:

$$x\delta(x)=0$$

证明:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} x\delta(x)\psi(x)dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)[x\psi(x)]dx \\
&= [x\psi(x)]\,|_{x=0} \\
&= 0\psi(0) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

证毕!

例 **5.5.4.** 例-5. 试证明 δ 函数的傅里叶变换公式:

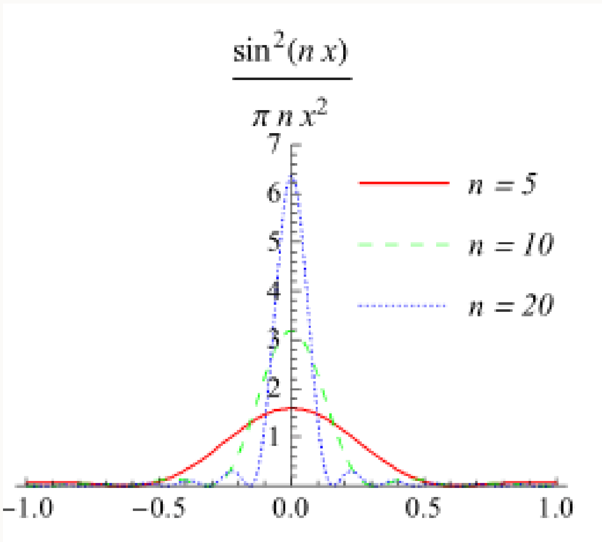
$$
\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}dx = \delta(k), \qquad \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}dx = \delta(p_x)
$$

证明:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{p_x}{\hbar}x}dx \\
&= 2\pi\delta(\frac{p_x}{\hbar}) \\
&= 2\pi\,|\hbar|\,\delta(p_x) \\
&= 2\pi\hbar\delta(p_x)
\end{aligned}
$$

例 **5.5.5.** 例-6. 试证明 δ 函数的极限公式:

$$
\begin{aligned}
\delta(x) &= \lim_{n\to\infty}\frac{\sin^2(nx)}{\pi n x^2} \\
&= \lim_{n\to\infty}\frac{n}{\sqrt{\pi}}e^{-n^2x^2} \\
&= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\epsilon}{\pi(x^2+\epsilon^2)} \\
&= \lim_{n\to\infty}\frac{n}{\pi(n^2x^2+1)}
\end{aligned}
$$



例 **5.5.6.** 例-7. 试证明 δ 函数的微分公式:

$$\delta(x)=\frac{dH(x)}{dx},\qquad H(x)=\begin{cases}0, & (x<0)\\ 1, & (x>=0)\end{cases}$$

证明:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dH(x)}{dx}\psi(x)dx &= H(x)\psi(x)\mid_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}H(x)\psi'(x)dx\\ &=\psi(+\infty)-\int_{0}^{+\infty}\psi'(x)dx\\ &=\psi(+\infty)-\psi(+\infty)+\psi(0)\\ &=\psi(0)\\ &=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\psi(x)dx\end{aligned}$$

证毕!

例 **5.5.7.** 例-8. 试证明 δ 函数的展开公式:

$$\begin{aligned}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) &= \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)\\ &=\frac{1}{r}\delta(r-r_0)\delta(\theta-\theta_0)\\ &=\frac{1}{r^2\sin\theta}\delta(r-r_0)\delta(\theta-\theta_0)\delta(\varphi-\varphi_0)\end{aligned}$$

课外作业

例 **5.5.8.** 1. 试证明:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}1\cdot e^{2\pi ikx}dx=\delta(k)$$

例 **5.5.9.** 2. 求动量表象波函数 已知坐标表象的波函数如下, 现基于 δ 函数求动量表象的波函数 $c(p)$

$$\Psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}c(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp$$

例 **5.5.10.** 3. 证明第一类贝塞尔函数的正交性公式

$$\int_{0}^{+\infty}J_n(kr)J_n(k'r)rdr=\frac{\delta(k-k')}{k},\qquad (n\geq -1;k,k'>0)$$