5. Sturm-Liouville eigenvalue problem

スチィルム－リュービル 理論

$$L u_n(x) \equiv \frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{du_n(x)}{dx}\right] - q(x)\,u_n(x) \qquad (1)$$

$$= -\lambda_n\, \rho(x)\, u_n(x)$$

S-L 型 の 2階の微分方程式

↳ (Schrödinger 方程式，波動方程式，拡散方程式，熱伝導方程式も S-L 型.

⟷ 無限次元 の 行列 についての 固有値問題
($\hat{A}\vec{x} = \lambda\vec{x}$ の形に注意)

境界条件 (Boundary Condition)

(1) 有限区間の場合

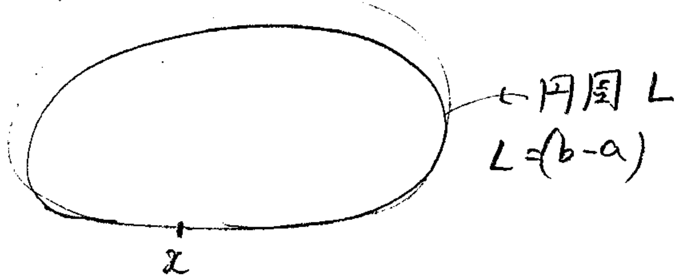
区間 $[a, b]$ について

$$\begin{cases} A\,u(a) + B\,u'(a) = 0 & (2) \\ C\,u(b) + D\,u'(b) = 0 & (3) \end{cases}$$

A, B, C, D は 任意定数.

(2) 周期的な場合 (周期境界条件：Periodic B.C.)
(PBC)

$$u(x) = u(x + b - a) \qquad (4)$$

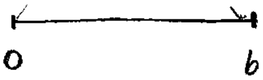


Simple case.

$$L u_n(x) = \frac{d^2}{dx^2} u_n(x) = -k_n^2 u_n(x)$$

B.C.

$$\begin{cases} u_n(0) = 0 \\ u_n(b) = 0 \end{cases}$$



c.f.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\underbrace{\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)}_{= k^2}\psi$$

1D 井戸型ポテンシャル中の電子

$$u_n(x) = A_n \sin k_n x + B_n \cos k_n x$$

とおく。

$$u_n(0) = B_n = 0$$

$$u_n(b) = A_n \sin k_n b = 0$$ より

$$k_n b = n\pi \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

$$k_n = \frac{n}{b}\pi$$

$$\Rightarrow \quad u_n = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{b}x\right)$$

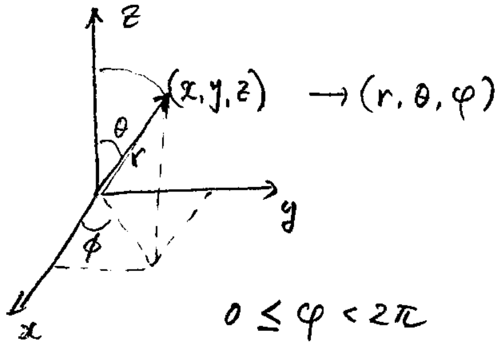
A_nは、通常、u_nについての規格化条件によって定める

$$\Rightarrow \int_0^b dx \left[u_n(x)\right]^2 = 1$$

Simple case 2

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} u_m(\varphi) = -m^2 u_m(\varphi)$$

Helmholtz 方程式



$0 \leq \varphi < 2\pi$

B.C.

$$u_m(\varphi + 2\pi) = u_m(\varphi).$$

したがって 固有値は　$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$
(m)

(例えば $u_m(\varphi) = e^{i\lambda\varphi}$ を代入してみるとよい

$$-\lambda^2 \cancel{e^{i\lambda\varphi}} = -m^2 \cancel{e^{i\lambda\varphi}}$$

$$\lambda = \pm m$$)

固有関数は

$$u_m = e^{im\varphi}$$

または

$$u_m = \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases}.$$

一般的、性質

(1) 規格直交性

$u(x)$ と $v(x)$ を、2階微分可能の関数とする

$$\begin{cases} Lu = \dfrac{d}{dx}\left[p(x)\dfrac{du}{dx} \right] - qu \\ Lv = \dfrac{d}{dx}\left[p(x)\dfrac{dv}{dx} \right] - qv \end{cases}$$

$$\int_a^b (vLu - uLv)\,dx = \int_a^b \left[v\frac{d}{dx}\left(p\frac{du}{dx}\right) - u\frac{d}{dx}\left(p\frac{dv}{dx}\right)\right] dx$$

$$- \int_a^b dx\, \cancelto{0}{(vqu - uqv)}$$

部分積分

$$= \left[vp\frac{du}{dx} - up\frac{dv}{dx} \right]_a^b$$

$$- \int_a^b \cancelto{0}{\left(\frac{dv}{dx}\cdot p\frac{du}{dx} - \frac{du}{dx}\cdot p\frac{dv}{dx} \right)} dx$$

したがって、

$$\int_a^b (vLu - uLv)\,dx = \left[vp\frac{du}{dx} - up\frac{dv}{dx} \right]_a^b$$

演算子 L が 上式 を満たすとき、Self-adjoint と呼ばれる

BC. or PBC によって 右辺 $=0$ となるので、

$$\int_a^b (vLu - uLv)\,dx = 0$$

$$\Longleftrightarrow \int_a^b vLu\,dx = \int_a^b uLv\,dx$$

ここで、二つの異なる固有値 λ_n, λ_m に対する固有関数 u_n, u_m を考える。

$$u_n(x) \ , \quad u_m(x)$$

$$\lambda_n \neq \lambda_m$$

すると、

$$L u_n = -\lambda_n \rho(x) u_n(x)$$

$$L v_m = -\lambda_m \rho(x) u_m(x)$$

$$\underbrace{\int_a^b dx \left(u_m L u_n - u_n L u_m \right)}_{\substack{\| \\ 0 \ (\text{境界条件から})}} = -(\lambda_n - \lambda_m) \int_a^b dx \ \rho(x) u_n(x) u_m(x)$$

$$\Rightarrow \quad \int_a^b dx \ \rho(x) u_n(x) u_m(x) = 0 \qquad \lambda_n \neq \lambda_m$$

すなわち、 $\lambda_m \neq \lambda_n$ なら u_m と u_n は直交する。

$\rho(x)$ は重み因子。

もし、$\rho(x)$ が負の関数でなければ、

$$\int_a^b \rho(x) \left[u_n(x) \right]^2 dx = 1$$

となる。これは、$u_n(x)$ についての規格化条件である。

(2) Complete Set (完全系)

☆ S-T型方程式の固有関数 $\{\cdots\cdots, u_{-1}, u_0, u_2, u_3, \cdots, u_n, \cdots\}$ は、完全系をなす.

→ 任意の関数 $\psi(x)$ は、$\{\cdots\cdots u_{-1}, u_0, u_1, \cdots\}$ の線形結合 (Linear Combination) で表現できる.

$$\rightarrow \quad \psi(x) = \sum_n C_n u_n(x)$$

係数 a_n は、次式で求まる.

$$C_n = \frac{\int_a^b dx\, \rho(x) u_n(x) \psi(x)}{\int_a^b \rho(x) [u_n(x)]^2 dx}$$

特に u_n が規格化されいるなら.

$$\int_a^b \rho(x) [u_n(x)]^2 dx = 1 \quad \text{なので.}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(x) \\ C_n &= \int_a^b dx\, \rho(x)\, u_n(x) \psi(x) \end{aligned}}$$

と簡単化される。

また．

$$\psi(x) = \sum_n c_n u_n(x)$$

代入．

$$c_n = \int_a^b dx\, \rho(x)\, u_n(x)\psi(x)$$

$$\psi(x) = \sum_n \left(\int_a^b dx'\, \rho(x')\, u_n(x')\psi(x') \right) u_n(x)$$

$$= \int_a^b dx' \boxed{\rho(x') \sum_n u_n(x') u_n(x)}\, \psi(x')$$

$\parallel$

$\delta(x-x')$ とおけばよい．

(注) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x')\, \delta(x-x') = f(x)$

したがって．

$$\rho(x') \sum_n u_n(x') u_n(x) = \delta(x-x') .$$

§. フーリエ級数とフーリエ積分変換

直交完全系をなす一例として

S-L 微分方程式

$$\frac{d^2 u_n(x)}{dx^2} = -k_n^2 u_n(x)$$

$$a < x < a+T.$$

P.B.C $\quad u_n(x+T) = u_n(x)$.

与式の解は

$$u_n(x) = \begin{cases} e^{ik_n x} \\ e^{-ik_n x} \end{cases}$$

PBC より

$$e^{ik_n(x+T)} = e^{ik_n x}$$

$$\to \quad e^{ik_n T} = 1 \quad \text{より} \quad k_n T = 2n\pi$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

$$u_n(x) = \exp\left[i \frac{2n\pi}{T} x \right].$$

直交性

$$\int_a^{a+T} dx\, u_n^*(x)\, u_m(x) = T\,\delta_{mn}$$

任意の関数 $\psi(x)$ を展開.

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left[i \frac{2\pi n}{T} x \right]$$

$$= a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos\left(\frac{2\pi n}{T} x\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n}{T} x\right) \right].$$

直交性より

$$c_n = \frac{1}{T} \int_a^{a+T} dx \, \exp\left[-i \frac{2\pi n}{T} x \right] \psi(x).$$

▷ Fourier 積分.

$a = -\frac{T}{2}$ とすると, $-\frac{T}{2} < x < \frac{T}{2}$

$T \to \infty$ とすれば, 区間が $-\infty < x < \infty$ になる.

$k = \frac{2\pi}{T} n$ とおけば

$$dk = \frac{2\pi}{T}(n+1) - \frac{2\pi}{T} n = \frac{2\pi}{T} dn$$

$$\sum_n \longrightarrow \int dn = \frac{T}{2\pi} \int dk.$$

よって,

$$\psi(x) = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, C(k) \, e^{ikx}$$

$$C(k) = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-ikx} \psi(x)$$

さらに

$$F(k) = \frac{T}{\sqrt{2\pi}} c(k)$$ とおけば

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, F(k) e^{ikx}$$

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi(x) e^{-ikx}$$

また

上の2式を組み合わせると、

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, e^{ik(x-x')}$$

が得られる.