Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. Ю. Славянов, Уравнение для произведения решений двух различных уравнений Шредингера, *ТМФ*, 2003, том 136, номер 3, 410–417

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf234>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.84.234.179

26 апреля 2023 г., 14:55:09

© 2003 г.

С. Ю. Славянов*

УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПРОИЗВЕДЕНИЯ РЕШЕНИЙ ДВУХ РАЗЛИЧНЫХ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА

В предположении, что потенциалы в двух уравнениях Шредингера различаются на полином степени k , выведено уравнение $(k + 4)$ -го порядка для функции, являющейся произведением решений этих уравнений. Рассмотрены примеры, имеющие физическое приложение.

Ключевые слова: линейные ОДУ с полиномиальными коэффициентами, матричные элементы, произведение решений ОДУ

1. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Пусть имеются два одномерных уравнения Шредингера

$$y'' + (\lambda - q_1)y = 0, \quad (1)$$

$$u'' + (\mu - q_2)u = 0 \quad (2)$$

с аналитическими потенциалами $q_1(z)$ и $q_2(z)$. Определим функцию $v(z)$ как произведение произвольных решений $y(z)$ и $u(z)$ уравнений (1) и (2),

$$v = yu. \quad (3)$$

Рассмотрим следующие два вопроса. Каково дифференциальное уравнение, для которого функции $v(z)$ являются решениями? Существует ли дифференциальное уравнение для функции $v(z)$, у которого особые точки совпадают по расположению с совокупностью особых точек уравнений (1), (2), и каково оно?

Ответ на первый вопрос дается во втором разделе статьи. Показано, что может быть построено уравнение четвертого порядка с дополнительными ложными особыми точками по отношению к особым точкам уравнений (1), (2) и эти ложные особые точки расположены в нулях функции $t(z) = \lambda - \mu + q_2(z) - q_1(z)$. В связи с измененной структурой особенностей, которые, в частности, могут попадать на основной интервал рассмотрения, такое уравнение, на взгляд автора, мало пригодно для аналитического или численного исследования функций $v(z)$.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: slav@slav.usr.pu.ru

В третьем разделе дан ответ на второй вопрос для случая, когда функция $t(z)$ является полиномом k -го порядка. Рекурсивным образом строится уравнение $(k+4)$ -го порядка без дополнительных особенностей по отношению к уравнениям (1), (2). Такое уравнение с добавленными граничными условиями позволяет эффективно исследовать функцию $v(z)$. В конце раздела результат переносится на случай более общих, чем (1), (2) уравнений второго порядка в самосопряженной форме, а именно

$$ry'' + r'y' = fy, \quad (4)$$

$$ru'' + r'u' = gu, \quad (5)$$

где $r(z)$, $f(z)$ и $g(z)$ – аналитические функции, причем $f(z)$ и $g(z)$ различаются на полином. Случай уравнений в несамосопряженной форме также поддается исследованию, но требуется введение “интегрирующего множителя” [1] и выкладки становятся значительно сложнее.

В четвертом разделе рассмотрены примеры построения конкретных уравнений, имеющих, на взгляд автора, достаточный физический смысл. Там же обсуждается вопрос о граничных условиях для функций $v(z)$.

Каковы цели, преследуемые при конструировании искомых уравнений?

1. Прежде всего возникает возможность строить более сложные математические модели физических процессов с достаточно явными решениями, чем те, которые даются уравнениями второго порядка. Примеры таких моделей приведены в разделе 4. С другой стороны, наличие дифференциального уравнения для модели упрощает действия над решениями, например, преобразование Фурье.

2. Во многих физических приложениях в связи с уравнениями (1), (2) возникают матричные элементы – интегралы вида

$$I = \int_a^b y(z)u(z)\rho(z) dz = \int_a^b v(z)\rho(z) dz. \quad (6)$$

Здесь $\rho(z)$ – простая функция, например, степенная. Знание дифференциального уравнения для функции $v(z)$ позволяет упростить вычисление интегралов (6) [2], [3].

3. В задачах на собственные значения уравнения для произведений позволяют получать полезные тождества, связывающие собственные значения и интегралы от собственных функций. На основе этих тождеств можно, например, выводить различные асимптотические оценки.

Задача, рассматриваемая в литературе по факторизации уравнений и состоящая в отыскании уравнений для квадратов, кубов и иных степеней решений заданного уравнения второго порядка, требует меньших усилий и решается не рекурсивно, а явно [4].

Предварительный вариант данной работы опубликован в сборнике [5].

2. УРАВНЕНИЕ ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКА С ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМИ ЛОЖНЫМИ ОСОБЕННОСТЯМИ

Помимо произведений $v(z)$ введем величины $a(z)$, $b(z)$, $c(z)$ согласно формулам

$$y'u \equiv a, \quad yu' \equiv b, \quad y'u' \equiv c.$$

Для простоты записи также обозначим

$$\lambda - q_1 \equiv f, \quad \mu - q_2 \equiv g. \quad (7)$$

Продифференцировав уравнения (1), (2), придем к следующим равенствам:

$$\begin{aligned} v' &= a + b, \\ v'' + (f - g)v &= 2c, \\ v''' + ((f - g)v)' - 2fv' &= (g - f)a, \\ (v'' - (f + g)v)'' - (2fv')' - (g - f)(v'' - (g - f)v) &= 2(g' - f')a. \end{aligned} \quad (8)$$

Функция a из последних двух равенств может быть исключена. Однако результирующее уравнение будет несимметричным относительно f и g . Если мы повторим вычисления с функцией b вместо функции a и симметризуем оба результата, то окончательно получим

$$\begin{aligned} v'''' - v''' + \frac{2(f'f - g'g) - (f^2 - g^2)}{f - g}v' + \\ + ((f - g)^2 - (f' + g') + (f'' + g''))v = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Уравнение (9) характеризуется помимо сингулярностей уравнений (1), (2) регулярными особыми точками в нулях знаменателя $f - g$. Линейно-независимыми решениями уравнения (9) являются функции

$$v_1 = y_1 u_1, \quad v_2 = y_1 u_2, \quad v_3 = y_2 u_1, \quad v_4 = y_2 u_2,$$

где пары функций y_1, y_2 и u_1, u_2 — линейно-независимые решения уравнений (1) и (2), соответственно. Решения v_j , $j = 1, \dots, 4$, голоморфны в нулях $f - g$.

Ложной особой точкой линейного дифференциального уравнения называется особая точка, в которой задача Коши неразрешима, но в окрестности которой общее решение уравнения голоморфно [6]. Следовательно, нули $f - g$ — ложные особые точки уравнения (9). Кроме того, если умножить все члены уравнения (9) на $f - g$, то спектральные параметры войдут множителями при старшей производной, что имеет мало смысла с точки зрения исследования спектральной задачи для (9). Тем самым применимость уравнения (9) в приложениях сомнительна.

3. УРАВНЕНИЕ БЕЗ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ОСОБЫХ ТОЧЕК

Перейдем к выводу уравнения, которое хотя и имеет более высокий порядок, чем (9), но зато обладает лучшими свойствами как для изучения решений, так и для постановки спектральной задачи.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Назовем функцию F представимой через произведение, если помимо представления в терминах функций $y(z)$, $u(z)$, коэффициентов уравнений и их производных, она может быть представлена только через функцию $v(z)$, коэффициенты уравнений и их производные.

Ясно, что в этом определении предполагается использование уравнений (1), (2) (либо двух иных исходных уравнений, например (4), (5)).

ПРИМЕР. Пусть $h = 2y'u'$. Используя уравнения (1), (2) и выражение для второй производной $v'' = y''u + yu'' + h$, найдем

$$h = v'' - (f + g)v. \quad (10)$$

Следовательно, функция h представима через произведение.

ЛЕММА 1. *Выполняется дифференциальное равенство*

$$v''' - ((f + g)v)' = 2(fyu' + gy'u), \quad (11)$$

являющееся следствием уравнений (1), (2) и определения (3).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Умножив уравнение (1) на $2u'$, уравнение (2) на $2y'$, сложив результаты и используя определение функции h , получим

$$h' = 2(fyu' + gy'u). \quad (12)$$

С учетом соотношения (10) можно привести равенство (12) к виду (11), что и требовалось доказать.

В левой части уравнения (11) стоят функции, представимые через произведение. Однако выражение в правой части (11) не является функцией, представимой через произведение. Введем последовательность функций $w_j(z)$,

$$w_j = 2(f^{(j)}yu' + g^{(j)}y'u), \quad (13)$$

причем начальная функция w_0 является правой частью уравнения (11). Дифференцируя (13) и применяя уравнения (1), (2), (10), можно убедиться, что функции w_j удовлетворяют рекурсионному соотношению

$$w'_j = w_{j+1} + s_j. \quad (14)$$

Здесь функции s_j представимы через произведение и могут быть записаны в виде

$$s_j = (f + g)^{(j)}v'' - (f - g)^{(j)}(f - g)v. \quad (15)$$

ЛЕММА 2. *Предположим, что функции $f(z)$ и $g(z)$ различаются на полином k -й степени,*

$$f(z) - g(z) = P_k(z). \quad (16)$$

Тогда функция w_{k+1} представима через произведение.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Согласно условию (16) имеем

$$\begin{aligned} w_{k+1} &= 2(f^{(k+1)}yu' + g^{(k+1)}y'u) = \\ &= 2((g + P_k)^{(k+1)}yu' + g^{(k+1)}y'u) = (f + g)^{(k+1)}v', \end{aligned} \quad (17)$$

что и доказывает лемму.

Теперь можно перейти к доказательству основной теоремы.

ТЕОРЕМА. *При выполнении условия (16) функция $v(z)$ является решением уравнения*

$$\begin{aligned} v^{(k+4)} - ((f + g)v)^{(k+2)} - ((f + g)v')^{(k+1)} + \\ + \sum_{j=0}^k ((f - g)(f - g)^{(k-j)}v)^{(j)} = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Продифференцируем равенство (11) $k + 1$ раз и применим лемму 2. Получим

$$v^{(k+4)} - ((f + g)v)^{(k+2)} - \sum_{j=0}^k s_j^{(k-j)} - (f + g)^{(k+1)}v' = 0. \quad (19)$$

Сумма $\sum_{j=0}^k s_j^{(k-j)}$ в формуле (19) может быть преобразована с использованием определения (13), перестановки порядка суммирования и учетом тождества для биномиальных коэффициентов

$$\sum_{m=0}^{k-j} \binom{m+j}{j} = \binom{k+1}{j+1}.$$

Для этой суммы тогда получим

$$\sum_{j=0}^k s_j^{(k-j)} = \sum_{j=0}^k \binom{k+1}{j+1} (f + g)^{(k-j)}v^{(2+j)} - \sum_{j=0}^k ((f - g)(f - g)^{(k-j)}v)^{(j)}.$$

Отсюда после суммирования

$$\sum_{j=0}^k \binom{k+1}{j+1} (f + g)^{(k-j)}v^{(2+j)} + (f + g)^{(k+1)}v' = ((f + g)v')^{(k+1)}$$

следует уравнение (18). Теорема доказана.

Обратимся к спектральным параметрам в уравнениях (1) и (2) (см. (7)). Они заменяются в уравнении (18) для произведений v на два других спектральных параметра

$$\sigma = \lambda + \mu, \quad \Delta = \lambda - \mu. \quad (20)$$

Дифференциальный оператор в уравнении (18) даже на формальном уровне не является самосопряженным. Поэтому спектральная задача для него со стандартных абстрактных позиций обладает плохими свойствами. Однако с прикладной точки зрения она может быть поставлена и решена. Проблема лишь в том, что из-за высокого порядка уравнения часто нужно ставить дополнительные граничные условия. Эти граничные условия зависят от спектральных параметров и могут быть получены из анализа поведения решений уравнений (1) и (2) в граничных точках. Примеры такого подхода рассмотрены ниже.

В более общем случае уравнений (4) и (5) необходимо задать функцию $h(z)$ в виде $h = 2ry'u'$. После этого вместо (11) мы получаем в качестве основного дифференциальное тождество

$$(r(rv')')' - ((f+g)rv)' = 2r(fyu' + gy'u). \quad (21)$$

Вместо последовательности функций (13) вводится последовательность

$$w_j = 2r(f^{(j)}yu' + g^{(j)}y'u) \quad (22)$$

с сохранением рекурсии (14), но слегка измененным выбором функций s_j ,

$$s_j = (f+g)^{(j)}(rv')' - (f-g)^{(j)}(f-g)v. \quad (23)$$

Основная формула (18) теоремы заменится ее обобщением

$$\begin{aligned} & (r(rv')')^{(k+2)} - ((f+g)rv)^{(k+2)} - ((f+g)(rv'))^{(k+1)} + \\ & + \sum_{j=0}^k ((f-g)(f-g)^{(k-j)}v)^{(j)} = 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Доказательство формулы (24) аналогично доказательству (18) в теореме.

4. ПРИМЕРЫ

Рассмотрим примеры применения доказанной теоремы и ее обобщения (24).

ПРИМЕР 1. Предположим, что $f(z) = g(z)$, при этом $w_0 = 2rfv'$. Тогда в правой части уравнения (24) уже стоит функция, представимая через произведение. Уравнение (24) является уравнением третьего порядка для квадрата решений (1). Оно хорошо известно.

ПРИМЕР 2. Предположим, что $f(z) = q(z) - \lambda$, $g(z) = q(z) - \mu$. Тогда функция w_1 представима через произведение, уравнение (24) принимает вид

$$(r(rv')')'' - ((2q - \sigma)rv)'' - ((2q - \sigma)(rv'))' + \Delta^2 v = 0 \quad (25)$$

и является уравнением четвертого порядка для произведений решений уравнений (4), (5) при двух различных значениях спектрального параметра λ . Это уравнение было получено в статье [3] и использовалось для вычисления интегралов вида (6). Уравнение (25) совпадает с уравнением (9) при $r(z) = 1$. Такое упрощение связано с тем, что числитель и знаменатель в третьем слагаемом уравнения (9) могут быть сокращены.

В атомно-молекулярной физике интерес представляют квазипересечения собственных значений, т.е. случай экспоненциально малых значений параметра Δ^2 . Такая экспоненциальная близость собственных значений возникает, например, когда потенциал $q(z)$ представляет собой две симметричные относительно нуля потенциальные ямы. Пусть задача рассматривается на всей вещественной оси $(-\infty, \infty)$. Положим для простоты $r(z) \equiv 1$. Собственные функции сингулярной задачи Штурма–Лиувилля, порожденной уравнением (25), делятся на четные и нечетные. Пусть $y(z)$ – четная собственная функция, а $u(z)$ – ближайшая к ней (по расстоянию между соответствующими собственными значениями) нечетная собственная функция. Проинтегрируем уравнение (25) от 0 до ∞ ,

$$\Delta^2 \int_0^\infty v dz - v'''(0) + ((2q - \sigma)v)'(0) + ((2q - \sigma)v')(0) = 0. \quad (26)$$

Воспользовавшись тем, что равенство (11) выполняется при $z = 0$, получим из (26)

$$\Delta^2 = \left[\int_0^\infty yu dz \right]^{(-1)} (2q(0) - \sigma)y(0)u'(0). \quad (27)$$

Аналоги равенства (27) обычно выводятся из физических соображений путем введения полусуммы и полуразности собственных функций и являются приближенными. Приведенное равенство – точное.

ПРИМЕР 3. Пусть $f = -k^2$, $g = z^2 - \lambda$. Функция v в этом случае представляет собой гармоническое колебание, промодулированное гауссианом. Уравнение шестого порядка для нее имеет вид

$$v^{(6)} - ((f + g)v)^{(4)} - ((f + g)v')^{(3)} + (f - g)^2 v'' + 2((f - g)^2)'v' + [2((f - g)^2)'' - ((f - g)')^2]v = 0. \quad (28)$$

ПРИМЕР 4. В задаче рассеяния на диэлектрическом сфероиде [7] возникают интегралы

$$I = \int_{-1}^1 S_{0l}(c_1, z) S_{0n}(c_2, z) \rho(z) dz. \quad (29)$$

Здесь $S_{0l}(c, z)$ – вытянутые угловые сфероидальные функции, которые являются собственными функциями на сегменте $[-1, 1]$ сингулярной задачи Штурма–Лиувилля для уравнений (4), (5) с $r(z) = 1 - z^2$, $f(z) = \lambda_{0l}(c_1) - c_1^2 z^2$, $g(z) = \mu_{0l}(c_2) - c_2^2 z^2$ [8]. Уравнение (24) в этом случае будет уравнением шестого порядка,

$$\begin{aligned} (r(rv')')^{(4)} - ((f+g)rv)^{(4)} - ((f+g)(rv)')^{(3)} + (f-g)^2 v'' + \\ + 2((f-g)^2)'v' + [2((f-g)^2)'' - ((f-g)')^2]v = 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Обсудим для этого примера вопрос о граничных условиях. Уравнение для сфероидальных функций имеет на границах интервала рассмотрения регулярные особые точки. В них собственная функция голоморфна, а другое решение имеет логарифмическую особенность. Соответственно два решения (30) имеют особенность, а четыре ее не имеют. Рекуррентная последовательность линейных уравнений для отыскания коэффициентов степенного ряда в окрестности особой точки начинается с уравнения, в которое входят четыре коэффициента. Как избавиться от возникающего произвола? Ответ состоит в использовании степенных рядов для функций y и u в окрестности этих же точек. Там первые коэффициенты находятся явно и определяют после перемножения первые коэффициенты функции v . Такое рассуждение носит наводящий характер. Требуется математически обоснованное исследование постановки спектральной задачи.

Благодарности. Автор благодарен А. А. Болибруху за конструктивную критику и предложения по улучшению текста статьи.

Список литературы

- [1] V. Yu. Papshev, S. Yu. Slavyanov. Products of the Jacobi polynomials. Ulmer Mathematical Seminars, в печати.
- [2] S. Yu. Slavyanov. J. Phys. A. 1999. V. 32. P. 1773.
- [3] С. Ю. Славянов. ТМФ. 1999. Т. 120. С. 473.
- [4] Л. М. Беркович. Факторизация и преобразования дифференциальных уравнений. М.: R&C Dynamics, 2002.
- [5] S. Yu. Slavyanov. The equation for a product of solutions for two second-order linear ODEs. In: Proceedings of International Seminar “Day on Diffraction. Millenium Workshop”. Ed. I. V. Andronov. St.-Petersburg, 2000. P. 168.
- [6] С. Ю. Славянов, В. Лай. Специальные функции: единая теория, основанная на анализе особенностей. С.-Пб.: Невский Диалект, 2002.
- [7] V. G. Farafonov, N. V. Voshchinnikov, V. V. Somsikov. Appl. Opt. 1996. V. 35. P. 5412.
- [8] И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.

Поступила в редакцию 17.III.2003 г.