FREDERICK W. BYRON
ROBERT W. FULLER

MATEMATYKA W FIZYCE KLASYCZNEJ I KWANTOWEJ

TOM 2



FREDERICK W. BYRON
ROBERT W FULLER

MATEMATYKA W FIZYCE KLASYCZNEJ I KWANTOWEJ

TOM 2

FREDERICK W. BYRON
ROBERT W. FULLER

MATEMATYKA W FIZYCE KLASYCZNEJ I KWANTOWEJ

Tom 2

wydanie II poprawione

WARSZAWA 1975
PAŃSTWOWE
WYDAWNICTWO
NAUKOWE

Autorzy

FREDERICK W. BYRON ROBERT W. FULLER

Tytuł oryginału

MATHEMATICS OF CLASSICAL AND QUANTUM PHYSICS

Tom 2

This volume is a Polish translation of MATHEMATICS OF CLASSICAL AND QUANTUM PHYSICS, Volume 2, by Frederick W. Byron jr. and Robert W. Fuller, published and sold in Poland only by permission of Addison-Wesley Publishing Company, Inc. Reading, Massachusetts, U.S.A., the owner of all rights to publish and sell the same.

Z języka angielskiego tłumaczyli

Andrzej Pindor i Andrzej Szymacha

Okładkę projektował

Piotr Tomaszewski

Redaktor

Krzysztof Bujalski

Redaktor techniczny

Maria Czyżewska-Zielińska

Korektor

Janina Chombakow

Printed in Poland

SPIS TREŚCI

Tom 1

1. Wektory w fizyce klasycznej
2. Rachunek wariacyjny
3. Wektory i macierze
4. Przestrzenie wektorowe w fizyce
5. Przestrzeń Hilberta — zupełne ortonormalne zbiory funkcji

Tom 2

6. Wybrane zagadnienia i zastosowania teorii funkcji analitycznych 7

Wstęp 7

6.1. Funkcje analityczne — warunki Cauchy'ego–Riemanna 8

6.2. Niektóre podstawowe funkcje analityczne 14

6.3. Całkowanie zespolone — twierdzenie Cauchy'ego–Goursata 24

6.4. Konsekwencje twierdzenia Cauchy'ego 30

6.5. Transformaty Hilberta i wartość główna Cauchy'ego 36

6.6. Wprowadzenie do związków dyspersyjnych 41

6.7. Rozwinięcie funkcji analitycznej na szereg potęgowy 51

6.8. Teoria residuów — obliczanie rzeczywistych całek oznaczonych i sumowanie szeregów 59

6.9. Zastosowania do funkcji specjalnych i przedstawień całkowych 72

7. Funkcje Greena 87

Wstęp 87

7.1. Nowy sposób rozwiązywania równań różniczkowych 87

7.2. Funkcje Greena i funkcja delta 94

7.3. Funkcje Greena w jednym wymiarze 99

7.4. Funkcje Greena w trzech wymiarach 108

7.5. Radialne funkcje Greena 117

7.6. Zastosowanie do zagadnień dyfrakcyjnych 130

7.7. Funkcje Greena zależne od czasu: pierwszy rząd 137

7.8. Równanie falowe 147

8. Wprowadzenie do równań całkowych 163

Wstęp 163

8.1. Metody iteracyjne — liniowe operatory całkowe 163

8.2. Normy operatorów 168

8.3. Metody iteracyjne w przestrzeni Banacha 172
8.4. Metoda iteracyjna równań nieliniowych 177
8.5. Jądra separowalne 183
8.6. Jądra skończonego rzędu 189
8.7. Operatory zwarte 195

9. Równania całkowe w przestrzeni Hilberta 210

Wstęp 210
9.1. Zwarte operatory hermitowskie 210
9.2. Równania liniowe i teoria zaburzeń 222
9.3. Metody przybliżeń skończonego rzędu dla zagadnień własnych 231
9.4. Alternatywa Fredholma dla operatorów zwartych 239
9.5. Numeryczne rozwiązywanie równań całkowych 245
9.6. Odwzorowania unitarne 252

10. Wstęp do teorii grup 270

Wstęp 270
10.1. Podejście indukcyjne 270
10.2. Grupy permutacji 276
10.3. Warstwy, klasy i podgrupy niezmiennicze 282
10.4. Symetrie i reprezentacje grupy 288
10.5. Reprezentacje nieprzywiedlne 293
10.6. Reprezentacje unitarne, lematy Schura i związki ortogonalności 299
10.7. Wyznaczanie reprezentacji grup 311
10.8. Teoria grup w problemach fizycznych 322
Skorowidz do tomu pierwszego 336
Skorowidz do tomu drugiego 340

WYBRANE ZAGADNIENIA I ZASTOSOWANIA TEORII FUNKCJI ANALITYCZNYCH

WSTĘP

Rola, jaką odgrywa teoria funkcji analitycznych w fizyce, uległa w ciągu ostatnich dziesięcioleci znacznym zmianom. Obecnie nie wystarcza już umiejętność obliczania całek za pomocą residuów; aby móc śledzić bieżące zastosowanie funkcji analitycznych w teoriach fizycznych, niezbędne jest głębsze zrozumienie idei matematycznych. Dlatego też w niniejszym rozdziale główny nacisk będzie położony na wprowadzanie matematycznych koncepcji i logicznej struktury teorii funkcji analitycznych. Zakładając u czytelnika jedynie znajomość własności liczb zespolonych, pragniemy zaprezentować stanowiący zamkniętą całość wykład teorii w sposób, który na tyle przygotuje czytelnika, aby mógł sobie radzić zarówno ze współczesnymi, jak i dawnymi zastosowaniami teorii.

Liczby „urojone" zostały odkryte w średniowieczu przy poszukiwaniach ogólnego rozwiązania równań kwadratowych. Nazwa, jaką im dano, wyraźnie wskazuje, że odnoszono się do nich podejrzliwie. W swojej pracy doktorskiej z 1799 roku Gauss podał znaną obecnie geometryczną interpretację liczb zespolonych i pomógł w ten sposób częściowo rozproszyć otaczającą je tajemniczość. W obecnym wieku istniała tendencja do definiowania liczb zespolonych jako abstrakcyjnych symboli podlegających przekształceniom według pewnych formalnych reguł. W ten sposób liczby zespolone nigdy nie nabrały „przyziemnych" cech liczb rzeczywistych. Faktycznie zdarzyło się raczej coś odwrotnego: zaczęliśmy uważać liczby rzeczywiste za abstrakcyjne symbole spełniające swój własny zespół aksjomatów, zupełnie tak samo jak liczby zespolone. Mówimy obecnie o polach: *polu liczb rzeczywistych* i *polu liczb zespolonych*. Aksjomaty definiujące pole zostały podane w rozdziale 3 omawiającym przestrzenie wektorowe.

Teorię liczb zespolonych można rozwinąć rozważając te liczby jako uporządkowane pary liczb rzeczywistych, zapisane w postaci (x, y). Niech (a, b) i (c, d) będą dwoma różnymi liczbami zespolonymi i niech K będzie liczbą rzeczywistą. Dodawanie liczb zespolonych i mnożenie liczby rzeczywistej przez zespoloną oraz mnożenie dwóch liczb zespolonych zdefiniowane jest wtedy za pomocą następujących reguł:

1. $(a, b)+(c, d) = (a+c, b+d)$,
2. $K \cdot (a, b) = (Ka, Kb)$,
3. $(a, b) \cdot (c, d) = (ac-bd, bc+ad)$.

Z definicji tych widzimy, że zbiór wszystkich liczb zespolonych — płaszczyzna zespolona — ma taką samą strukturę matematyczną jak zbiór wszystkich wektorów na płaszczyźnie.

Takie podejście zostało przyjęte w *Podstawach Analizy* opracowanych przez Landaua, gdzie różne systemy liczbowe są konstruowane logicznie z pięciu aksjomatów Peano; liczba urojona i nie jest nigdzie wymieniona. Jednakże gdy napiszemy uporządkowaną parę (a, b) w postaci $a+ib$, gdzie $i^2 = -1$, wtedy powyższe reguły mnożenia liczb zespolonych są zachowane, jeżeli mnożymy iloczyn $(a+ib)(c+id)$ po prostu według zwykłych reguł mnożenia liczb rzeczywistych. Wprowadzenie symbolu i pozwala na uwzględnienie porządkującego aspektu uporządkowanej pary liczb rzeczywistych podczas rozszerzania formalnych reguł arytmetyki z liczb rzeczywistych na liczby zespolone.

Liczby zespolone skonstruowane jako uporządkowane pary liczb rzeczywistych, gdzie $(a, b) = a+ib$ można uogólnić do liczb hiperzespolonych z trzema lub więcej składowymi, na przykład $(a, b, c) = a+ib+kc$. Czteroskładnikowe kwaterniony, typ liczb zespolonych, które spełniają wszystkie reguły arytmetyki z wyjątkiem prawa przemienności mnożenia, użyteczne są przy rozpatrywaniu obrotów ciała sztywnego. Cztery macierze 4×4 Diraca γ_i $(i = 1, 2, 3, 4)$ tworzą zbiór liczb hiperzespolonych spełniających relacje antykomutacji:

$$\gamma_i\gamma_j+\gamma_j\gamma_i = 2\delta_{ij}.$$

Można pokazać, że bez względu na to, jak zdefiniujemy dodawanie i mnożenie tych liczb hiperzespolonych, niemożliwe jest zachowanie zwykłych reguł arytmetyki. Jak pokazał Weyl, liczby zespolone tworzą naturalną granicę przy rozrzeszaniu pojęcia liczby w tym względzie.

6.1. FUNKCJE ANALITYCZNE — WARUNKI CAUCHY'EGO–RIEMANNA

Jeżeli każdej liczbie zespolonej z z pewnego obszaru odpowiada inna liczba zespolona w, wtedy w jest funkcją zmiennej zespolonej z, tzn. $w = f(z)$. Jeżeli jest to odpowiedniość jeden — jeden, wtedy możemy uważać tę funkcję za odwzorowanie jednej płaszczyzny lub jej części, płaszczyzny z w inną płaszczyznę w. Tak zdefiniowane funkcje zmiennej zespolonej są równoważne uporządkowanym parom rzeczywistych funkcji dwóch zmiennych, ponieważ w jest liczbą zespoloną zależną od $z = x+iy$ i może być zatem zapisane w postaci

$$w(z) = u(x, y)+iv(x, y).$$

Jednakże ta klasa funkcji jest dla naszych celów zbyt ogólna. Interesujemy się tylko takimi funkcjami, które są różniczkowalne względem zmiennej zespolonej z — jest to ograniczenie znacznie silniejsze niż warunek, aby u i v były różniczkowalne względem x i y. Pierwszym naszym zadaniem przy studiowaniu teorii funkcji zmiennej zespolonej będzie zatem określenie wystarczających i koniecznych warunków na to, aby funkcja zespolona miała pochodną względem zmiennej zespolonej z. Jednowartościowe funkcje zmiennej zespolonej posiadające pochodne w jakimś obszarze płaszczyzny zespolonej nazywają się *funkcjami analitycznymi*. W naszych rozważaniach ograniczymy się do tej specjalnej klasy funkcji zespolonych.

Oto dwa przykłady zespolonych funkcji, oba zapisane w postaci $w = u+iv$:

1. $w = z^* = x-iy$,
2. $w = z^2 = (x+iy)^2 = x^2-y^2+i2xy$.

Obecnie pokażemy, że (1) nie jest funkcją analityczną, natomiast funkcja (2) jest analityczna wszędzie w płaszczyźnie zespolonej, tzn. pochodna tej funkcji istnieje we wszystkich punktach.

Zanim dokładnie określimy, co rozumiemy przez pochodną funkcji zmiennej zespolonej, musimy dla tych funkcji dysponować pojęciem ciągłości.

W definicji, która nastąpi, używa się pojęcia wartości bezwzględnej liczby zespolonej, oznaczonej przez $|z|$. Czytelnik przypomni sobie, że $|z| = (zz^*)^{1/2} = (x^2+y^2)^{1/2}$. Wartość bezwzględna nazywana jest czasami modułem.

Definicja. Funkcja zespolona $w = f(z)$ jest ciągła w punkcie z_0, jeżeli dla każdego dowolnego $\varepsilon > 0$ istnieje takie δ, że $|f(z)-f(z_0)| < \varepsilon$, jeżeli $|z-z_0| < \delta$ lub też $f(z)$ jest ciągła w z_0, jeżeli

$$\lim_{z\to z_0} f(z) = f(z_0).$$

Definicja ta brzmi zupełnie tak samo, jak definicja ciągłości dla funkcji rzeczywistej zmiennej rzeczywistej. Jednakże w powyższej definicji znak wartości bezwzględnej oznacza, że jeżeli tylko z leży wewnątrz okręgu o promieniu δ i środku w z_0 w zespolonej płaszczyźnie z, wtedy $f(z)$ leży wewnątrz okręgu o promieniu ε i środku w $f(z_0)$ w płaszczyźnie zespolonej w. Jeżeli $f(z) = u(x, y)+iv(x, y)$, wtedy $f(z)$ jest ciągłe w $z_0 = x_0+iy_0$, jeżeli u i v są ciągłe w (x_0, y_0).

Z klasy jednowartościowych, ciągłych funkcji zespolonych, chcemy teraz wybrać te, które można różniczkować. Wzorując się na definicji pochodnej z analizy funkcji rzeczywistych mamy:

Definicja. $f(z)$ jest różniczkowalne w punkcie z_0, jeżeli istnieje granica

$$\lim_{z\to z_0} \frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0} = \lim_{\Delta z\to 0} \frac{\Delta f}{\Delta z}.$$

Granicę tę, pochodną $f(z)$ w z_0, będziemy oznaczać przez $f'(z_0)$.

Bardzo ważną cechą granic występujących w definicjach ciągłości i pochodnej jest to, że z może dążyć do z_0 wzdłuż dowolnego kierunku leżącego na płaszczyźnie. Kiedy mówimy, że istnieje granica, mamy zatem na myśli, iż proces przechodzenia do granicy musi dać w rezultacie tę samą liczbę bez względu na to, w jaki sposób dokonywane jest to przejście graniczne. To samo jest prawdziwe w analizie funkcji rzeczywistych, ale w tamtym przypadku istnieją tylko dwa możliwe kierunki przy przechodzeniu do granicy: od lewej lub prawej strony na osi rzeczywistej. W analizie funkcji rzeczywistych proces przechodzenia do granicy jest jednowymiarowy; w analizie funkcji zespolonych jest on dwuwymiarowy.

Równanie, które definiuje pochodną oznacza, iż dla każdego dowolnego $\varepsilon > 0$, istnieje takie δ, że

$$\left| f'(z) - \frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0} \right| < \varepsilon,$$

o ile tylko $|z-z_0| < \delta$. Żądanie, aby stosunek $[f(z)-f(z_0)]/(z-z_0)$ zawsze dążył do tej samej wartości granicznej, bez względu na to wzdłuż jakiej drogi z zdąża do z_0, jest

niezwykle surowym warunkiem. Teoria funkcji analitycznych zawiera sporo zadziwiających twierdzeń, a wszystkie one są rezultatem tego surowego wstępnego warunku, aby funkcja posiadała „izotropowe" pochodne.

Mówimy, że jednowartościowa funkcja zmiennej z jest *analityczna* lub *regularna* w punkcie z_0, jeżeli ma pochodną w z_0 i we wszystkich punktach z pewnego otoczenia z_0. Wprowadzimy zatem niewielkie rozróżnienie między różniczkowalnością i analitycznością. Warto to zrobić, ponieważ istnieją funkcje, które mają pochodne w pewnych punktach lub nawet wzdłuż pewnych krzywych, ale nie można otrzymać żadnych interesujących rezultatów, dopóki funkcje nie są różniczkowalne w jakimś obszarze, tzn. dopóki nie są one analityczne. Wobec tego, jeżeli mówimy, że funkcja jest analityczna na jakiejś krzywej, mamy na myśli, że ma ona pochodną we wszystkich punktach jakiegoś dwuwymiarowego pasa zawierającego tę krzywą. Jeżeli funkcja nie jest analityczna w punkcie lub na krzywej, mówimy, że jest tam *osobliwa*.

Zbadamy teraz dwie wcześniej wymienione funkcje zespolone ze względu na różniczkowalność i analityczność. Pochodną w z_0 zapiszemy w postaci

$$f'(z_0) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{f(z_0+\Delta z)-f(z_0)}{\Delta z},$$

kładąc w pierwotnej definicji $z = z_0+\Delta z$. Dla $f(z) = z^2$ mamy

$$f'(z_0) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{(z_0+\Delta z)^2-z_0^2}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \to 0} (2z_0+\Delta z) = 2z_0.$$

Wynik ten jest w sposób oczywisty niezależny od drogi, wzdłuż której $\Delta z \to 0$, tak więc funkcja $f(z) = z^2$ jest wszędzie różniczkowalna i analityczna. Wynik ten jest zupełnie analogiczny do pochodnej funkcji rzeczywistej $f(x) = x^2$.

Z drugiej strony, jeżeli $f(z) = z^*$, wtedy mamy

$$f'(z_0) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{z_0^*+\Delta z^*-z_0^*}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{\Delta z^*}{\Delta z}.$$

Jeżeli $\Delta z \to 0$ wzdłuż osi rzeczywistej x, to $\Delta z = \Delta x$ i $\Delta z^* = \Delta x^* = \Delta x$, tak więc $f'(z_0) = +1$. Jeżeli natomiast Δz zdąża do 0 wzdłuż urojonej osi y, wtedy $\Delta z = i\Delta y$ tak, że $\Delta z^* = -i\Delta y = -\Delta z$, a zatem $f'(z_0) = -1$. Ponieważ dla dowolnego punktu z_0 granica przy $z \to z_0$ zależy od kierunku podchodzenia do z_0, funkcja nie jest nigdzie różniczkowalna ani analityczna. [Ogólnie $\Delta z^*/\Delta z = e^{-2i\theta}$, gdzie $\theta = \operatorname{arctg}(\Delta y/\Delta x)$, co w widoczny sposób zawiera kierunek (θ), w jakim przechodzimy do granicy.]

Wiele twierdzeń o różniczkowalności w analizie rzeczywistej ma swoje analogie w analizie zespolonej i tak mamy:

1. Funkcja stała jest analityczna.

2. $f(z) = z^n$ dla $n = 1, 2, \ldots$ jest analityczna.

3. Suma, iloczyn i iloraz funkcji analitycznych są analityczne zakładając w przypadku ilorazu, że mianownik nie znika nigdzie w rozważanym obszarze.

4. Funkcja analityczna funkcji analitycznej jest analityczna.

Dowody przebiegają zupełnie tak samo jak w przypadku rzeczywistym.

Określimy teraz konieczne i wystarczające warunki na to, aby funkcja $w(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ była różniczkowalna w jakimś punkcie. Założymy po pierwsze, że $w(z)$ jest rzeczywiście różniczkowalna w jakimś punkcie $z = z_0$, wtedy

$$w'(z_0) = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{\Delta w}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \to 0} \left(\frac{\Delta u}{\Delta z} + i \frac{\Delta v}{\Delta z} \right).$$

Ponieważ $w'(z_0)$ istnieje, liczba ta nie zależy od tego, w jaki sposób $\Delta z \to 0$, to znaczy nie zależy od stosunku $\Delta y/\Delta x$. Jeżeli przechodzimy do granicy wzdłuż osi rzeczywistej $\Delta y = 0$ i $\Delta z = \Delta x$, wtedy

$$w'(z_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \left(\frac{\Delta u}{\Delta x} + i \frac{\Delta v}{\Delta x} \right) = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x}.$$

Z drugiej strony, jeżeli przechodzimy do granicy wzdłuż osi urojonej, $\Delta x = 0$ i $\Delta z = i\Delta y$. Teraz

$$w'(z_0) = \lim_{\Delta y \to 0} \left(\frac{\Delta v}{\Delta y} - i \frac{\Delta u}{\Delta y} \right) = \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Z założenia różniczkowalności te dwie granice muszą być sobie równe. Przyrównując części rzeczywiste i zespolone mamy:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{i} \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y}. \tag{6.1}$$

Równania (6.1) znane są jako równania Cauchy'ego–Riemanna. Podają one warunek konieczny na to, aby funkcja była różniczkowalna. Warunek ten otrzymaliśmy żądając różniczkowalności w specjalny sposób; nie jest zatem zadziwiające, że warunki powyższe same nie są wystarczające. Wystarczające warunki na różniczkowalność $w(z)$ w punkcie z_0 są następujące: po pierwsze równania Cauchy'ego–Riemanna muszą być w tym punkcie spełnione i po drugie — pierwsze pochodne cząstkowe $u(x, y)$ i $v(x, y)$ muszą istnieć i być ciągłe w z_0.

Dowód jest zupełnie prosty. Zauważmy najpierw, że u jest ciągłe w (x_0, y_0), ponieważ jest tam różniczkowalne; cząstkowe pochodne u są ciągłe z założenia. W tych warunkach z analizy funkcji wielu zmiennych wynika*, że

$$\Delta u = u(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) - u(x_0, y_0) = \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial u}{\partial y} \Delta y + \varepsilon_1 \Delta x + \varepsilon_2 \Delta y,$$

gdzie $\partial u/\partial x$ i $\partial u/\partial y$ są cząstkowymi pochodnymi określonymi w punkcie (x_0, y_0), a ε_1 i ε_2 zmierzają do zera, gdy zarówno Δx i Δy zbiegają do zera. Stosując podobny wzór dla $v(x, y)$ mamy

$$\Delta w = w(z_0 + \Delta z) - w(z_0) = \Delta u + i\Delta v =$$
$$= \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial u}{\partial y} \Delta y + \varepsilon_1 \Delta x + \varepsilon_2 \Delta y + i \left(\frac{\partial v}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial v}{\partial y} \Delta y + \varepsilon_3 \Delta x + \varepsilon_4 \Delta y \right).$$

---

* Patrz np. G. B. Thomas jr., *Calculus and Analytic Geometry* czwarte wydanie, Addison–Wesley Publishing Co. 1968, § 15-4, str. 503, równ. 4 lub W. Kaplan *Advanced Calculus* Addison–Wesley Publishing Co. 1953, § 2-6, str. 84.

Używając teraz równań Cauchy'ego–Riemanna, które z założenia spełnione są w punkcie (x_0, y_0), otrzymujemy

$$\Delta w = \frac{\partial u}{\partial x}(\Delta x + i\Delta y) + i\frac{\partial v}{\partial x}(\Delta x + i\Delta y) + \Delta x(\varepsilon_1 + i\varepsilon_3) + \Delta y(\varepsilon_2 + i\varepsilon_4),$$

zatem

$$\frac{\Delta w}{\Delta z} = \frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x} + (\varepsilon_1 + i\varepsilon_3)\frac{\Delta x}{\Delta z} + (\varepsilon_2 + i\varepsilon_4)\frac{\Delta y}{\Delta z}.$$

Ponieważ $|\Delta z| = [(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]^{1/2}$, $|\Delta x| \leqslant |\Delta z|$ i $|\Delta y| \leqslant |\Delta z|$, więc $|\Delta x/\Delta z| \leqslant 1$ i $|\Delta y/\Delta z| \leqslant 1$. Ponieważ te czynniki są ograniczone, dwa ostatnie człony w powyższym równaniu zmierzają do zera wraz z Δz, bo ε_1, ε_2, ε_3 i ε_4 zbiegają do zera, gdy Δz dąży do zera. Zatem w z_0

$$w'(z_0) = \frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}; \tag{6.2}$$

granica ta nie zależy od drogi, więc pochodna istnieje. Stosując warunki Cauchy'ego–Riemanna mamy także

$$w'(z_0) = \frac{\partial v}{\partial y} - i\frac{\partial u}{\partial y}. \tag{6.3}$$

Przykład. Rozważmy funkcję z^3. Mamy

$$z^3 = (x^3 - 3xy^2) + i(3x^2y - y^3) = u + iv,$$

zatem

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 3x^2 - 3y^2 = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{i} \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 6xy = -\frac{\partial u}{\partial y}.$$

Wobec tego równania Cauchy'ego–Riemanna są wszędzie spełnione. Ponieważ pochodne cząstkowe są ciągłe, funkcja z^3 jest rzeczywiście wszędzie analityczna. Funkcja, która jest analityczna w całej płaszczyźnie zespolonej, nazywana jest funkcją całkowitą. Pochodną z^3 można znaleźć używając (6.2) lub (6.3). Otrzymujemy

$$\frac{dz^3}{dz} = \frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x} = 3[(x^2 - y^2) + 2ixy] = 3z^2,$$

co jest zadowalającym wynikiem. Jako drugi przykład pozostawimy czytelnikowi pokazanie, że funkcja $|z|^2 \equiv zz^*$ jest różniczkowalna tylko w początku układów współrzędnych i zatem nie jest nigdzie analityczna. Z równań Cauchy'ego–Riemanna wynika natychmiast pewien godny uwagi rezultat, który wskazuje na związki z fizyką. Zakładając, że równania te spełnione są w pewnym obszarze mamy

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x} = -\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \nabla^2 u = 0, \tag{6.4}$$

jeżeli drugie pochodne cząstkowe są ciągłe tak, że możemy zamienić porządek różniczkowania w mieszanych pochodnych cząstkowych. W ten sam sposób możemy stwierdzić, że funkcja v także spełnia dwuwymiarowe równanie Laplace'a, a więc części rzeczywista i urojona funkcji analitycznej, posiadające ciągłe drugie pochodne cząstkowe, obie spełniają dwuwymiarowe równanie Laplace'a. Udowodnimy później, stosując teorię całki,

że drugie pochodne cząstkowe funkcji analitycznej są z konieczności ciągłe; to zastrzeżenie można więc opuścić. Interesujące jest, że te twierdzenia o pochodnych mogą być udowodnione tylko drogą całkowania.

Każda funkcja spełniająca $\nabla^2\phi = 0$ nazywana jest funkcją harmoniczną. Jeżeli $f = u+iv$ jest funkcją analityczną, to $\nabla^2 u = \nabla^2 v = 0$ i wtedy u i v nazywane są *stowarzyszonymi funkcjami harmonicznymi*. Jeżeli dana jest jedna z dwóch stowarzyszonych funkcji harmonicznych, można użyć równań Cauchy'ego–Riemanna do znalezienia drugiej z dokładnością do stałej. Przykładowo łatwo zauważyć, że funkcja $u(x, y) = 2x-x^3+3xy^2$ jest harmoniczna. W celu znalezienia stowarzyszonej do niej funkcji harmonicznej postępujemy następująco:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = 2-3x^2+3y^2 \Rightarrow v = 2y-3x^2y+y^3+\phi(x),$$

gdzie $\phi(x)$ jest pewną funkcją x. Używając teraz drugiego równania Cauchy'ego–Riemanna otrzymujemy

$$\frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y} \Rightarrow -6xy+\phi'(x) = -6xy \Rightarrow \phi' = 0,$$

zatem $\phi(x)$ musi być stałą i funkcja harmoniczna stowarzyszona do u ma postać

$$v = 2y-3x^2y+y^3+\text{const}.$$

Zauważmy, że funkcja $w = u+iv = 2z-z^3+C$ jest funkcją analityczną, tak jak być powinno.

Zanim pójdziemy dalej, spróbujmy korzystając z faktu, że jesteśmy fizykami, zaprezentować inne, krótsze wyprowadzenie tych warunków, oparte na użyciu infinitezymalnie małych przyrostów. Niech $w = u+iv$ i $w' = p+iq$, wtedy $\delta w = w'\delta z$ lub biorąc część rzeczywistą i urojoną

$$\delta u = p\delta x-q\delta y, \qquad \delta v = p\delta y+q\delta x.$$

Stąd wynika natychmiast, że

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = p, \qquad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y} = q.$$

Równania powyższe są identyczne z równaniami Cauchy'ego–Riemanna (6.1).

Kontynuując te nieformalne rozważania, możemy wyprowadzić inny, ściśle związany wynik, który pozwoli nam lepiej zrozumieć sens analityczności. Ponownie, niech $w(z) = w(x, y) = u(x, y)+iv(x, y)$. Pokażemy teraz, że $\partial w/\partial z^* = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy równania Cauchy'ego–Riemanna są spełnione. Nie będziemy kłopotać się sensem tej pochodnej względem z^*, ale po prostu formalnie zróżniczkujemy traktując pochodną symbolicznie. Z pomocą wyrażeń

$$x = (z+z^*)/2 \quad \text{i} \quad y = (z-z^*)/2i$$

mamy

$$\frac{\partial w}{\partial z^*} = \frac{\partial w}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial z^*}+\frac{\partial w}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial z^*} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}+i\frac{\partial v}{\partial x}\right)\frac{1}{2}+\left(\frac{\partial u}{\partial y}+i\frac{\partial v}{\partial y}\right)\left(-\frac{1}{2i}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{\partial v}{\partial y}\right)+\frac{i}{2}\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial y}\right).$$

Jeżeli równania Cauchy'ego–Riemanna są spełnione, ostatnie wyrażenie znika. Jeżeli z drugiej strony $\partial w/\partial z^* = 0$, wtedy zarówno rzeczywista jak i zespolona część ostatniego wyrażenia musi znikać, a więc równania Cauchy'ego–Riemanna są spełnione.

Ten czysto formalny wynik, który można otrzymać ściśle, sugeruje nam, że funkcje analityczne są niezależne od z^*; są one funkcjami tylko z. Tak więc funkcje analityczne są prawdziwymi funkcjami zmiennej zespolonej, a nie po prostu zespolonymi funkcjami dwóch zmiennych rzeczywistych (patrz np. zadanie 1), które ogólnie rzecz biorąc będą zależały zarówno od z^*, jak również od z, zgodnie z

$$f(x, y) = f\left(\frac{z+z^*}{2}, \frac{z-z^*}{2i}\right).$$

6.2. NIEKTÓRE PODSTAWOWE FUNKCJE ANALITYCZNE

Jedną z najbardziej użytecznych funkcji zmiennej zespolonej jest funkcja wykładnicza, którą dla $z = x+iy$ definiujemy przez

$$e^z \equiv e^x(\cos y + i \sin y). \tag{6.5}$$

Z tej definicji i z naszych poprzednich rozważań wynika prosto, że e^z jest funkcją analityczną i że

$$\frac{d}{dz} e^z = e^z.$$

Inne znane własności funkcji wykładniczych, w szczególności $e^{z_1+z_2} = e^{z_1}e^{z_2}$ wynikają bezpośrednio z równania (6.5). Zauważmy, że e^z jest funkcją okresową o okresie $2\pi i$, tzn.

$$e^{z+2\pi i} = e^z e^{2\pi i} = e^z(\cos 2\pi + i \sin 2\pi) = e^z.$$

Z równania (6.5) widzimy, że

$$e^{iy} = \cos y + i \sin y,$$

skąd wynika, iż

$$\cos y = \frac{e^{iy}+e^{-iy}}{2}, \quad \sin y = \frac{e^{iy}-e^{-iy}}{2i}.$$

Wzory te sugerują, że dla dowolnego zespolonego z możemy zdefiniować

$$\cos z \equiv \frac{e^{iz}+e^{-iz}}{2} \tag{6.6}$$

i

$$\sin z \equiv \frac{e^{iz}-e^{-iz}}{2i}, \tag{6.7}$$

a ponieważ

$$\frac{d}{dz} e^z = e^z,$$

to łatwo jest obliczyć pochodne $\cos z$ i $\sin z$. Otrzymujemy

$$\frac{d}{dz} \cos z = \frac{ie^{iz}-ie^{-iz}}{2} = -\sin z,$$

$$\frac{d}{dz} \sin z = \frac{ie^{iz}+ie^{-iz}}{2i} = \cos z,$$

jak moglibyśmy się spodziewać sądząc z przypadku zmiennej rzeczywistej. Używając równań (6.6) i (6.7) łatwo sprawdzić, że wszystkie znane tożsamości trygonometryczne, takie jak

$$\cos(z_1 + z_2) = \cos z_1 \cos z_2 - \sin z_1 \sin z_2,$$

pozostają słuszne dla zmiennych zespolonych.

Zespolone funkcje sinus i cosinus mogą oczywiście być zapisane w postaci $u(x, y) + iv(x, y)$. Przykładowo

$$\sin z = \frac{1}{2i}[e^{i(x+iy)} - e^{-i(x+iy)}] = \frac{1}{2i} e^{-y}(\cos x + i \sin x) - \frac{1}{2i} e^{y}(\cos x - i \sin x) =$$

$$= \sin x(e^{y} + e^{-y})/2 + i \cos x(e^{y} - e^{-y})/2,$$

zatem

$$\sin z = \cosh y \sin x + i \sinh y \cos x. \tag{6.8}$$

Podobnie

$$\cos z = \cosh y \cos x - i \sinh y \sin x. \tag{6.9}$$

Kładąc $x = 0$ uzyskujemy użyteczne relacje $\sin(iy) = i \sinh y$ i $\cos(iy) = \cosh y$. Widzimy także, że warunki Cauchy'ego–Riemanna spełnione są wszędzie tak, jak wiemy, że powinny być. Z równań (6.8) i (6.9) wynikają bezpośrednio inne własności

$$(\sin z)^* = \sin(z^*),$$
$$\sin(-z) = -\sin(z),$$
$$\sin(z + 2\pi) = \sin(z).$$

Używając funkcji sinus i cosinus definiujemy inne znane funkcje trygonometryczne, np.

$$\operatorname{tg} z = \sin z / \cos z.$$

W podobny sposób przez analogię z przypadkiem rzeczywistym definiujemy cotangens, secans i cosecans. Funkcje te różnią się od sinusa i cosinusa w ten sposób, że nie są wszędzie analityczne. Tangens będący stosunkiem dwóch funkcji analitycznych będzie analityczny wszędzie z wyjątkiem punktów, w których $\cos z = 0$. Używając części rzeczywistej i zespolonej cosinusa możemy napisać ten warunek jako

$$\cosh y \cos x = 0, \quad \sinh y \sin x = 0.$$

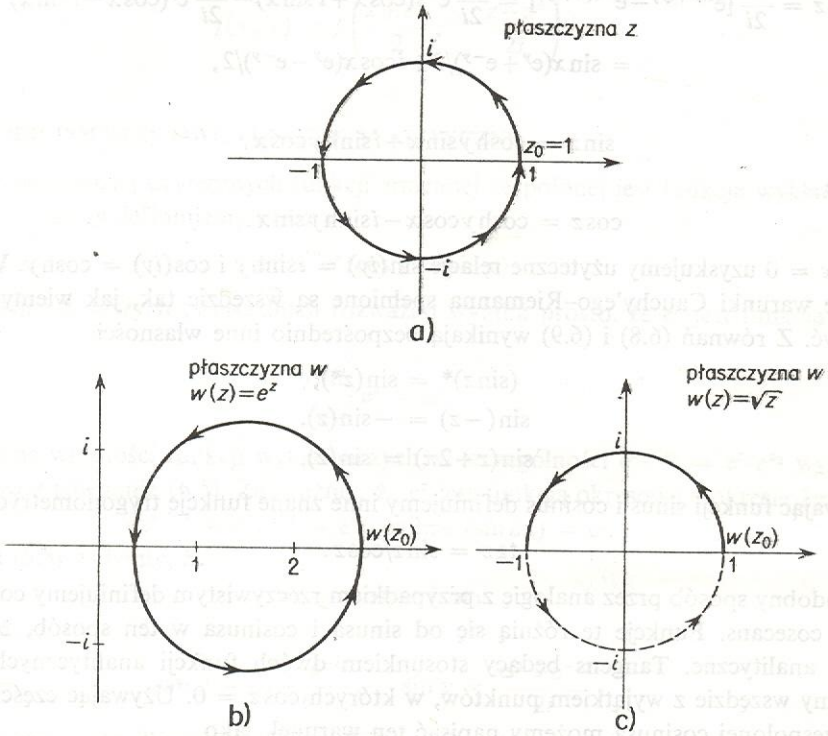
Teraz $\cosh y \geqslant 1$ dla wszystkich rzeczywistych y; pierwsze równanie ma więc rozwiązania wszędzie, gdzie $\cos x = 0$ lub $x = (2n+1)\pi/2$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. W tych punktach $\sin x = \pm 1$, więc drugie równanie wymaga, aby $\sinh y = 0$, tzn. $y = 0$. Zatem tangens jest funkcją osobliwą w punktach $(2n+1)\pi/2$ dla $n = 0, \pm 1, \ldots$ na osi rzeczywistej i tylko w tych punktach. Wobec tego $\operatorname{tg} z$ staje się nieskończony w dokładnie tych samych punktach, gdzie $\operatorname{tg} x$ (x rzeczywiste) staje się nieskończony i tylko w tych punktach.

Na podstawie powyższych dyskusji kuszące może być przypuszczenie, że zespolone funkcje trygonometryczne są „po prostu tym samym" co ich rzeczywiste odpowiedniki. Jednakże czytelnik może łatwo pokazać, że

$$|\sin z|^2 = \sin^2 x + \sinh^2 y$$

i wyrażenie powyższe wzrasta bezgranicznie, gdy y dąży do nieskończoności. Kontrastuje to zasadniczo z przypadkiem rzeczywistym, gdzie $|\sin x| \leqslant 1$ dla wszystkich rzeczywistych x.

Wszystkie funkcje, które dyskutowaliśmy do tej pory, miały taką własność, że jeżeli wybierzemy dowolny punkt z_0 w płaszczyźnie zespolonej i wyjdziemy z tego punktu, aby poruszając się po dowolnej drodze powrócić do niego z powrotem, to wartość funkcji zmienia się w sposób ciągły wzdłuż pewnej drogi powracając do pierwotnej wartości w z_0. Przypuśćmy przykładowo, że rozważamy funkcję $w(z) = e^z$ i zaczynając z punktu $z_0 = 1$ okrążamy w płaszczyźnie z początek układu po kole jednostkowym przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Rys. 6.1(a) pokazuje kołową drogę w płaszczyźnie z, a rys. 6.1(b) odpowiednią drogę w płaszczyźnie w. [Użycie dwóch płaszczyzn zespolonych w celu



Rys. 6.1(a) Kontur kołowy w płaszczyźnie z wokół początku układu. (b) Odwzorowanie konturu z rys. 6.1(a) przez funkcję e^z. (c) Odwzorowanie konturu z rys. 6.1(a) przez funkcję $\sqrt{z}$.

„wykreślenia" funkcji $w(z)$ jest często używane w teorii zmiennej zespolonej.] Zauważmy, że obie drogi są zamknięte, co jest właśnie geometrycznym stwierdzeniem faktu, że jeżeli startujemy z punktu z_0, gdzie funkcja ma wartość $w(z_0)$, i gdy poruszając się po krzywej zamkniętej wrócimy z powrotem do z_0, to wartości funkcji tworzą także linię ciągłą powracającą do $w(z_0)$. W wypadku funkcji e^z rezultat ten trudno uważać za niezwykły, ponieważ tak zdefiniowaliśmy e^z, kierując się własnościami rzeczywistej funkcji wykładniczej, aby funkcja ta zachowywała się w opisany sposób. Jeżeli teraz przyjrzymy się innej prostej funkcji, mianowicie pierwiastkowi kwadratowemu, to zobaczymy, że nie zawsze sprawy wyglądają tak prosto. Napiszmy formalnie

$$w(z) \equiv \sqrt{z} \equiv \sqrt{x+iy}\,.$$

Zauważmy, że definicja ta pozbawiona jest znaczenia, ponieważ nie dysponujemy w tej

chwili żadnym zbiorem operacji, które pozwoliłyby nam znaleźć $w(z)$ dla jakichś danych x i y (z wyjątkiem $y = 0$). Jest to sytuacja przeciwna niż w przypadku równania (6.5), gdzie znane operacje na zmiennych rzeczywistych wystarczały do rozwiązania wszystkich problemów związanych z wyliczeniem wartości funkcji.

Na szczęście w przypadku pierwiastka kwadratowego istnieje inna możliwość, a mianowicie możemy zapisać z w postaci biegunowej*, jako $z = re^{i\theta}$. W tej postaci logiczne jest rozszerzenie pierwiastka kwadratowego na płaszczyznę zespoloną zawarte w definicji:

$$w(z) \equiv \sqrt{z} \equiv \sqrt{r}\, e^{i\theta/2} = \sqrt{r}[\cos(\theta/2) + i\sin(\theta/2)].$$

Funkcja ta w oczywisty sposób spełnia relację $w^2 = z$, co jest z pewnością minimalnym wymaganiem dla każdej sensownej definicji pierwiastka kwadratowego. Spróbujmy posługując się tą definicją zmieniać z wzdłuż tej samej drogi wybranej na rysunku 6.1(a) zaczynając od $r = 1$ i $\theta = 0$. Rys. 6.1(c) pokazuje odpowiadającą temu drogę w płaszczyźnie w. Zauważmy, że nie jest to droga zamknięta; po dokonaniu pełnego obiegu wokół początku układu w płaszczyźnie z, docieramy w płaszczyźnie w do punktu $w = -1$, a nie $w = +1$. Aby dotrzeć z powrotem do $w = +1$, musimy zmieniać θ od 2π do 4π, tzn. przebyć drogę po okręgu w płaszczyźnie z jeszcze jeden raz. [Patrz krzywa przerywana na rys. 6.1(c).] W rzeczywistości nie jest to najlepszy sposób opisywania sytuacji; nie chcemy mówić o poruszaniu się po okręgu w pierwotnej płaszczyźnie po raz drugi, wolimy raczej mówić o poruszaniu się po identycznej drodze w innej płaszczyźnie z. Odpowiada to faktowi, że przy pierwszym okrążeniu θ zmieniało się od 0 do 2π, a przy drugim od 2π do 4π. Sytuacja ta nie różni się tak bardzo od przypadku funkcji w rodzaju e^z, jak mogłoby się to na pierwszy rzut oka wydawać. W zmiennych biegunowych możemy napisać

$$e^z = e^{r\cos\theta}[\cos(r\sin\theta) + i\sin(r\sin\theta)]$$

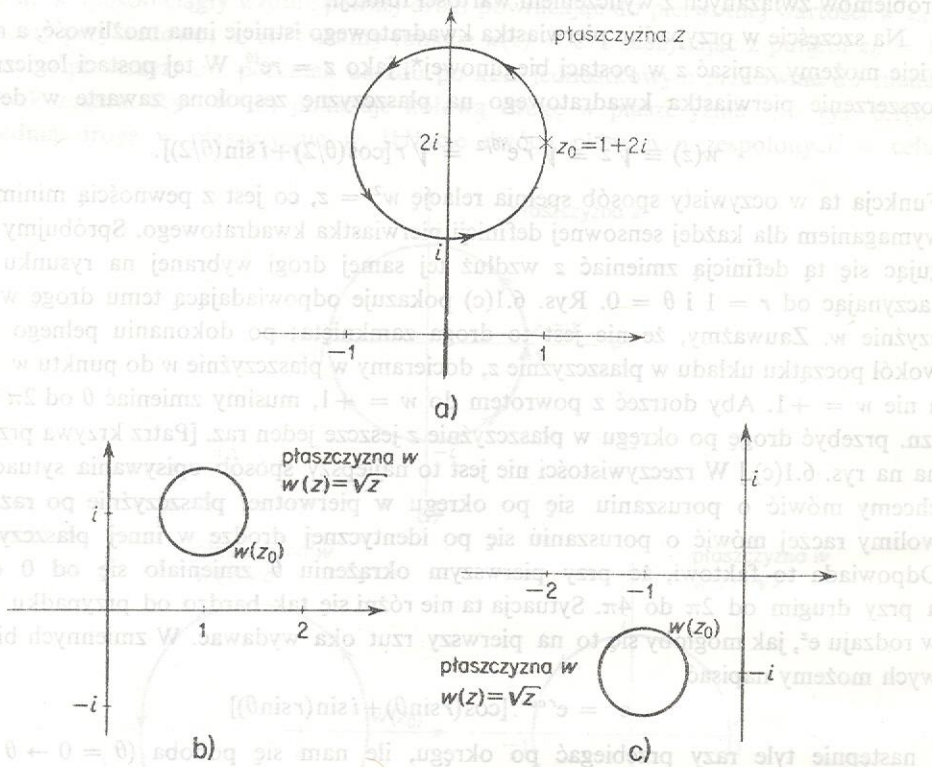
i następnie tyle razy przebiegać po okręgu, ile nam się podoba ($\theta = 0 \to \theta = 2\pi$, $\theta = 2\pi \to \theta = 4\pi$ itd.). W tym wypadku otrzymujemy tę samą wartość e^z dla każdego obiegu. Nie tracimy zatem żadnej informacji o e^z, jeżeli będziemy identyfikować ze sobą płaszczyzny odpowiadające $\theta = 0 \to \theta = 2\pi$, $\theta = 2\pi \to \theta = 4\pi$ itd. Jednakże w przypadku $w(z) = \sqrt{z}$ potrzebujemy dwóch płaszczyzn nazywanych zwykle *płatami Riemanna* w celu jednoznacznego scharakteryzowania funkcji $w(z)$.

Jest oczywiste, że dwie płaszczyzny wystarczają: jeżeli θ będzie zmieniać się od 4π do 6π, i uzyskujemy te same wartości jak przy θ w granicach od 0 do 2π.

Ważną jest rzeczą pamiętać, że droga pokazana na rys. 6.1(a) okrąża początek układu. Jeżeli wybierzemy drogę, która ani nie okrąża początku układu, ani nie przecina dodatniej osi x, wtedy w płaszczyźnie w także otrzymamy drogę zamkniętą. Rys. 6.2(a) i 6.2(b) pokazują sytuację dla $w(z) = \sqrt{z}$, przy czym zaczynamy od $z_0 = \sqrt{5}\, e^{i\phi_0}$, gdzie $\phi_0 = \text{arctg}2$ (posługujemy się zwykłą trygonometryczną konwencją, według której $\text{arctg}x$ przyjmuje wartości między 0 i $\pi/2$). Możemy powiedzieć, że na rys. 6.2(a) zaczynamy od punktu $z_0 = 1+2i$ na pierwszym płacie Riemanna i powracamy do tego punktu bez okrą-

* Jeżeli napiszemy $z = x+iy$ i dokonamy zamiany zmiennych przechodząc do współrzędnych biegunowych ($x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$), uzyskujemy $z = r(\cos\theta + i\sin\theta) = re^{i\theta}$, gdzie $r = (x^2+y^2)^{1/2}$ i $\theta = \text{arc tg}\left(\frac{y}{x}\right)$.

żania początku układu. Jeżeli uczynimy to samo dla $z_0 = 1+2i$ na drugim płacie Riemanna (tzn. $\phi_0 = \operatorname{arctg} 2 + 2\pi$), w płaszczyźnie w zostanie wykreślona odpowiednia krzywa zamknięta (rys. 6.2(c)).



Rys. 6.2 (a) Zamknięty kontur w płaszczyźnie z, który nie obejmuje początku układu współrzędnych. (b) Odwzorowanie konturu z rysunku 6.2(a) przez funkcję $\sqrt{z}$, w przypadku przyjęcia, że kontur z rys. 6.2(a) leży na pierwszym płacie Riemanna. (c) Odwzorowanie konturu z rys. 6.2(a) przez funkcję $\sqrt{z}$ w przypadku przyjęcia, że kontur z rys. 6.2(a) leży na drugim płacie Riemanna.

Łatwo zauważyć, że opisane powyżej trudności będą występować także dla $w(z) = \sqrt{z}$ i każdej drogi zaczynającej się na dodatniej osi rzeczywistej i powracającej do pierwotnego punktu po okrążeniu początku układu. Jeżeli zatem chcemy rozważyć $w(z) = \sqrt{z}$ w podobnie prosty sposób jak e^z, to stwierdzamy, że funkcja $\sqrt{z}$ nie jest ciągła wzdłuż dodatniej osi x i nie jest tam analityczna. Aby jednak uniknąć tej kłopotliwej sytuacji, możemy powiedzieć, że gdy wracamy z powrotem na oś rzeczywistą po przebyciu łuku 2π radianów, to przechodzimy w sposób ciągły na drugi płat Riemanna. Gdy jeszcze raz obiegniemy $z = 0$ na drugim płacie powracając z powrotem na dodatnią oś rzeczywistą, przechodzimy wtedy w ciągły sposób na pierwszy płat Riemanna. Można sobie zatem wyobrazić, że oba płaty są przecięte wzdłuż dodatniej osi x i połączone w sposób zilustrowany na rys. 6.3. Przy pomocy tej konstrukcji funkcja $w(z) = \sqrt{z}$ staje się jednowartościowa [na obu płatach kładziemy $w(0) = 0$] i analityczna wszędzie z wyjątkiem początku układu, gdzie dla $\sqrt{z}$ występuje ta sama trudność co dla $\sqrt{x}$ w przypadku zmiennej rzeczywistej. Początek układu jest zatem punktem osobliwym dla $w(z) = \sqrt{z}$.

Przyjmijmy w ogólności, że mamy jakiś punkt osobliwy z_0 pewnej funkcji $w(z)$ i drogę zaczynającą się w z_1, która okrąża ten punkt. Jeżeli w celu powrotu do pierwotnej wartości $w(z_1)$ kąt θ musi przebiegać zakres większy niż od 0 do 2π, wtedy z_1 nazywane jest *punktem rozgałęzienia* funkcji $w(z)$. Cięcie, które wychodzi z tego punktu, nosi czasem nazwę *cięcia gałęziowego*. W prostym przypadku, który dyskutowaliśmy powyżej $[w(z) = \sqrt{z}]$ wartość $w(z_1)$ dla z_1 z drugiego płatu różni się po prostu znakiem od $w(z_1)$ dla z_1 z pierwszego płatu. Zauważcie, że możliwe jest, aby punkt z_1 z pierwszego płatu był punktem, dla którego pewna funkcja $w(z)$ jest analityczna, podczas gdy punkt z_1 z drugiego płatu jest *punktem osobliwym*. Przykładem takiej funkcji jest

$$w(z) = \frac{1}{i+\sqrt{z}};$$

$w(z)$ jest jednowartościową funkcją określoną na dwupłatowej powierzchni Riemanna przeciętej wzdłuż dodatniej osi rzeczywistej i połączonej tak, jak pokazuje rys. 6.3. Funkcja ta jest analityczna w $z = -1$ dla $\phi = \pi$ na pierwszym płacie Riemanna i osobliwa w $z = -1$ dla $\phi = 3\pi$ na drugim płacie Riemanna.



Rys. 6.3 Widok z boku dwóch płatów Riemanna funkcji $w(z) = \sqrt{z}$ patrząc wzdłuż osi rzeczywistej w kierunku początku układu.

W powyższej dyskusji moglibyśmy oczywiście upierać się, że θ będące argumentem z ma przedział zmienności wynoszący tylko 2π radianów. Moglibyśmy wtedy powiedzieć, że

$$w_1(z) \equiv \sqrt{r}\, e^{i\theta/2}, \quad 0 \leqslant \theta \leqslant 2\pi$$

definiuje pewną jednowartościową funkcję, analityczną wszędzie w zespolonej płaszczyźnie z z wyjątkiem punktów leżących na dodatniej osi rzeczywistej (włącznie z punktem $z = 0$) i, że

$$w_2(z) = \sqrt{r}\, e^{i(\theta+2\pi)/2} = -\sqrt{r}\, e^{i\theta/2}, \quad 0 \leqslant \theta < 2\pi$$

także definiuje pewną funkcję. Obie funkcje $w_1(z)$ i $w_2(z)$ spełniają równość $w_1^2 = w_2^2 = z$ i są nazywane *jednowartościowymi gałęziami* $\sqrt{z}$. Jest oczywiste, że jeżeli zdefiniujemy

$$w_3(z) = \sqrt{r}\, e^{i(\theta+4\pi)/2}, \quad 0 \leqslant \theta < 2\pi,$$

to będziemy mieli $w_3(z) = w_1(z)$; w ten więc sposób nie uzyskamy nowej gałęzi. Pozostawiamy czytelnikowi jako ćwiczenie pokazanie, że można zdefiniować trzy jednowartościowe gałęzie funkcji $w(z) = \sqrt[3]{z}$ i że jeżeli chce się w tym przypadku zdefiniować $w(z)$ jako jednowartościową funkcję analityczną wszędzie z wyjątkiem punktu $z = 0$, to potrzebna jest trzypłatowa powierzchnia Riemanna.

Należy zwrócić uwagę, że wybór osi rzeczywistej jako cięcia dla funkcji $w(z) = \sqrt{z}$ był całkowicie dowolny. Dowolna inna półprosta, powiedzmy $\theta = \theta_0$, byłaby równie dobra. Jedyną rzeczą, która nie jest dowolna, jest wybór punktu $z = 0$ jako punktu rozgałęzienia; $z = 0$ jest *prawdziwym punktem osobliwym* funkcji $w(z) = \sqrt{z}$ i tego nie można zmienić.

Jednakże w przypadku zdefiniowanych powyżej funkcji $w_1(z)$ i $w_2(z)$ *półprosta osobliwa* $\theta = 0$ jest, z wyjątkiem $z = 0$, linią osobliwości „stworzonych przez człowieka". Równie dobrze, moglibyśmy wybrać półprostą $\theta = \theta_0$ jako linię osobliwości. Moglibyśmy np. zdefiniować

$$w_1(z) = \sqrt{r}\,e^{i\theta/2} \qquad \theta_0 \leqslant \theta < \theta_0 + 2\pi$$

i podobnie

$$w_2(z) = \sqrt{r}\,e^{i(\theta+2\pi)/2} = -\sqrt{r}\,e^{i\theta/2}$$
$$\theta_0 \leqslant \theta < \theta_0 + 2\pi.$$

Jeżeli chcemy mieć do czynienia z jednowartościową funkcją analityczną wszędzie z wyjątkiem $z = 0$, to możemy skonstruować dwupłatową powierzchnię Riemanna przeciętą i złączoną wzdłuż linii $\theta = \theta_0$. Na krawędzi cięcia przeciwnej do ruchu wskazówek zegara $\sqrt{z} = \sqrt{r}\,e^{i\theta_0/2}$. Po przebyciu łuku 2π radianów nie powracamy do tej wartości, ale do wartości $-\sqrt{r}\,e^{i\theta_0/2}$ i przechodzimy na drugi płat. Zauważcie, że w tym przypadku pewne wartości $w(z) = \sqrt{z}$, które były na pierwszym płacie Riemanna, gdy cięcie biegło wzdłuż $\theta = 0$, znajdują się teraz na drugim płacie Riemanna i na odwrót. Dowodzi to, że konstrukcja Riemanna jest jedynie sposobem jednowartościowego zapisu funkcji. Rozróżnienia między pierwszym i drugim płatem są kwestią umowy. W rzeczywistości nie powinno stanowić trudności dla czytelnika wyobrażenie sobie, że jakakolwiek rozsądna krzywa biegnąca od środka układu współrzędnych do nieskończoności mogłaby stanowić dopuszczalne cięcie, wzdłuż którego dwa płaty Riemanna funkcji $w(z) = \sqrt{z}$ mogą być połączone.

Zanim porzucimy ten przykład, spróbujmy najpierw zastanowić się nad rozumowaniem, które na pierwszy rzut oka wydaje się zaprzeczać temu, o czym właśnie mówiliśmy. Rozważmy dowolny punkt $x_0 \neq 0$ na dodatniej osi rzeczywistej. Wyobrażamy sobie, że istnieje pewne otoczenie punktu x_0, w którym możemy napisać $z = x_0 + \varrho$, gdzie ϱ jest pewną liczbą zespoloną, i definiujemy zatem $\sqrt{z}$ za pomocą szeregu potęgowego

$$\sqrt{z} \equiv \sqrt{x_0}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{\varrho}{x_0} - \frac{1}{8}\frac{\varrho^2}{x_0^2} + \ldots\right),$$

jeżeli tylko szereg jest zbieżny (zobaczymy później, że szereg ten jest zbieżny, jeżeli tylko $|\varrho| < x_0$). Jest to funkcja jednowartościowa definiująca $\sqrt{z}$ w sposób ciągły w jakimś obszarze zawierającym część dodatniej osi rzeczywistej. Jednakże definicji tej nie można zastosować do całej płaszczyzny zespolonej, ponieważ szereg powyższy nie wszędzie jest zbieżny. Okazuje się, że nie jest możliwe rozszerzenie (lub „przedłużenie") tej funkcji na wszystkie punkty płaszczyzny z w ten sposób, aby $\sqrt{z}$ był jednowartościowy i analityczny. Powrócimy do tego zagadnienia, gdy będziemy dyskutować w dalszej części tego rozdziału zasady przedłużania analitycznego. Fakt, że funkcja zdefiniowana za pomocą szeregu jest ciągła przy przechodzeniu przez dodatnią oś rzeczywistą, nie jest w sprzeczności z umieszczeniem cięcia wzdłuż tej osi, jak to pierwotnie zrobiliśmy, ponieważ (co zostało pokazane powyżej) cięcie może być umieszczone gdziekolwiek indziej, o ile tylko zaczyna się w $z = 0$. W szczególności cięcie można wybrać w ten sposób, że leży ono całkowicie poza obszarem zbieżności szeregu użytego do definicji $\sqrt{z}$ (np. można wybrać cięcie wzdłuż ujemnej osi rzeczywistej). Na zakończenie zwrócimy uwagę, że moglibyśmy z powodzeniem zde-

finiować w ten sposób funkcję e^z. Funkcja ta ma dla rzeczywistych wartości x szereg potęgowy zbieżny wszędzie i nietrudno uwierzyć, że zespolony szereg potęgowy z tymi samymi współczynnikami $(1/n!)$ będzie zbieżny wszędzie w płaszczyźnie zespolonej.

Jako inny przykład wielowartościowej funkcji rozważymy logarytm. Używając ponownie $z = re^{i\theta}$ zdefiniujemy

$$\log z \equiv \ln r + i\theta,$$

gdzie ln oznacza zwykły logarytm naturalny dodatniej liczby rzeczywistej. Zauważmy, że

$$e^{\log z} = e^{\ln r + i\theta} = e^{\ln r} e^{i\theta} = re^{i\theta} = z$$

oraz

$$\log(z_1 z_2) = \ln(r_1 r_2) + i(\theta_1 + \theta_2) = \ln r_1 + i\theta_1 + \ln r_2 + i\theta_2 = \log z_1 + \log z_2.$$

Tak więc logarytm posiada główne własności, których można byłoby się spodziewać przez analogię z przypadkiem zmiennej rzeczywistej. W przypadku logarytmu opisane powyżej trudności wynikające z wielowartościowości są poważniejsze, ponieważ bez względu na to, jak wiele razy okrążamy środek układu współrzędnych zaczynając, powiedzmy, z jakiegoś punktu na dodatniej osi rzeczywistej, nigdy nie powrócimy do pierwotnej wartości logarytmu. Logarytm wzrasta o $2\pi i$ przy każdym obiegu (lub zmniejsza się o $2\pi i$, jeżeli poruszamy się w kierunku malejącego θ). Wobec tego, aby uczynić $\log z$ funkcją jednowartościową, potrzebna jest nieskończona liczba płatów Riemanna, z których każdy połączony jest z płatem poniżej poprzez cięcie wzdłuż dodatniej osi rzeczywistej. W wyniku takiej konstrukcji $\log z$ jest analityczny wszędzie z wyjątkiem $z = 0$; punktowi temu przypisujemy wartość $\log(z = 0) = -\infty$ na wszystkich płatach. Możemy także utworzyć nieskończoną liczbę jednowartościowych gałęzi logarytmu:

$$w_n(z) = \ln r + i\theta + 2\pi n i, \quad 0 \leqslant \theta < 2\pi,$$

gdzie $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ i $w_n(z)$ jest jednowartościową funkcją analityczną wszędzie z wyjątkiem $z = 0$ i punktów leżących na dodatniej osi rzeczywistej. Zupełnie tak jak poprzednio

$$e^{w_n(z)} = z,$$

ale

$$w_n(z_1 z_2) = w_n(z_1) + w_n(z_2) - 2\pi n i.$$

Gałąź

$$w_0(z) = \ln r + i\theta, \quad 0 \leqslant \theta < 2\pi$$

nazywana jest *wartością główną* lub *główną gałęzią logarytmu* i bywa zwykle oznaczana $\mathrm{Log}\, z$. Mamy

$$e^{\mathrm{Log}\, z} = z$$

$$\mathrm{Log}(z_1 z_2) = \mathrm{Log}\, z_1 + \mathrm{Log}\, z_2.$$

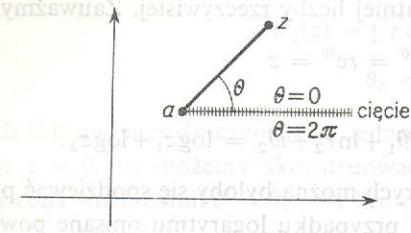
Tak jak poprzednio wybór półprostej $\theta = 0$ jako linii osobliwości jest całkowicie arbitralny.

Na podstawie poprzednich przykładów przejście do bardziej skomplikowanych przypadków jest całkiem proste, na przykład funkcja

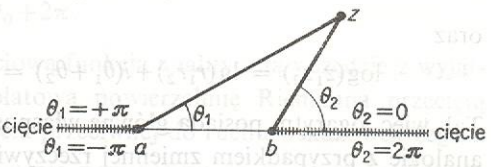
$$w(z) = \sqrt{z - a}$$

jest jednowartościową funkcją na dwupłatowej powierzchni Riemanna z cięciem od a do nieskończoności. Punkt $z = a$ jest punktem rozgałęzienia; jeżeli wybierzemy cięcie równolegle do osi rzeczywistej, uzyskujemy obrazek przedstawiony na rys. 6.4. Używając oznaczeń z rys. 6.4 możemy zatem zdefiniować

$$w(z) \equiv |z-a|^{1/2} e^{i\theta/2}.$$



Rys. 6.4 Możliwy przebieg cięcia dla funkcji $w(z) = \sqrt{z-a}$.



Rys. 6.5 Możliwy przebieg cięć dla funkcji $w(z) = \sqrt{(z-a)(z-b)}$.

Funkcja

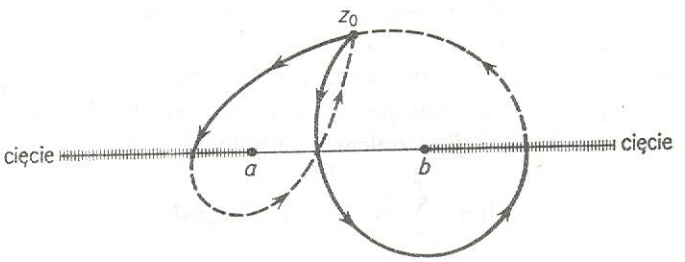
$$w(z) = \sqrt{(z-a)(z-b)}$$

stanowi przypadek wymagający głębszego zastanowienia się. W celu uproszczenia geometrycznych rozważań ograniczymy się do szczególnej sytuacji, kiedy a i b są rzeczywiste. Najbardziej oczywistym sposobem postępowania jest po prostu wprowadzenie dwóch cięć z punktów rozgałęzienia $z = a$ i $z = b$ tak, jak pokazano na rys. 6.5. Takie proste kierunki cięć zostały wybrane ze względu na wygodę rysunku. Cięcie lewostronne odpowiada temu, co mielibyśmy dla funkcji $\sqrt{z-a}$, cięcie prawostronne temu, co mielibyśmy dla $\sqrt{z-b}$. Przyjmujemy tutaj, że θ_1 zaczyna się od wartości $-\pi$ na „spodzie" cięcia i dochodzimy do wartości $+\pi$ na „wierzchu" cięcia. Przy wartości π przechodzimy na drugi płat i θ_1 rośnie dalej do wartości 3π, dla której powracamy na pierwszy płat. Jeżeli popatrzymy wzdłuż ujemnej osi rzeczywistej w kierunku początku układu, oba płaty będą tam połączone tak, jak pokazuje rys. 6.3. Podobnie dla prawostronnego cięcia zaczynamy na „wierzchu" cięcia od $\theta_2 = 0$; poruszając się przeciwnie do ruchu wskazówek zegara przechodzimy na drugi płat przy $\theta_2 = 2\pi$ i wreszcie powracamy na pierwszy płat, gdy $\theta_2 = 4\pi$. Wzdłuż dodatniej osi rzeczywistej oba płaty są połączone tak, jak pokazuje rys. 6.3. Stosując powyższą umowę definiujemy

$$w(z) \equiv |z-a|^{1/2}|z-b|^{1/2} e^{i\theta_1/2} e^{i\theta_2/2}.$$

Jak pokazuje rys. 6.6, dowolny punkt z_0 na drugim płacie może być osiągnięty z punktu z_0 na pierwszym płacie zarówno drogą idącą przez lewostronne cięcie, jak i prawostronne cięcie. Te dwie możliwości różnią się tylko w ten sposób, że w pierwszym przypadku θ_1 wzrasta o 2π, podczas kiedy w drugim przypadku θ_2 wzrasta o 2π. W obu przypadkach wartość $w(z)$ jest taka sama (równa wartości funkcji w odpowiednim punkcie na pierwszym płacie z minusem), jak to musi mieć miejsce dla funkcji jednowartościowej. Dzięki powyższej konstrukcji $w(z) = \sqrt{(z-a)(z-b)}$ staje się jednowartościową funkcją analityczną wszędzie z wyjątkiem punktów $z = a$ i $z = b$. Zauważmy, że jeżeli w powyższym przy-

kładzie zmienimy o 2π zarówno θ_1 i θ_2, zaczynając przykładowo z „wierzchu" prawostronnego cięcia, to przejdziemy na drugi płat przez lewostronne cięcie i powrócimy do naszego pierwotnego punktu na pierwszym płacie przez prawostronne cięcie. Sugeruje to, że równie dobrze mogłoby być możliwe przecięcie i połączenie obu płatów wzdłuż osi rzeczywistej od a do b. Dla czytelnika może być interesujące pokazanie, że ma to rzeczywiście miejsce.



Rys. 6.6 Dwie różne drogi, po których można od punktu $z = z_0$ na pierwszym płacie dotrzeć do punktu $z = z_0$ na drugim płacie. Rozpatrywaną funkcją jest $w(z) = \sqrt{(z-a)(z-b)}$.

Posługując się wprowadzonymi powyżej pojęciami możemy także uzyskać sensowne wyrażenia dla odwrotnych funkcji trygonometrycznych. Rozważmy przykładowo

$$w = \operatorname{arctg} z.$$

Zapisując to jako

$$z = \operatorname{tg} w = \frac{1}{i}\,\frac{e^{iw}-e^{-iw}}{e^{iw}+e^{-iw}},$$

otrzymujemy łatwo

$$(1-iz)e^{iw} = (1+iz)e^{-iw}$$

i stąd

$$e^{2iw} = \frac{1+iz}{1-iz}.$$

Biorąc logarytm obu stron znajdujemy

$$w = \frac{1}{2i}\log\left(\frac{1+iz}{1-iz}\right) = \frac{1}{2i}\log\left(\frac{i-z}{i+z}\right),$$

a więc

$$\operatorname{arctg} z = \frac{i}{2}\log\left(\frac{i+z}{i-z}\right).$$

Zupełnie jak w przypadku logarytmu, możemy mówić o jednowartościowych gałęziach $\operatorname{arctg} z$ odpowiadających jednowartościowym gałęziom $\log z$. Główna gałąź odwrotnego tangensa zdefiniowana jest, jak można się spodziewać, w następujący sposób

$$\operatorname{Arctg} z = \frac{i}{2}[\operatorname{Log}(i+z) - \operatorname{Log}(i-z)].$$

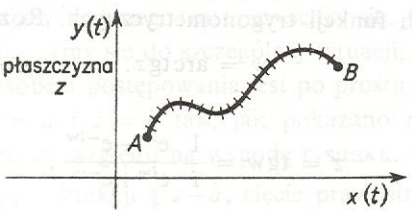
Podobne rozważania stosują się do funkcji $\arcsin z$ i $\arccos z$.

Przechodzimy teraz do całkowania funkcji zespolonych, tego działu teorii, który jest szczególnie interesujący zarówno dla matematyków, jak i fizyków. Ze względu na odpowiedniość między liczbami zespolonymi i dwuwymiarowymi wektorami spodziewamy się, że będziemy mogli zdefiniować całkę krzywoliniową funkcji zespolonej wzdłuż jakiejś krzywej w płaszczyźnie z.

Niech t będzie rzeczywistym parametrem zmieniającym się od t_A do t_B i niech $z = z(t)$ będzie jakąś krzywą, lub konturem C, w płaszczyźnie zespolonej o końcach $A = z(t_A)$ $B = z(t_B)$ (patrz rys. 6.7). Zaznaczamy teraz pewną liczbę punktów t_i pomiędzy t_A i t_B i przybliżamy krzywą przez szereg linii prostych prowadzonych od każdego $z(t_i)$ do $z(t_{i+1})$. W celu zdefiniowania całki funkcji w zmiennej zespolonej tworzymy wielkość

$$\lim_{|\Delta z_i|\to 0} \sum_{i=0}^{n} w(z_i)\Delta z_i \equiv \int_C w(z)\,dz,$$

gdzie $\Delta z_i = z(t_{i+1}) - z(t_i)$ oraz $w(z_i)$ jest wartością funkcji w dowolnym punkcie z_i leżącym na C pomiędzy $z(t_{i+1})$ i $z(t_i)$. Suma obliczana jest w granicy dowolnie drobnego podziału odcinka, który przebiega rzeczywisty parametr t generując kontur od A do B; to znaczy dla $n \to \infty$ lub, co oznacza to samo, w granicy dowolnie małych Δz_i dla wszystkich i.



Rys. 6.7

Pisząc $w(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ i $dz = dx + i\,dy$ mamy

$$\int_C w(z)\,dz = \int_C (u\,dx - v\,dy) + i \int_C (u\,dy + v\,dx). \tag{6.10}$$

Możemy to zapisać również w postaci parametrycznej, wtedy

$$dx = \frac{dx}{dt}\,dt, \qquad dy = \frac{dy}{dt}\,dt$$

i zatem

$$\int_C w(z)\,dz = \int_{t_A}^{t_B} \left(u\frac{dx}{dt} - v\frac{dy}{dt}\right) dt + i \int_{t_A}^{t_B} \left(u\frac{dy}{dt} + v\frac{dx}{dt}\right) dt.$$

Dla danego konturu C biegnącego od A do B definiujemy kontur przeciwny, oznaczony przez $-C$, który będzie tą samą krzywą, przebieganą jednak od B do A. Całka z $w(z)$ wzdłuż $-C$ jest oczywiście dana powyższym równaniem, ale z t_A i t_B zamienionymi miejscami, zatem

$$\int_C = -\int_{-C}. \tag{6.11}$$

Można także pokazać, że

$$\int_{C_1} + \int_{C_2} = \int_{C_1+C_2}. \tag{6.12}$$

Jeżeli C jest krzywą zamkniętą nie przecinającą się, będziemy zawsze interpretować $\oint_C$ jako całkę po zamkniętym konturze C przebieganym w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara.

A oto jeszcze inna własność całki, którą będziemy bardzo często wykorzystywać:

$$\left|\int_C f(z)dz\right| \leqslant \int_C |f(z)|\,|dz| \leqslant ML, \tag{6.13}$$

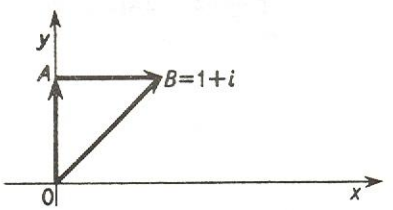
gdzie M jest maksymalną wartością $|f(z)|$ na konturze C, a L jest długością konturu. Pierwsza nierówność występująca w (6.13) jest uogólnieniem nierówności trójkąta $|z_1+z_2| \leqslant |z_1|+|z_2|$. Obie nierówności wyprowadzane są dokładnie tak samo, jak w przypadku rzeczywistym.

Zanim przedstawimy ogólne twierdzenia o całkowaniu funkcji zmiennej zespolonej, wyliczymy przykładowo dwie całki posługując się jedynie otrzymanymi dotąd rezultatami. Najpierw obliczymy całkę

$$I = \int_C \sin z\,dz$$

po dwóch drogach pokazanych na rys. 6.8: (1) $C_1 = OB$. (2) $C_2 = OA+AB$. Ponieważ

$$\sin z = \cosh y \sin x + i \sinh y \cos x,$$



Rys. 6.8

więc posługując się równaniem (6.10) mamy

$$I \equiv \int_C \sin z\,dz = \int_C [\cosh y \sin x\,dx - \sinh y \cos x\,dy] + i \int_C [\cosh y \sin x\,dy + \sinh y \cos x\,dx].$$

Na krzywej C_1 wartość $x = y$, zatem

$$I_1 = (1+i)\int_0^1 \cosh x \sin x\,dx - (1-i)\int_0^1 \sinh x \cos x\,dx = (1-\cosh 1 \cos 1) + i(\sinh 1 \sin 1).$$

Obliczymy teraz I wzdłuż C_2. Wzdłuż drogi z O do A $x = 0$ i $dx = 0$, a wzdłuż drogi z A do B $y = 1$ i $dy = 0$, zatem

$$I_2 = \int_{C_2} \sin z\,dz = -\int_0^1 \sinh y\,dy + \int_0^1 \cosh 1 \sin x\,dx +$$

$$+ i\int_0^1 \sinh 1 \cos x\,dx = 1 - \cosh 1 \cos 1 + i \sinh 1 \sin 1 = I_1.$$

Całka z O do B jest taka sama dla obu dróg całkowania. W rzeczywistości, jak udowodnimy później, całka jest taka sama dla jakiejkolwiek drogi — zależy tylko od punktów wyznaczających początek i koniec konturu. Widzimy również, że całka po zamkniętym konturze składającym się z C_1 i $-C_2$ (tzn. C_2 przebieganego w kierunku odwrotnym) jest zerem. Pokażemy, że wynik ten zachowuje się dla każdej funkcji, która jest analityczna wewnątrz zamkniętego konturu i na nim samym.

Zauważmy, że jeżeli wyliczymy formalnie, zgodnie z regułami analizy rzeczywistej, to mamy

$$I_1 = I_2 = \int_0^{1+i} \sin z\,dz = -\cos z|_0^{1+i} = 1 - \cosh 1 \cos 1 + i \sinh 1 \sin 1,$$

gdzie posłużyliśmy się równaniem (6.9). W dalszym ciągu udowodnimy także to „podstawowe twierdzenie analizy funkcji zespolonych", które jest słuszne w każdym obszarze, w jakim funkcja podcałkowa jest analityczna.

Jako drugi przykład, spróbujmy scałkować funkcję $f(z) = z^*$ po kole jednostkowym o środku w początku układu, obiegając kontur w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara. Wartości z na tej krzywej dane są równaniem $z = e^{i\theta}$, gdzie θ zmienia się od 0 do 2π, zatem

$$I = \oint_C z^* dz = \int_0^{2\pi} e^{-i\theta} i e^{i\theta} d\theta = 2\pi i.$$

Ponieważ $zz^* = 1$ na C, otrzymujemy także rezultat

$$\oint_C \frac{1}{z} dz = 2\pi i.$$

Żadna z tych całek po zamkniętym konturze nie jest zerem. Jak zobaczymy poniżej, wynika to z faktu, że z^* nie jest nigdzie analityczna, a zatem nie jest analityczna wewnątrz konturu C i na nim, a z^{-1} nie jest analityczna w punkcie $z = 0$, który leży wewnątrz C.

Oba przykłady wyjaśnia

Twierdzenie Cauchy'ego. Jeżeli funkcja $f(z)$ jest analityczna na jakimś zamkniętym konturze C i wewnątrz niego i $f'(z)$ jest ciągła na tym obszarze, to

$$\oint_C f(z) dz = 0.$$

Podamy dwa dowody tego twierdzenia:

Dowód 1.

$$\oint_C f(z) dz = \oint_C (u dx - v dy) + i \oint_C (u dy + v dx).$$

W celu obliczenia dwóch całek krzywoliniowych stojących po prawej stronie używamy twierdzenia Greena o całkach krzywoliniowych. Stwierdza ono, że jeżeli P i Q są ciągłymi funkcjami na zamkniętym konturze C i wewnątrz niego, to

$$\oint_C (P dx + Q dy) = \iint_R \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) dx\,dy,$$

gdzie R jest powierzchnią ograniczoną przez C. Z założenia $f'(z)$ jest ciągłe, pierwsze pochodne cząstkowe u i v są więc także ciągłe. Z twierdzenia Greena wynika zatem, że

$$\oint_C (u\,dx - v\,dy) + i \oint_C (u\,dy + v\,dx) =$$

$$= \iint_R \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) dx\,dy + i \iint_R \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}\right) dx\,dy.$$

Ponieważ równania Cauchy'ego–Riemanna są spełnione, wszystkie powyższe funkcje podcałkowe znikają. Wobec tego

$$\oint_C f(z)\,dz = 0.$$

c.b.d.o.

Dowód 2. Twierdzenie Cauchy'ego można również dowieść posługując się twierdzeniem Stokesa, które jest ściśle związane z twierdzeniem Greena, a jest być może lepiej znane. Piszemy

$$\oint_C f(z)\,dz = \oint_C \mathbf{F}\cdot d\mathbf{l} + i \oint_C \mathbf{G}\cdot d\mathbf{l},$$

gdzie

$$\mathbf{F} = u\mathbf{i} - v\mathbf{j}, \quad \mathbf{G} = v\mathbf{i} + u\mathbf{j} \quad \text{i} \quad d\mathbf{l} = dx\mathbf{i} + dy\mathbf{j}.$$

Niech S będzie obszarem składającym się z konturu C i jego wnętrza. Ponieważ warunki Cauchy'ego–Riemanna spełnione są na S, wynika stąd, że $(\nabla \times \mathbf{F})_z = 0$ i $(\nabla \times \mathbf{G})_z = 0$ na obszarze S, gdzie z oznacza k-tą składową rotacji w kierunku $\mathbf{k}$, np.

$$(\nabla \times \mathbf{F})_z = \frac{\partial(-v)}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} = 0$$

dzięki równaniom Cauchy'ego–Riemanna. Posługując się teraz twierdzeniem Stokesa, którego ważność zależy od ciągłości czterech pierwszych pochodnych cząstkowych u i v, mamy

$$\oint_C f(z)\,dz = \oint_C \mathbf{F}\cdot d\mathbf{l} + i \oint_C \mathbf{G}\cdot d\mathbf{l} = \int_S (\nabla \times \mathbf{F})\cdot d\mathbf{S} + i \int_S (\nabla \times \mathbf{G})\cdot d\mathbf{S} =$$

$$= \int_S (\nabla \times \mathbf{F})_z\,dS + i \int_S (\nabla \times \mathbf{G})_z\,dS = 0,$$

gdzie $d\mathbf{S} = \mathbf{k}\,dS$,

c.b.d.o.

Możliwe jest udowodnienie twierdzenia Cauchy'ego bez zakładania ciągłości $f'(z)$. Wynika to z faktu, że każda funkcja analityczna w jakimś obszarze ma tam z konieczności ciągłą pochodną. W rzeczywistości, jak udowodnimy, funkcja analityczna ma pochodne dowolnego rzędu i wszystkie te pochodne są ciągłe, przy czym ciągłość n-tej pochodnej jest konsekwencją istnienia pochodnej rzędu $n+1$. Jednakże ten rezultat dotyczący wyższych pochodnych będziemy mogli otrzymać dopiero potem, jak pokażemy, że ciągłość $f'(z)$ nie jest konieczna do udowodnienia twierdzenia Cauchy'ego.

Złagodzenie lub osłabienie założeń, przy których

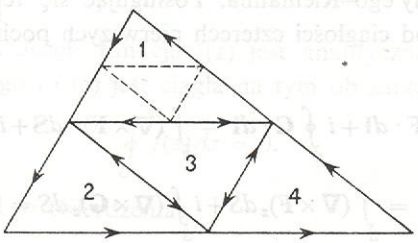
$$\oint_C f(z)dz = 0,$$

ma zatem zasadnicze znaczenie, w rzeczywistości jest to centralny punkt teorii funkcji analitycznych. Niektórzy autorzy (nigdy matematycy) definiują funkcję analityczną jako funkcję różniczkowalną o ciągłej pochodnej. Centralny rezultat teorii wynika wtedy w sposób trywialny, jak widzieliśmy z poprzedniego twierdzenia. Jest to jednak matematyczne oszustwo kosmicznych rozmiarów. Goursat pierwszy udowodnił, że warunek, aby $f'(z)$ było ciągłe, jest zbyteczny. Właśnie rezultat Goursata jest tym, co odróżnia w istotny sposób teorię całkowania funkcji zmiennej zespolonej od teorii całek krzywoliniowych na płaszczyźnie rzeczywistej. Chociaż twierdzenie to nazywane jest często twierdzeniem Cauchy'ego, „część Goursata" daje mu rzeczywistej matematycznej mocy. Dowodząc to twierdzenie będziemy opierać się na rozumowaniu zaproponowanym przez Franklina i Knoppa.

Twierdzenie Cauchy'ego–Goursata. Jeżeli funkcja $f(z)$ jest analityczna na zamkniętym konturze C i wewnątrz niego, to $\oint_C f(z)dz = 0$.

Dowód. Udowodnimy to twierdzenie najpierw dla obszaru trójkątnego; łatwo je następnie rozszerzyć na dowolny obszar. Niech R oznacza zamknięty obszar składający się z punktów leżących wewnątrz i na brzegu trójkąta ograniczonego zamkniętym konturem T o całkowitej długości L. Ponieważ $f(z)$ jest analityczne na R, $f'(z)$ istnieje na R i zatem $f(z)$ jest ciągłe na R. Podzielimy teraz R na mniejsze trójkąty, jak pokazuje rys. 6.9. Każdy mniejszy trójkąt jest podobny do pierwotnego trójkąta, ale jego boki i obwód są o połowę krótsze. Granice małych trójkątów oznaczymy przez $T_i (i = 1, 2, 3, 4)$. Oczywiście

$$\oint_T f(z)dz = \sum_{i=1}^{4} \oint_{T_i} f(z)dz,$$



Rys. 6.9

gdzie wszystkie kontury przebiegane są w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara. Wszystkie trzy boki trójkąta 3 przebiegane są w obu kierunkach i zatem całki wzdłuż tych odcinków znoszą się. Stosując do tego równania nierówność trójkąta otrzymujemy

$$\left|\oint_T f(z)dz\right| \leqslant \sum_{i=1}^{4} \left|\oint_{T_i} f(z)dz\right|.$$

Dowód polega na pokazaniu, że wielkość po lewej stronie jest dowolnie mała.

Niech teraz C_1 oznacza trójkąt, który daje największy wkład do powyższej sumy. Mamy wtedy

$$\left|\oint_T f(z)dz\right| \leqslant 4\left|\oint_{C_1} f(z)dz\right|,$$

gdzie długość $C_1 \equiv L_1 = L/2$. Powtórzymy teraz ten proces na trójkącie ograniczonym przez C_1. To znaczy znajdziemy kontur C_2 ograniczający taki trójkąt wchodzący w skład C_1, że

$$\left|\oint_{C_1} f(z)dz\right| \leqslant 4\left|\oint_{C_2} f(z)dz\right|,$$

gdzie długość $C_2 \equiv L_2 = L/2^2$. Jeżeli podział jest powtórzony n razy, otrzymujemy taki szereg trójkątnych konturów C_n, zawartych jeden w drugim, że

$$\left|\oint_T f(z)dz\right| \leqslant 4^n\left|\oint_{C_n} f(z)dz\right|, \tag{6.14}$$

gdzie długość $C_n \equiv L_n = L/2^n$. W celu zakończenia dowodu musimy pokazać, iż

$$\left|\oint_{C_n} f(z)dz\right|$$

maleje z n szybciej niż 4^n wzrasta z n.

Oznaczymy przez R_n zamknięty obszar składający się z C_n i punktów wewnętrznych powstałego przy n-tym podziale trójkąta ograniczonego przez C_n. Jest oczywiste, że każdy punkt R_{n+1} należy do R_n i w miarę jak $n \to \infty$, ten ciąg zawartych jeden w drugim domkniętych zbiorów zbiega się do jakiegoś pojedynczego punktu z_0, który zawiera się w każdym R_n i także w R. (Jeżeli R jest kontynentem afrykańskim i wybieramy R_n jako ten obszar, który zawiera największego lwa w Afryce, mamy algorytm złapania wielkiego lwa — po prostu budujemy klatkę wokół z_0.) Ponieważ $f'(z)$ istnieje, z definicji wynika, że dla każdego ε istnieje takie δ, że jeżeli tylko $0 < |z-z_0| < \delta$, to

$$\left|\frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0} - f'(z_0)\right| \leqslant \varepsilon.$$

Rozważmy teraz funkcję $g(z)$ zdefiniowaną przez

$$g(z) = \begin{cases} \dfrac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0} - f'(z_0) & \text{dla} \quad z \neq z_0, \\ 0 & \text{dla} \quad z = z_0. \end{cases}$$

Zauważmy, że $|g(z)| \leqslant \varepsilon$, jeżeli $|z-z_0| < \delta$, to $g(z)$ jest zatem ciągłe w $z = z_0$.

Funkcja $f(z)$ jest więc dana dla wszystkich punktów z należących do R przez

$$f(z) = f(z_0)+(z-z_0)f'(z_0)+(z-z_0)g(z).$$

Użyjemy tego związku do obliczenia $\oint_{C_n} f(z)dz$. Dwa pierwsze człony są całkowitymi funkcjami z (z_0 jest stałe) o pochodnych wszędzie ciągłych. Możemy zatem zastosować wcześniejszą wersję twierdzenia Cauchy'ego i stwierdzimy, że

$$\oint_{C_i} [f(z_0)+(z-z_0)f'(z_0)]dz = 0$$

dla wszystkich i, zatem

$$\oint_{C_n} f(z)dz = \oint_{C_n} (z-z_0)\,g(z)\,dz.$$

Dokonujemy teraz wystarczająco wielu podziałów (tzn. wybieramy n dostatecznie duże) tak, aby $2^n > L/\delta$, wtedy $L_n = L/2^n < \delta$. Ponadto dla każdego punktu z na C_n wartość $|z-z_0| < L_n < \delta$, ponieważ z_0 leży wewnątrz R_n i odległość od dowolnego punktu wewnątrz do dowolnego punktu na obwodzie trójkąta jest oczywiście mniejsza niż obwód tego trójkąta; zatem dla $|z-z_0| < \delta$ i $|g(z)| < \varepsilon$ wynika, że $|(z-z_0)g(z)| \leqslant L_n\varepsilon$. Stąd mamy, iż

$$\left|\oint_{C_n} f(z)dz\right| = \left|\oint_{C_n} (z-z_0)\,g(z)dz\right| \leqslant L_n^2\varepsilon = \varepsilon(L/2^n)^2 = \varepsilon L^2/4^n,$$

przy czym skorzystaliśmy z równania (6.13). Z równania (6.14) wynika teraz, że

$$\left|\oint_T f(z)dz\right| \leqslant \varepsilon L^2.$$

Ponieważ L jest ustalonym skończonym obwodem trójkątnego obszaru R, a ε jest dowolne, możemy uczynić wielkość εL^2 mniejszą od jakiejkolwiek zadanej uprzednio liczby ε', Wobec tego

$$\left|\oint_T f(z)dz\right| = 0 \quad \text{i stąd} \quad \oint_T f(z)dz = 0.$$

Dowodzi to twierdzenia Cauchy'ego–Goursata dla trójkątnych konturów.

Nie będziemy podawać formalnego rozszerzenia tego wyniku na przypadek dowolnego obszaru, ponieważ metoda postępowania i wynik są jasne i proste. Mając dowolny kontur C wpisujemy w niego wielokąt. Każdy wielokąt może być rozłożony na sumę trójkątów, wiemy więc, że twierdzenie zachowuje słuszność dla wielokąta o dowolnej liczbie boków. Jest jasne, że różnica

$$\left|\oint_C f(z)dz - \oint_P f(z)dz\right|,$$

gdzie P jest obwodem wielokąta wpisanego w C, może być dowolnie mała, jeżeli wybrać wielokąt z wystarczająco wielką liczbą boków. Dowodzi to twierdzenia Cauchy'ego–Goursata dla obszaru o dowolnym kształcie.

Podczas przeprowadzania dowodu zakładaliśmy milcząco, że obszar R jest obszarem jednospójnym. Oznacza to, że każdy zamknięty kontur zawarty w R obejmuje tylko punkty należące do R. Przypuśćmy jednak, że obszar R ma jeden lub więcej „wyciętych" podobszarów. Byłoby zatem możliwe skonstruowanie krzywych wokół tych „dziur" w taki sposób, że krzywe te leżałyby całkowicie w R, ale zamykałyby wewnątrz punkty nie należące do R. Obszary takie nazywają się *obszarami wielospójnymi*. Twierdzenie Cauchy'ego nie jest słuszne dla dowolnych konturów w obszarach wielospójnych.

6.4. KONSEKWENCJE TWIERDZENIA CAUCHY'EGO

Największy wysiłek jest poza nami; będziemy teraz badać niektóre główne następstwa twierdzenia Cauchy'ego.

Niezależność od drogi

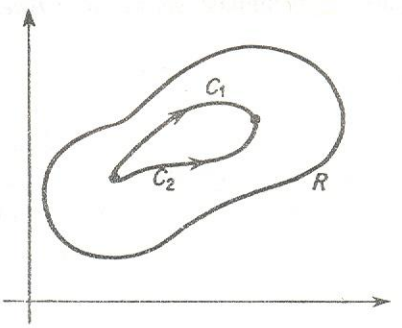
Udowodnimy najpierw, że jeżeli funkcja $f(z)$ jest analityczna w obszarze R, a C_1 i C_2 leżą w R i mają wspólne punkty początkowy i końcowy, to

$$\int_{C_1} f dz = \int_{C_2} f dz.$$

Dowód wynika natychmiast z zastosowania twierdzenia Cauchy'ego do konturu zamkniętego składającego się z C_2 i $-C_1$, jak pokazuje rys. 6.10,

$$\int_{C_2} + \int_{-C_1} = 0 \Rightarrow \int_{C_2} = - \int_{-C_1} = \int_{C_1},$$

przy czym korzysta się z równania (6.11).



Rys. 6.10

Podstawowe twierdzenie analizy

Z naszej dyskusji niezależności całki od drogi wynika, że równanie

$$F(z) \equiv \int_{z_0}^{z} f(z')dz'$$

definiuje jednoznaczną funkcję z, jeżeli $f(z')$ jest analityczna w obszarze zawierającym drogę między z_0 i z.

Twierdzenie. $F(z)$ jest analityczne i $F'(z) = f(z)$.

Dowód:

$$F(z+\Delta z) - F(z) = \int_{z}^{z+\Delta z} f(z')dz',$$

gdzie droga od z do $(z+\Delta z)$ może być przyjęta jako linia prosta. Możemy napisać

$$f(z) = \frac{f(z)}{\Delta z} \int_{z}^{z+\Delta z} dz' = \frac{1}{\Delta z} \int_{z}^{z+\Delta z} f(z)dz'$$

i stąd wynika, że

$$\frac{F(z+\Delta z) - F(z)}{\Delta z} - f(z) = \frac{1}{\Delta z} \int_{z}^{z+\Delta z} [f(z') - f(z)]dz'.$$

Funkcja $f(z)$ jest ciągła, ponieważ jest analityczna; zatem dla wszystkich $\varepsilon > 0$ istnieje takie $\delta > 0$, że jeżeli $|z'-z| < \delta$, to $|f(z)-f(z')| < \varepsilon$. Weźmy teraz $0 < |\Delta z| < \delta$. Wtedy mamy

$$\left| \frac{F(z+\Delta z)-F(z)}{\Delta z} - f(z) \right| < \varepsilon \frac{1}{|\Delta z|} \int_z^{z+\Delta z} |dz'| = \varepsilon.$$

To znaczy, że

$$F'(z) \equiv \lim_{\Delta z \to 0} \frac{F(z+\Delta z)-F(z)}{\Delta z} = f(z).$$

Funkcja $F(z)$ jest zatem analityczna i jej pochodną jest $f(z)$.

Zatem całka $F(z)$ z funkcji analitycznej $f(z)$ jest analityczną funkcją górnej granicy całki, o ile droga całkowania zawarta jest w obszarze R, w którym funkcja podcałkowa jest analityczna. Z powyższego wynika natychmiast *podstawowe twierdzenie rachunku całkowego*

$$\int_a^b f(z)\,dz = \int_{z_0}^b f(z)\,dz - \int_{z_0}^a f(z)\,dz = F(b)-F(a),$$

gdzie a i b są punktami z obszaru R i $F'(z) = f(z)$, tzn. $F(z)$ jest funkcją pierwotną $f(z)$. Zauważyliśmy już poprzednio, że ten sposób obliczania całek stosował się w szczególnym przypadku do całki z $\sin z$ od $a = 0$ do $b = 1+i$ (patrz paragraf 6.3).

Całkowy wzór Cauchy'ego

Udowodnimy teraz jedno z najbardziej użytecznych twierdzeń w całej matematycznej fizyce.

Twierdzenie. Jeżeli $f(z)$ jest analityczna wewnątrz jakiejś zamkniętej krzywej C i na tej krzywej, wtedy dla każdego punktu z_0 wewnątrz C

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz. \tag{6.15}$$

Dowód. Narysujmy wewnątrz krzywej C okrąg $\tilde{C}_0$ o promieniu r wokół z_0 i rozważmy krzywą pokazaną na rysunku 6.11. Składa się ona z okręgu $\tilde{C}_0$ i krzywej C połączonych dwoma prostoliniowymi odcinkami L_1 i L_2, które leżą dowolnie blisko siebie. Nazwijmy ten cały kontur C'. Rozważmy teraz

$$\oint_{C'} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = \oint_C \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz + \int_{L_1} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz + \oint_{\tilde{C}_0} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz + \int_{L_2} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz.$$

Wewnątrz C' wyrażenie $f(z)/(z-z_0)$ jest analityczne, a więc z twierdzenia Cauchy'ego-Goursata

$$\oint_{C'} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = 0.$$

Gdy zbliżamy teraz liniowe odcinki L_1 i L_2 dowolnie blisko siebie,

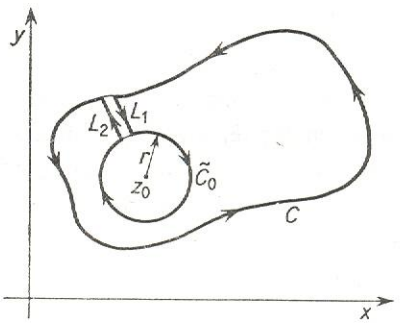
$$\int_{L_1} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz \to -\int_{L_2} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz,$$

ponieważ odcinki te przebiegane są w przeciwnych kierunkach. W granicy mamy więc

$$\oint_{C'} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = 0 = \oint_{C} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz + \oint_{\tilde{C}_0} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz,$$

skąd

$$\oint_{C} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = -\oint_{\tilde{C}_0} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz.$$



Rys. 6.11

Zauważmy w tym miejscu, że $\tilde{C}_0$ rozpatrywane jako osobny kontur, tzn. nie jako część C', jest przebiegane w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara. Zdefiniujmy wobec tego $C_0 = -\tilde{C}_0$, tak że C_0 jest teraz przebiegane w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara (tak jak C). Możemy wtedy napisać

$$\oint_{C} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = \oint_{C_0} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz.$$

Zauważmy, że dla potrzeb powyższych rozważań C_0 nie musi być okręgiem, równie dobrze mógłby to być dowolny kontur zamknięty, leżący całkowicie wewnątrz C i tak samo zorientowany. Ostatnie równanie możemy napisać w postaci

$$\oint_{C} \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = f(z_0)\oint_{C_0} \frac{dz}{z-z_0} + \oint_{C_0} \frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0}\,dz.$$

Skorzystamy teraz z faktu, że C_0 jest okręgiem, pisząc $z-z_0 = re^{i\theta}$ na konturze C_0. Pierwsza całka po prawej stronie wynosi zatem

$$\oint_{C_0} \frac{dz}{z-z_0} = \int_0^{2\pi} \frac{ire^{i\theta}\,d\theta}{re^{i\theta}} = 2\pi i$$

dla wszystkich $r > 0$ wewnątrz C. Wzór Cauchy'ego będzie zatem dowiedziony, jeżeli możemy pokazać, że druga całka znika dla jakiegoś wybranego konturu C_0. Ciągłość $f(z)$ w z_0 mówi nam, że dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje takie δ, że jeżeli $|z-z_0| \leqslant \delta$, to $|f(z)-f(z_0)| < \varepsilon$. Biorąc więc $r = \delta$ spełniamy równanie $|z-z_0| = \delta$, co z kolei pociąga za sobą

$$\left|\oint_{C_0} \frac{f(z)-f(z_0)}{z-z_0}\,dz\right| \leqslant \oint_{C_0} \frac{|f(z)-f(z_0)|}{|z-z_0|}\,|dz| < \frac{\varepsilon}{\delta}(2\pi\delta) = 2\pi\varepsilon.$$

Biorąc więc dostatecznie małe r, ale ciągle większe od 0, można osiągnąć to, że bezwzględna wartość całki będzie mniejsza od dowolnej uprzednio zadanej liczby, skąd

$$\oint_C \frac{f(z)}{z-z_0}\,dz = 2\pi i f(z_0).$$

Wynik ten jest kolejną wskazówką zadziwiająco silnej wewnętrznej struktury funkcji analitycznych. Oznacza on, że jeżeli funkcja jest analityczna na konturze C i wewnątrz niego, to wartość tej funkcji w każdym punkcie wewnątrz C określona jest przez jej wartości na ograniczającej krzywej C. W elektrostatyce znany jest następujący równoważny rezultat: jeżeli rzeczywista funkcja $u(x, y)$ jest ustalona na pewnej krzywej zamkniętej i jeżeli $\nabla^2 u = 0$, to u określone jest wszędzie wewnątrz tej krzywej. Funkcja analityczna zbudowana jest z pary takich funkcji harmonicznych. Moglibyśmy, gdybyśmy chcieli, studiować „teorię funkcji harmonicznych" zamiast „teorii funkcji analitycznych".

Pochodne funkcji analitycznych

Używając całkowej formuły Cauchy'ego możemy udowodnić, że wszystkie pochodne funkcji analitycznej są analityczne. Analogiczne twierdzenie dla zmiennej rzeczywistej nie jest prawdziwe: funkcja, która jest raz różniczkowalna w jakimś obszarze, nie jest koniecznie w tym obszarze różniczkowalna nieskończenie wiele razy. Na przykład funkcja $f(x) = x|x|$ ma pochodną $f'(x) = 2|x|$, która jest wszędzie ciągła, jednakże $f'(x)$ nie jest różniczkowalne w $x = 0$.

Jeżeli zróżniczkujemy obie strony całkowego wzoru Cauchy'ego zmieniając porządek różniczkowania i całkowania, otrzymamy

$$f'(z_0) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^2}\,dz. \tag{6.16}$$

Ponieważ z_0 jest dowolnym punktem wewnątrz C, możemy go przyjąć jako zmienną. Aby dowieść tego wzoru ściśle, zauważmy, że używając całkowego wzoru Cauchy'ego możemy napisać

$$f'(z_0) = \lim_{z_1\to z_0}\frac{f(z_1)-f(z_0)}{z_1-z_0} = \frac{1}{2\pi i}\lim_{z_1\to z_0}\oint_C\left[\frac{f(z)}{z-z_1}-\frac{f(z)}{z-z_0}\right]\frac{dz}{z_1-z_0} =$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\lim_{z_1\to z_0}\oint_C \frac{f(z)}{(z-z_1)(z-z_0)}\,dz,$$

skąd

$$f'(z_0)-\frac{1}{2\pi i}\oint_C\frac{f(z)}{(z-z_0)^2}\,dz = \frac{1}{2\pi i}\lim_{z_1\to z_0}\oint_C f(z)\left[\frac{1}{(z-z_1)(z-z_0)}-\right.$$

$$\left.-\frac{1}{(z-z_0)^2}\right]dz = \frac{1}{2\pi i}\lim_{z_1\to z_0}(z_1-z_0)\oint_C\frac{f(z)}{(z-z_1)(z-z_0)^2}\,dz.$$

Oznaczając $z_1 - z_0 = \varepsilon e^{i\theta}$, mamy

$$\left| f'(z_0) - \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^2}\, dz \right| \leqslant \frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon \oint_C \frac{|f(z)|\,|dz|}{|(z-z_0) - \varepsilon e^{i\theta}|\,|z-z_0|^2}.$$

Zastępując $|z-z_0|$ przez wartość minimalną, powiedzmy μ, a $|f(z)|$ przez wartość maksymalną M, otrzymujemy

$$\left| f'(z_0) - \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^2}\, dz \right| \leqslant \frac{1}{2\pi} \frac{ML}{\mu^2} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\varepsilon}{\mu - \varepsilon} = 0,$$

gdzie L jest długością konturu. Udowodniliśmy w ten sposób równanie (6.16). Powtarzając rozumowanie otrzymujemy

$$f''(z_0) = \frac{2!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^3}\, dz$$

i ogólnie dla n-tej pochodnej

$$f^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^{n+1}}\, dz. \tag{6.17}$$

Wynik ten można łatwo udowodnić przez indukcję w ten sam sposób, w jaki dowodziliśmy równ. (6.16). Funkcja $f(z)$ ma więc wewnątrz C pochodne wszystkich rzędów, więc k-ta pochodna $f(z)$ jest ciągła, bo $(k+1)$-sza pochodna istnieje. Jeżeli zatem napiszemy $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, to pochodne cząstkowe u i v wszystkich rzędów są ciągłe, gdy tylko funkcja f jest analityczna. W naszym wyprowadzeniu równania (6.4) możemy wobec tego opuścić żądanie, aby drugie pochodne cząstkowe były ciągłe; ich ciągłość jest zagwarantowana przez analityczność f.

Twierdzenie Liouville'a. Jeżeli funkcja $f(z)$ jest całkowita i $|f(z)|$ jest ograniczona dla wszystkich wartości z, wtedy funkcja $f(z)$ jest stała.

Dowód. Z całkowej formuły Cauchy'ego znaleźliśmy, że

$$f'(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^2}\, dz.$$

Jeżeli weźmiemy C w formie okręgu $|z-z_0| = r_0$, wtedy

$$|f'(z_0)| \leqslant \left| \frac{1}{2\pi i} \right| \oint_C \frac{|f(z)|}{|(z-z_0)^2|}\, |dz| < \frac{1}{2\pi r_0^2} M 2\pi r_0 = \frac{M}{r_0},$$

gdzie $|f(z)| < M$ wewnątrz i na konturze C_0. Zatem $|f'(z_0)| < M/r_0$ i możemy wziąć r_0 tak duże, jak nam się podoba, ponieważ funkcja $f(z)$ jest całkowita. Biorąc zaś r_0 dostatecznie duże, możemy uczynić $|f'(z_0)| < \varepsilon$ dla każdego uprzedniego zadanego ε. To znaczy $|f'(z_0)| = 0$, co pociąga za sobą $f'(z_0) = 0$ dla wszystkich z_0, skąd $f(z_0) = \text{const}$, c.b.d.o.

Przykład. Funkcje całkowite $\sin z$ i $\cos z$ nie mogą być ograniczone. Z równań (6.8) i (6.9) jest jasne, że nie są.

Podstawowe twierdzenie algebry

To twierdzenie, które trudno dowieść algebraicznie, prosto wynika z twierdzenia Liouville'a i stanowi godny uwagi związek między analizą i algebrą. Przedstawiamy tu dowód ze względu na jego ogromną prostotę i elegancję.

Twierdzenie. Jeżeli $P(z) = a_0 + a_1 z + \ldots + a_m z^m$ jest wielomianem od z pierwszego lub wyższego stopnia, to równanie $P(z) = 0$ ma przynajmniej jeden pierwiastek.

Dowód. Zróbmy założenie przeciwne, mianowicie $P(z) \neq 0$ dla dowolnego z. Wtedy funkcja $1/P(z)$ jest całkowita. Co więcej $|1/P(z)| \to 0$ dla $|z| \to \infty$, a więc $|1/P(z)|$ jest ograniczone dla wszystkich z. Zatem z twierdzenia Liouville'a wynika $1/P(z) = \text{const}$, co stanowi sprzeczność, ponieważ $P(z)$ jest stopnia pierwszego lub wyższego. Stąd $P(z) = 0$ przynajmniej dla jednej wartości z, c.b.d.o.

6.5. TRANSFORMATY HILBERTA I WARTOŚĆ GŁÓWNA CAUCHY'EGO

Przy studiowaniu różnych układów fizycznych zdarza się często, że mamy do czynienia z funkcjami o wartościach zespolonych — współczynniki załamania, podatności elektrycznej i magnetycznej, amplitudy rozpraszania, zawady itp., które mają sens fizyczny tylko wtedy, gdy argument funkcji (który mógłby przykładowo być częstością lub energią) przyjmuje wartości rzeczywiste. W wielu przypadkach jest możliwe uzyskanie, za pomocą praw rządzących układem, informacji o ogólnych własnościach takich właśnie funkcji, gdy argument jest zespolony; na przykład może się okazać, że funkcja jest analityczna w pewnym obszarze płaszczyzny zespolonej. Ponieważ dane eksperymentalne można uzyskać tylko dla rzeczywistych wartości argumentu, interesujące jest sprawdzić, czy możemy użyć ogólnych własności, takich jak analityczność, do wywnioskowania związków między rzeczywistymi wielkościami mającymi bezpośrednie znaczenie fizyczne. Podstawą realizacji takiego programu są *pary transformat Hilberta*, które będziemy badać w tym paragrafie.

Zacznijmy od rozważenia funkcji $f(z)$, która jest analityczna w górnej półpłaszczyźnie i która jest taka, że $|f(z)| \to 0$, gdy $|z| \to \infty$ w górnej półpłaszczyźnie. (Zauważmy, że jedyną funkcją, która jest w stanie spełnić te warunki w całej płaszczyźnie, jest $f \equiv 0$.) Rozważmy teraz całkę po konturze

$$\oint_C \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz,$$

gdzie C jest konturem pokazanym na rysunku 6.12 i α jest rzeczywiste. Z założenia $f(z)$ jest analityczne wewnątrz i na C, tak samo jak wyrażenie $1/(z-\alpha)$, zatem

$$\oint \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz = 0.$$

Podzielmy tę całkę następująco

$$\oint \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz \equiv \int_{-R}^{\alpha-\delta} \frac{f(x)}{x-\alpha}\,dx + \int_{S_\delta} \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz + \int_{\alpha+\delta}^{R} \frac{f(x)}{x-\alpha}\,dx + \int_{S_R} \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz = 0,$$

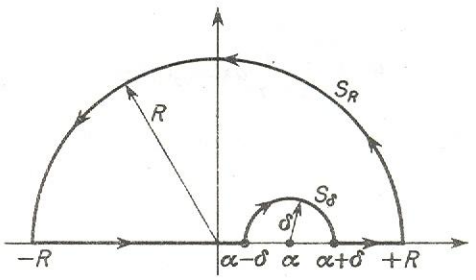
gdzie δ jest promieniem małego półokręgu S_δ centrowanego w $x = \alpha$, a R jest promieniem dużego półokręgu S_R centrowanego w środku układu współrzędnych, tak jak pokazuje

rys. 6.12. Promień δ może być wybrany dowolnie mały, a promień R może być wybrany dowolnie duży. W granicy dowolnie małego δ wielkość

$$\int_{-R}^{\alpha-\delta} \frac{f(x)}{x-\alpha}\,dx + \int_{\alpha+\delta}^{R} \frac{f(x)}{x-\alpha}\,dx$$

nazywana jest *wartością główną całki* z $f(x)/(x-\alpha)$ i jest oznaczana przez

$$P\int_{-R}^{R} \frac{f(x)}{x-\alpha}\,dx.$$



Rys. 6.12 Kontur C używany przy wyprowadzaniu równ. (6.18). Promień R półokręgu S_R można dowolnie powiększyć i promień δ półokręgu S_δ można tak bardzo zmniejszyć, jak sobie tego życzymy.

Poniżej powiemy więcej o tej całce. Wzdłuż dużego półokręgu S_R położymy teraz $z = Re^{i\theta}$ tak, że

$$\int_{S_R} \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz = i\int_0^{\pi} \frac{f(Re^{i\theta})}{Re^{i\theta}-\alpha}\,Re^{i\theta}d\theta$$

i stąd

$$\left|\int_{S_R} \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz\right| \leqslant \frac{R}{|R-\alpha|}\int_0^{\pi} |f(Re^{i\theta})|\,d\theta,$$

ponieważ

$$|Re^{i\theta}-\alpha| = |R^2+\alpha^2-2R\alpha\cos\theta|^{1/2} \geqslant [R^2+\alpha^2-2R\alpha]^{1/2} = |R-\alpha|.$$

Ale dla $R\to\infty$, $|f(z)|\to 0$ i $R/|R-\alpha|\to 1$. Wobec tego całka po półokręgu o promieniu R może być dowolnie mała, o ile wybierzemy wystarczająco duże R. Możemy zatem napisać

$$\lim_{R\to\infty} P\int_{-R}^{R} \frac{f(x)}{x-\alpha}\,dx = -\int_{S_\delta} \frac{f(z)}{z-\alpha}\,dz = -f(\alpha)\int_{S_\delta} \frac{dz}{z-\alpha} - \int_{S_\delta} \frac{f(z)-f(\alpha)}{z-\alpha}\,dz,$$

gdzie dodaliśmy i odjęliśmy człon $\int_{S_\delta} [f(\alpha)/(z-\alpha)]dz$. Kładąc $z-\alpha = \delta e^{i\theta}$ w pierwszej całce po prawej stronie tego równania znajdujemy, że

$$-f(\alpha)\int_{S_\delta} \frac{dz}{z-\alpha} = -if(\alpha)\int_{\pi}^{0} d\theta = i\pi f(\alpha),$$

zatem

$$\lim_{R\to\infty} P\int_{-R}^{R}\frac{f(x)}{x-\alpha}dx = i\pi f(\alpha) - \int_{S_\delta}\frac{f(z)-f(\alpha)}{z-\alpha}dz.$$

Ponieważ $f(z)$ jest ciągłe w $z=\alpha$, argument użyty przy wyprowadzaniu całkowego wzoru Cauchy'ego mówi nam, że ta ostatnia całka po S_δ znika. Stąd

$$\lim_{R\to\infty} P\int_{-R}^{R}\frac{f(x)}{x-\alpha}dx = i\pi f(\alpha).$$

Dla uproszczenia notacji zapiszemy to po prostu jako

$$P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)}{x-\alpha}dx = i\pi f(\alpha), \tag{6.18}$$

gdzie $f(x)$ jest funkcją zespoloną zmiennej rzeczywistej. Możemy tę funkcję zapisać w postaci

$$f(x) \equiv f_R(x) + if_I(x).$$

Przyrównując rzeczywiste i urojone części w równaniu (6.18) otrzymujemy

$$f_R(\alpha) = \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_I(x)}{x-\alpha}dx, \tag{6.19a}$$

$$f_I(\alpha) = -\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_R(x)}{x-\alpha}dx. \tag{6.19b}$$

Każda para funkcji, które spełniają równania (6.19a) i (6.19b), nazywana jest *parą transformat Hilberta*. Zauważmy, iż równania te mówią nam, że jeżeli $f_I(x)\equiv 0$, to $f_R(x)\equiv 0$.

Wartość główna całki jest, jak widzimy, sposobem unikania osobliwości na drodze całkowania: całkuje się do odległości δ od osobliwości, przeskakuje nad osobliwością całkuje od odległości δ za nią. Przepis ten pozwala nadać sens takim całkom jak

$$\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x}.$$

Chcielibyśmy, aby ta całka zerowała się, ponieważ całkujemy nieparzystą funkcję po symetrycznym obszarze. Jeżeli jednak nie postawimy P przed tą całką, osobliwość w $x=0$ powoduje, że całkowanie nie ma sensu. Postępując zgodnie z przepisem na wartość główną całki łatwo możemy powyższą całkę obliczyć. Mamy

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x} = \lim_{\delta\to 0}\left[\int_{-R}^{-\delta}\frac{dx}{x} + \int_{\delta}^{R}\frac{dx}{x}\right].$$

Położmy w pierwszej całce po prawej stronie $x=-y$, wtedy

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x} = \lim_{\delta\to 0}\left[\int_{R}^{\delta}\frac{dy}{y} + \int_{\delta}^{R}\frac{dx}{x}\right].$$

Suma dwóch całek w nawiasie jest zerem, ponieważ

$$\int_{R}^{\delta} = -\int_{\delta}^{R},$$

zatem

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x} = 0.$$

W podobny sposób możemy wyliczyć

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x-a},$$

gdzie $-R < a < R$. Jak powyżej, piszemy

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x-a} = \lim_{\delta\to 0}\left[\int_{-R}^{a-\delta}\frac{dx}{x-a} + \int_{a+\delta}^{R}\frac{dx}{x-a}\right].$$

Kładąc ponownie $x = -y$ w pierwszej całce po prawej stronie znajdujemy, że

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x-a} = \lim_{\delta\to 0}\left[\int_{R}^{\delta-a}\frac{dy}{y+a} + \ln(R-a) - \ln\delta\right] =$$

$$= \lim_{\delta\to 0}[\ln\delta - \ln(R+a) + \ln(R-a) - \ln\delta],$$

zatem

$$P\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x-a} = \ln\left(\frac{R-a}{R+a}\right), \qquad -R < a < R. \tag{6.20}$$

W przypadku całki

$$P\int_{-R}^{k}\frac{f(x)}{x-a}dx$$

równanie (6.20) prowadzi do

$$P\int_{-R}^{R}\frac{f(x)}{x-a}dx = P\int_{-R}^{R}\frac{f(a)}{x-a}dx + P\int_{-R}^{R}\frac{f(x)-f(a)}{x-a}dx$$

lub

$$P\int_{-R}^{R}\frac{f(x)}{x-a}dx = f(a)\ln\left(\frac{R-a}{R+a}\right) + P\int_{-R}^{R}\frac{f(x)-f(a)}{x-a}dx. \tag{6.21}$$

Często będzie się zdarzać, że druga całka po prawej stronie równ. (6.21) nie będzie osobliwa w $x = a$ [np. będzie to miało miejsce, gdy $f(x)$ jest różniczkowalna w $x = a$], tak że symbol P można opuścić. Pozostawiamy czytelnikom uzyskanie równania

$$P\int_{0}^{R}\frac{f(x)}{x^2-a^2}dx = f(a)\frac{1}{2a}\ln\left(\frac{R-a}{R+a}\right) + P\int_{0}^{R}\frac{f(x)-f(a)}{x^2-a^2}dx, \tag{6.22}$$

które jest ściśle związane z równ. (6.21). W celu zilustrowania metody wartości głównej, a także ilustracji użycia równań (6.19a) i (6.19b) rozważmy funkcję $f(z) = 1/(z+i)$. Funkcja ta spełnia wszystkie założenia zrobione przy wyprowadzaniu równań (6.19a) i (6.19b). Widzimy, że

$$f_R(x) = \frac{x}{x^2+1}, \quad f_I(x) = -\frac{1}{x^2+1}.$$

Zbadamy równanie (6.19b). Zapiszemy je w postaci

$$\lim_{R\to\infty} P \int_{-R}^{R} \frac{f_R(x)}{x-\alpha}\,dx = -\pi f_I(\alpha).$$

Chcemy sprawdzić, czy $f(z) = 1/(z+i)$ spełnia tę relację. Używając równania (6.21) mamy

$$\lim_{R\to\infty} P \int_{-R}^{R} \frac{f_R(x)}{x-\alpha}\,dx = \lim_{R\to\infty}\left[f_R(\alpha)\ln\left(\frac{R-\alpha}{R+\alpha}\right) + P\int_{-R}^{R}\frac{f_R(x)-f_R(\alpha)}{x-\alpha}\,dx\right]. \tag{6.23}$$

Ponieważ teraz $f_R(x) = x/(x^2+1)$, znajdujemy, że

$$\frac{f_R(x)-f_R(\alpha)}{x-\alpha} = \frac{1-\alpha x}{(\alpha^2+1)(x^2+1)},$$

możemy więc po prawej stronie równania (6.23) opuścić znak wartości głównej. Mamy również

$$\lim_{R\to\infty} \ln\left(\frac{R-\alpha}{R+\alpha}\right) = 0,$$

równanie (6.23) przyjmuje więc postać

$$\lim_{R\to\infty} P\int_{-R}^{R}\frac{f_R(x)}{x-\alpha}\,dx = \frac{1}{\alpha^2+1}\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{1-\alpha x}{x^2+1}\,dx = \frac{1}{\alpha^2+1}\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{dx}{x^2+1},$$

ponieważ $x/(x^2+1)$ jest funkcją nieparzystą. Zatem

$$\lim_{R\to\infty} P\int_{-R}^{R}\frac{f_R(x)}{x-\alpha}\,dx = \frac{2}{\alpha^2+1}\lim_{R\to\infty}\operatorname{arctg} R = \frac{\pi}{\alpha^2+1} = -\pi f_I(\alpha)$$

i równanie (6.19b) jest wobec tego rzeczywiście spełnione. Pozostawiamy czytelnikowi pokazanie, że równanie (6.19a) jest także spełnione. Jest oczywiste, że równanie (6.21) jest bardzo użyteczne w połączeniu z równaniami (6.19a) i (6.19b), ponieważ przy założeniach zrobionych przy wyprowadzaniu tych równań $f(z)$ jest różniczkowalne w $z = \alpha$. Zatem

$$f_R(\alpha) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_I(x)-f_I(\alpha)}{x-\alpha}\,dx, \tag{6.24a}$$

$$f_I(\alpha) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_R(x)-f_R(\alpha)}{x-\alpha}\,dx, \tag{6.24b}$$

gdzie w przypadku jakichś niejednoznaczności

$$\int_{-\infty}^{\infty} \equiv \lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}.$$

Metody te mogą być czasami użyte do obliczania rzeczywistych całek oznaczonych. Na przykład rozważmy funkcję $f(z) = e^{iz}$. Funkcja ta jest wszędzie analityczna i jeżeli napiszemy $z = Re^{i\theta}$, wtedy $|f(z)| \to 0$, gdy $R \to \infty$ dla wszystkich θ takich, że $0 < \theta < \pi$. Nie jest to dokładnie to samo, czego używaliśmy powyżej dla pokazania, że całka po dużym półokręgu z $f(z)/(z-\alpha)$ znika (choć byłoby tym samym, jeżeli mielibyśmy $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$). Jednakże czytelnik może pokazać, że dla $f(z) = e^{iz}$ wkład od dużego półokręgu znika i równania (6.19a) i (6.19b) są spełnione. W takim razie $f_R(x) = \cos x$ i $f_I(x) = \sin x$, używając więc równania (6.24a) uzyskujemy

$$\cos\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x - \sin\alpha}{x-\alpha}\, dx.$$

Ponieważ $\sin x - \sin\alpha = 2\sin\frac{1}{2}(x-\alpha)\cos\frac{1}{2}(x+\alpha)$, widzimy, że rzeczywiście wyrażenie podcałkowe nie jest osobliwe w $x = \alpha$. W przypadku szczególnym $\alpha = 0$ znajdujemy, że

$$1 = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x}\, dx,$$

to znaczy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x}\, dx = \pi.$$

Na podstawie tego rezultatu z własności symetrii otrzymamy także

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\sin x}{x}\, dx = \frac{\pi}{2}.$$

Widzimy tutaj, że oscylacje $\sin x$, gdy x jest duże, zapewniają zbieżność całki, nawet mimo że wyrażenie

$$\int_{1}^{\infty} \frac{1}{x}\, dx$$

jest rozbieżne. Jest to analogiczne do faktu, że szereg naprzemienny

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{1}{n} (= \ln 2)$$

zbiega się, podczas gdy $\sum_{n=1}^{\infty} (1/n)$ jest rozbieżny.

6.6. WPROWADZENIE DO ZWIĄZKÓW DYSPERSYJNYCH

Równania wyprowadzone w poprzednich paragrafach są interesujące same w sobie z matematycznego punktu widzenia. Jednakże fizyk chce oczywiście wiedzieć, czy istnieją jakieś układy fizyczne, do których można otrzymane rezultaty zastosować. Pokażemy teraz, że przy dosyć ogólnych, fizycznie umotywowanych założeniach, można znaleźć

wielkości fizyczne posiadające analityczne własności niezbędne do tego, aby mogły one spełniać związek transformat Hilberta. W szczegółowych zastosowaniach skupimy uwagę na elektromagnetyzmie, wiele z naszych rezultatów będzie wszakże miało bardziej ogólny charakter.

Zaczniemy od rozważenia układu fizycznego, dla którego zaburzenie $I(t)$ związane jest z reakcją układu $R(t)$ następującą liniową relacją

$$R(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(t-t')I(t')dt', \tag{6.25}$$

gdzie $I(t')$ mogłoby przykładowo być polem elektrycznym w chwili t', a $R(t)$ mogłoby być polaryzacją układu w chwili t. Założyliśmy, że G zależy tylko od $t-t'$, ponieważ chcemy aby system reagował na gwałtowne zaburzenie w chwili t_0, gdy $I(t') = I_0\delta(t'-t_0)$, w ten sam sposób, w jaki reagowałby na gwałtowne zaburzenie w chwili $t_0+\tau$, tzn. w czasie późniejszym o τ. W pierwszym przypadku mamy

$$R_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(t-t')I_0\delta(t'-t_0)dt' = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_0 G(t-t_0).$$

W drugim przypadku mamy

$$R_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(t-t')I_0\delta(t'-t_0-\tau)dt' = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_0 G(t-t_0-\tau)$$

albo innymi słowami

$$R_2(t+\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_0 G(t-t_0) = R_1(t).$$

Jeżeli zatem przesuniemy zaburzenie o τ, to przesuniemy reakcję układu o τ.

Co teraz możemy powiedzieć o $G(\tau)$ z ogólnego fizycznego punktu widzenia? Po pierwsze widzimy, że zaburzenie w chwili t nie powinno prowadzić do reakcji układu w chwilach wcześniejszych od t, tzn. $G(\tau) = 0$ dla $\tau < 0$, a więc

$$R(t) = \int_{-\infty}^{t} G(t-t')I(t')dt',$$

co pokazuje, że reakcja w chwili t jest ważoną superpozycją liniową wszystkich zaburzeń, które miały miejsce przed czasem t. Jest to *warunek przyczynowości*. Możliwość, że $G(\tau)$ jest osobliwe dla jakiegokolwiek skończonego τ, jest wykluczona, ponieważ reakcja układu na gwałtowne zaburzenie $I(t') = I_0\delta(t-t')$ wynosi

$$R(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} I_0 G(t-t_0), \quad t > t_0$$

i ponieważ z fizycznego punktu widzenia wymagamy, aby reakcja układu była zawsze skończona, $G(\tau)$ jest skończone dla wszystkich τ. Ponadto robimy fizycznie rozsądne założenie, że zaburzenie układu w odległej przeszłości nie ma dostrzegalnego wpływu na sytuację w chwili bieżącej. Można to sformułować jako żądanie, aby $G(\tau) \to 0$, gdy $\tau \to \infty$, ponieważ na podstawie poprzedniego równania sprowadza się to do założenia,

że reakcja układu na jakiekolwiek zaburzenie wygasa po dostatecznie długim czasie (tzn. w każdym układzie istnieje jakiś mechanizm dyssypacji).

Rozważmy teraz transformatę Fouriera równania (6.25). Używając twierdzenia o splocie (patrz paragraf 5.7) znajdujemy, że

$$r(\omega) = g(\omega)i(\omega),$$

gdzie

$$r(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} R(t)\, e^{i\omega t}\, dt, \quad g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(t)\, e^{i\omega t}\, dt,$$

$$i(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} I(t)\, e^{i\omega t}\, dt.$$

W elektromagnetyzmie, gdzie I jest przyłożonym polem elektrycznym **E**, a R jest polaryzacją **P**, $g(\omega)$ oznacza się zwyczajowo przez $\chi(\omega)$, które nazywane jest podatnością elektryczną, zatem

$$P(\omega) = \chi(\omega)E(\omega).$$

Zakładając, że $G(\tau)$ spełnia

$$\int_0^{\infty} |G(\tau)|\, d\tau < \infty,$$

jesteśmy w stanie zagwarantować istnienie ograniczonego $g(\omega)$ dla wszystkich ω. Możemy teraz podsumować nasze fizycznie umotywowane założenia odnośnie $G(\tau)$:

a) $G(\tau)$ jest ograniczone dla wszystkich τ,

b) $|G(\tau)|$ jest całkowalne, a więc $G(\tau) \to 0$ szybciej niż $1/\tau$ dla $\tau \to \infty$,

c) $G(\tau) = 0$ dla $\tau < 0$.

Możemy zwrócić uwagę, że (a) i (b) razem pociągają za sobą całkowalność w kwadracie funkcji $G(\tau)$ i stąd (patrz paragraf 9.6) $g(\omega)$ jest całkowalne w kwadracie.

Chcemy teraz pokazać, że możemy przedłużyć $g(\omega)$ na płaszczyznę zespoloną z w ten sposób, iż $g(z)$ spełnia warunki, przy których wyprowadziliśmy parę transformat Hilberta [równ. (6.19a) i (6.19b)] w poprzednim paragrafie. Po pierwsze, ponieważ $G(\tau) = 0$ dla $\tau < 0$, napiszemy

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} G(t)\, e^{i\omega t}\, dt.$$

Rozszerzamy tę relację na płaszczyznę zespoloną używając definicji

$$g(z) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} G(t)\, e^{izt}\, dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} G(t)\, e^{i\omega t} e^{-\omega' t}\, dt,$$

gdzie napisaliśmy $z = \omega + i\omega'$. Ograniczymy teraz naszą uwagę do górnej półpłaszczyzny ($\omega' > 0$), gdzie ze względu na warunek przyczynowości podany w założeniu (c) powyżej ($t > 0$ w powyższej całce), czynnik $e^{-\omega' t}$ jest gasnącą eksponentą. Dla $0 < \theta < \pi$ mamy

$$|g(z)| \leqslant \frac{1}{\sqrt{2\pi}} M_G \int_0^{\infty} e^{-[|z|\sin\theta]t}\, dt,$$

gdzie zastąpiliśmy $G(t)$ przez wartość maksymalną M_G [założenie (a) powyżej], zatem

$$|g(z)| \leqslant \frac{M_G}{\sqrt{2\pi}\,|z|\sin\theta},$$

co dąży do zera, gdy $|z| \to \infty$. Dla $\theta = 0$ lub π mamy

$$g(\omega, \omega' = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G(t) e^{i\omega t}\, dt.$$

Ponieważ $G(t)$ jest całkowalne w kwadracie, $g(\omega, \omega' = 0)$ również jest całkowalne w kwadracie jako funkcja ω (patrz paragraf 9.6) i zatem $|g(\omega, \omega' = 0)|$ dąży do zera, gdy $\omega \to \infty$. Wobec tego w dowolnym kierunku w górnej półpłaszczyźnie $|g(z)| \to 0$, gdy $|z| \to \infty$.

Chcemy teraz pokazać, że $g(z)$ jest analityczne w górnej półpłaszczyźnie. Używając

$$g(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G(t)\, e^{izt}\, dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G(t) e^{i\omega t} e^{-\omega' t}\, dt \tag{6.26}$$

widzimy, że dla $\omega' > 0$

$$\frac{d^n g}{dz^n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G(t) \frac{d^n}{dz^n} e^{izt}\, dt = \frac{i^n}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty t^n G(t) e^{i\omega t} e^{-\omega' t}\, dt, \tag{6.27}$$

ponieważ w tym przypadku zarówno (6.26) jak i (6.27) są jednostajnie zbieżne ze względu na czynnik $e^{-\omega' t}$ ($\omega' > 0$, $t > 0$). Zatem $g(z)$ jest analityczne w górnej półpłaszczyźnie ($\omega' > 0$). Jednakże jest jasne, że nasze założenia odnośnie $G(t)$ nie pozwalają nam rozszerzyć obszaru analityczności na $\omega' \geqslant 0$. Możemy niemniej powiedzieć, że $g(z)$ jest ograniczone na osi rzeczywistej, tak że jedyne osobliwości, gdy $\omega' = 0$, mogą być typu punktu rozgałęzienia; możemy nawet powiedzieć, że takie osobliwości typu punktu rozgałęzienia jak $1/\sqrt{z}$ czy $\log z$ są wykluczone przez żądanie ograniczoności funkcji. Czytelnik może sprawdzić powracając do wyprowadzenia oryginalnej pary równań transformat Hilberta [równ. (6.19a) i (6.19b)], że można je zmodyfikować tak, aby włączyć ograniczone osobliwości typu punktu rozgałęzienia, obchodząc każdy taki punkt po małym półokręgu. Równania (6.19a) i (6.19b) pozostają zatem niezmienione przez obecność takich osobliwości (cięcia można zawsze tak wybrać, aby omijały górną półpłaszczyznę). W celu wykluczenia możliwości tych osobliwości typu punktu rozgałęzienia należałoby założyć wykładnicze zanikanie $G(\tau)$ dla $\tau \to \infty$. Dla dowolnego $g(z)$ powstającego z $G(t)$, które spełnia założenia (a), (b) i (c), możemy zatem napisać

$$g_R(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega}\, d\bar{\omega}, \tag{6.28a}$$

$$g_I(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_R(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega}\, d\bar{\omega}. \tag{6.28b}$$

Wobec tego dokonując kilku bardzo sensownych założeń o rozważanym przykładzie możemy pokazać, że części urojona i rzeczywista fizycznej wielkości $g(\omega)$ są ściśle ze sobą związane dla rzeczywistych wartości argumentu relacją, która jest w zasadzie *związkiem*

dyspersyjnym. Podstawowym założeniem jest warunek przyczynowości; możemy powiedzieć, że przyczynowość pociąga za sobą w rozpatrzonym przez nas przypadku istnienie związków dyspersyjnych. Normalnie znaczenie terminu „związek dyspersyjny" ograniczane jest do całkowej relacji między dwoma obserwowalnymi wielkościami, która zawiera tylko całkowanie po wartościach argumentu mających sens fizyczny. Zatem w równaniach (6.28a) i (6.28b) tylko dodatnie częstości są dostępne eksperymentalnie, relacje te nie są więc w przedstawionej postaci bezpośrednio użyteczne. Jednakże $G(t)$ jest rzeczywiste, możemy więc postąpić następująco:

$$g(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G(t) e^{izt} dt,$$

$$g^*(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G^*(t) e^{-iz^*t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty G(t) e^{-iz^*t} dt = g(-z^*).$$

Mamy więc $g^*(z) = g(-z^*)$, co zwykle nazywa się *warunkiem rzeczywistości*. Jeżeli z jest rzeczywiste ($z = \omega$), to znajdujemy, że

$$g_R(\omega) - ig_I(\omega) = g_R(-\omega) + ig_I(-\omega)$$

lub

$$g_R(\omega) = g_R(-\omega), \tag{6.29a}$$

$$g_I(\omega) = -g_I(-\omega), \tag{6.29b}$$

tzn. g_R jest parzystą funkcją ω, a g_I jest nieparzystą funkcją ω. Zauważmy, że jeżeli równania (6.29a) i (6.29b) są spełnione, to funkcja

$$G(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty g(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

jest funkcją rzeczywistą.

Napiszmy teraz w równaniu (6.28a)

$$g_R(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^0 \frac{g_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} d\bar{\omega} + \frac{1}{\pi} P \int_0^\infty \frac{g_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} d\bar{\omega}.$$

Połóżmy w pierwszej całce $\bar{\omega} \to -\bar{\omega}$, zatem

$$g_R(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_\infty^0 \frac{g_I(-\bar{\omega})}{\bar{\omega} + \omega} d\bar{\omega} + \frac{1}{\pi} P \int_0^\infty \frac{g_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} d\bar{\omega}.$$

Używając równania (6.29b) otrzymujemy ostatecznie

$$g_R(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\bar{\omega} g_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2 - \omega^2} d\bar{\omega} \tag{6.30a}$$

i w identyczny sposób

$$g_I(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{g_R(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2 - \omega^2} d\bar{\omega}. \tag{6.30b}$$

W równaniach tych występują tylko dodatnie, eksperymentalnie dostępne częstości. Dla podatności elektrycznych mamy np.

$$\chi_R(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\bar{\omega}\chi_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2 - \omega^2} d\bar{\omega}, \tag{6.31a}$$

$$\chi_I(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\chi_R(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2 - \omega^2} d\bar{\omega}. \tag{6.31b}$$

Równania (6.31a) i (6.31b) zostały po raz pierwszy wyprowadzone przez H. A. Kramersa i R. de L. Kroniga i noszą nazwę *związków dyspersyjnych Kramersa–Kroniga.*

Teraz zgodnie z równaniami elektromagnetyzmu możemy napisać

$$n^2(\omega) = 1 + 4\pi\chi(\omega),$$

gdzie $n(\omega)$ jest zespolonym współczynnikiem załamania. Ponieważ z jest analityczne w górnej półpłaszczyźnie, więc $n^2(z)$ ma tę samą własność i funkcja

$$n(z) = \sqrt{1 + 4\pi\chi(z)} \tag{6.32}$$

jest również analityczna w tym obszarze, jeżeli $1 + 4\pi\chi(z)$ nie ma zer w górnej półpłaszczyźnie. Jeżeli $1 + 4\pi\chi(z)$ znika dla jakiegoś $z = z_0$ w górnej półpłaszczyźnie, wtedy zgodnie z warunkiem rzeczywistości

$$\chi^*(z_0) = \chi(-z_0^*)$$

znajdujemy, że $1 + 4\pi\chi(z)$ znika także dla $z = -z_0^*$. Ponieważ $-z_0^*$ leży w górnej półpłaszczyźnie i ma część urojoną $\mathrm{Im} z_0$, to w górnej półpłaszczyźnie będzie znajdować się cięcie biegnące od $-z_0^*$ do z_0. W tym przypadku związki dyspersyjne (6.31a) i (6.31b) musiałyby być zmodyfikowane. Załóżmy, że $n(z)$ nie ma zer w górnej półpłaszczyźnie i jest zatem analityczne w tym obszarze. Jednakże ze względu na równanie (6.32) $|n(z)|$ nie dąży do zera dla $|z| \to \infty$. W rzeczywistości

$$n(z) \to 1 \quad \text{dla} \quad |z| \to \infty,$$

w górnej półpłaszczyźnie. Pociąga to za sobą konieczność modyfikacji traktowania członu pochodzącego od dużego półokręgu na rys. 6.12 przy otrzymywaniu równania (6.18). W przypadku $n(z)$ mamy

$$\int_{S_R} \frac{n(z)}{z - \alpha} dz \xrightarrow{|z| \to \infty} \int_0^\pi \frac{dz}{z} = i\pi$$

w notacji z poprzedniego paragrafu (patrz rys. 6.12). Zatem w przypadku $n(z)$ równanie (6.18) należy zastąpić przez

$$i\pi n(\omega) = i\pi + P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} d\bar{\omega}.$$

Rozdzielając części rzeczywistą i zespoloną otrzymujemy

$$n_R(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} d\bar{\omega}, \tag{6.33a}$$

$$n_I(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n_R(\bar{\omega})}{\bar{\omega} - \omega} d\bar{\omega}. \tag{6.33b}$$

Korzystając z warunku rzeczywistości można przepisać te równania w postaci

$$n_R(\omega) = 1+\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\bar{\omega}n_I(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2-\omega^2}\,d\bar{\omega}, \tag{6.34a}$$

$$n_I(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}P\int_0^\infty \frac{n_R(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2-\omega^2}\,d\bar{\omega}. \tag{6.34b}$$

Wielkość $\mu(\omega) \equiv (2\omega/c)n_I(\omega)$, gdzie c jest prędkością światła w próżni, nazywamy *współczynnikiem absorpcji* i jest odwrotnością odległości, jaką fala

$$\psi(x, t) = A\exp\left\{i\omega\left[\frac{n(\omega)}{c}x-t\right]\right\}$$

przebywa, nim jej natężenie spadnie do 1/e wartości początkowej w $x = 0$. Używając μ mamy

$$n_R(\omega) = 1+\frac{c}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\mu(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2-\omega^2}\,d\bar{\omega}. \tag{6.35}$$

Zatem rzeczywista część współczynnika załamania jest całkowicie określona przez znajomość współczynnika absorpcji dla wszystkich częstości! To właśnie z równania (6.35) związki dyspersyjne biorą swoją nazwę. Równanie (6.35) wiąże własności absorpcyjne substancji z ich własnościami dyspersyjnymi, to znaczy ze sposobem, w jaki współczynnik załamania zmienia się z częstością. Właśnie ta zmiana współczynnika załamania z częstością powoduje znane rozdzielanie (dyspersję) różnych długości fali przy przejściu przez pryzmat.

Bardziej współcześnie termin związek dyspersyjny jest używany na oznaczenie jakiegokolwiek związku między częściami rzeczywistą i urojoną jakiejś wielkości fizycznej np. amplitudy rozpraszania w mechanice kwantowej, który ma ogólną postać transformaty Hilberta. Zauważmy, że ponieważ z fizycznych przesłanek $\mu(\omega)$ musi być dodatnie dla wszystkich częstości (nie spodziewamy się, aby istniały fale, których amplituda wzrasta z czasem przy przechodzeniu przez jakąś substancję), równanie (6.35) stwierdza, że

$$n_R(0) = 1+\frac{c}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\mu(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2}\,d\bar{\omega}, \tag{6.36}$$

widzimy więc, że $n_R(0) > 1$. Zatem znana statyczna stała dielektryczna ε dana przez $\varepsilon = n^2(0)$ jest zawsze większa od jedności. Ponieważ $\chi_I(0) = 0$, widzimy, że całka w równaniu (6.36) jest zbieżna bez użycia techniki wartości głównej. Używając zatem równości $n(0) = \sqrt{\varepsilon}$ możemy równanie (6.36) zapisać w postaci

$$\sqrt{\varepsilon}-1 = \frac{c}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mu(\bar{\omega})}{\bar{\omega}^2}\,d\bar{\omega}.$$

Związek ten znany jest pod nazwą *reguły sum* dla współczynnika absorpcji; wiąże on ważoną całkę po wszystkich wartościach współczynnika absorpcji z prostą, eksperymentalnie dostępną stałą.

Wyprowadzenie związku dyspersyjnego dla współczynnika załamania wykazuje pewne cechy często spotykane przy wyprowadzaniu związków dyspersyjnych. Zdarza się mianowicie często, że rozważana wielkość nie dąży do 0, gdy $|z|$ dąży do nieskończoności i co więcej, rzadko jesteśmy w tej szczęśliwej sytuacji, że znamy dokładnie zachowanie się tej wielkości, gdy $|z|$ dąży do nieskończoności, z wyjątkiem np. informacji, że jest ona ograniczona dla dużych wartości $|z|$. W tym przypadku możemy postąpić następująco. Niech α_0 będzie jakimś punktem na osi rzeczywistej, w którym funkcja $f(z)$ jest analityczna, wtedy funkcja

$$\frac{f(z)-f(\alpha_0)}{z-\alpha_0} \equiv \phi(z)$$

nie jest osobliwa w $z = \alpha_0$ i $|\phi(z)| \to 0$, gdy $|z| \to \infty$. Jeżeli $f(z)$ jest analityczna w górnej półpłaszczyźnie, to $\phi(z)$ jest tam także analityczna i możemy napisać związek dyspersyjny dla $\phi(z)$

$$i\pi\left[\frac{f(\alpha)-f(\alpha_0)}{\alpha-\alpha_0}\right] = P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)-f(\alpha_0)}{(x-\alpha)(x-\alpha_0)}dx.$$

Ale

$$\frac{1}{(x-\alpha)(x-\alpha_0)} = \frac{1}{\alpha-\alpha_0}\left[\frac{1}{x-\alpha}-\frac{1}{x-\alpha_0}\right],$$

wobec tego nasz związek dyspersyjny przyjmuje postać

$$i\pi f(\alpha) = i\pi f(\alpha_0)+(\alpha-\alpha_0)P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)dx}{(x-\alpha)(x-\alpha_0)} -$$

$$-f(\alpha_0)P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{x-\alpha}+f(\alpha_0)P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{x-\alpha_0}.$$

Zgodnie z wynikami poprzedniego paragrafu dwie ostatnie całki w sensie wartości głównej znikają i mamy po prostu

$$i\pi f(\alpha) = i\pi f(\alpha_0)+(\alpha-\alpha_0)P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)dx}{(x-\alpha)(x-\alpha_0)}.$$

Rozdzielając części rzeczywistą i urojoną uzyskujemy ostatecznie

$$f_R(\alpha) = f_R(\alpha_0)+\frac{1}{\pi}(\alpha-\alpha_0)P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_I(x)}{(x-\alpha)(x-\alpha_0)}dx, \tag{6.37a}$$

$$f_I(\alpha) = f_I(\alpha_0)-\frac{1}{\pi}(\alpha-\alpha_0)P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_R(x)}{(x-\alpha)(x-\alpha_0)}dx. \tag{6.37b}$$

Relacje typu równań (6.37a) i (6.37b) nazywane są *związkami dyspersyjnymi z jednym odjęciem*. Aby zrobić z nich użytek, trzeba mieć sposób określenia powiedzmy $f_R(\alpha_0)$ dla jakiejś wartości α_0, oprócz posiadania normalnych informacji wymaganych przez zwykłe związki dyspersyjne typu równania (6.19a). Jeżeli własności $f(z)$ dla dużych $|z|$ są jeszcze „gorsze", niż było założone powyżej [przypuśćmy na przykład, że $|f(z)/z|$ dąży do pewnej

niezerowej stałej, gdy $|z|$ dąży do nieskończoności] moglibyśmy wprowadzić więcej punktów odjęcia, α_1, α_2 itd. w analogiczny sposób.

Widzieliśmy już, że przyczynowość pociąga za sobą pewne własności analityczności; zakończymy ten paragraf pokazując, że odwrotne twierdzenie też jest prawdziwe, mianowicie że analityczność pociąga za sobą przyczynowość! Dokonamy tego używając analitycznych własności $n(z)$ w celu pokazania, że sygnały elektromagnetyczne nie mogą w jakimkolwiek ośrodku rozchodzić się z prędkością większą niż prędkość światła. Rozważmy front falowy przesuwający się w kierunku x w ośrodku dielektrycznym o zespolonym współczynniku załamania $n(z)$. Przypuśćmy, że w $x = 0$ nie ma żadnego zaburzenia przed czasem $t = 0$, tzn. $\psi(0, t) = 0$ dla wszystkich $t < 0$. Dowolną falę $\psi(x, t)$ możemy zapisać jako superpozycję fal płaskich o wszystkich częstościach

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\omega) \exp\left\{i\omega\left[\frac{n(\omega)}{c}x - t\right]\right\} d\omega.$$

Zauważmy, że

$$\psi(0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

a więc

$$\psi(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(0, t)\, e^{i\omega t} dt. \tag{6.38}$$

Możemy teraz użyć równania (6.38), aby zdefiniować $\psi(z)$ dla zespolonych z

$$\psi(z) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \psi(0, t)\, e^{i\omega t} e^{-\omega' t} dt,$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że $\psi(0, t) = 0$ dla $t < 0$ i napisaliśmy jak zwykle $z = \omega + i\omega'$. Na podstawie naszych poprzednich argumentów $\psi(z)$ jest analityczne w górnej półpłaszczyźnie i co do modułu dąży do zera, gdy $|z|$ dąży do nieskończoności w tym obszarze. Rozważmy teraz

$$\oint_C \psi(z) \exp\left[iz\left(\frac{n(z)}{c}x - t\right)\right] dz$$

wzdłuż konturu pokazanego na rys. 6.13. Ponieważ $\psi(z)$ i $n(z)$ są analityczne w górnej półpłaszczyźnie

$$\oint_C \psi(z) \exp\left[iz\left(\frac{n(z)}{c}x - t\right)\right] dz = 0,$$

zatem

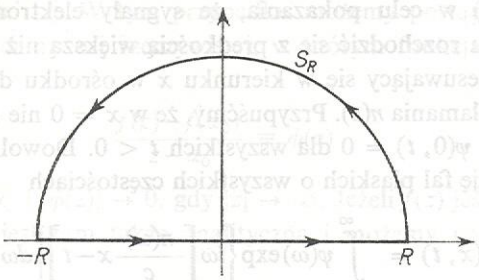
$$\int_{-R}^{R} \psi(\omega) \exp\left[i\omega\left(\frac{n(\omega)}{c}x - t\right)\right] d\omega + \int_{S_R} \psi(z) \exp\left[iz\left(\frac{n(z)}{c}x - t\right)\right] dz = 0. \tag{6.39}$$

Oznaczając drugą całkę w równ. (6.39) przez I_R mamy

$$|I_R| \leqslant \int_{0}^{\pi} |\psi(z)| \exp\left[-R\sin\theta\left(\frac{n_R}{c}x - t\right) - R\cos\theta\frac{n_I}{c}x\right] R d\theta,$$

gdzie R jest pewną dowolnie dużą liczbą. Gdy teraz $R \to \infty$, to jak widzieliśmy powyżej, $n_I \to 0$ i $n_R \to 1$. Zatem w tej sytuacji

$$|I_R| \leqslant 2R \int_0^{\pi/2} |\psi(z)| \exp\left[-R\left(\frac{x}{c}-t\right)\sin\theta\right] d\theta,$$



Rys. 6.13 Kontur C używany w równ. (6.39). R może stać się dowolnie duże.

ale $\sin\theta \geqslant 2\theta/\pi$ dla $0 \leqslant \theta \leqslant \pi/2$. [Aby to stwierdzić, zauważcie, że $g(\theta) = \sin\theta - 2\theta/\pi$ znika dla $\theta = 0$ i $\theta = \pi/2$ oraz $g(\theta)$ jest dodatnie dla $\theta = \pi/4$, a więc aby stało się równe 0 lub miało wartość ujemną wewnątrz odcinka $[0, \pi/2]$, musi mieć w tym obszarze minimum. Jednakże $g''(\theta)$ jest zawsze ujemne w $[0, \pi/2]$, funkcja ta nie może więc w żaden sposób przyjmować minimum. Można to stwierdzić rysując wykresy $\sin\theta$ i $2\theta/\pi$]. Jeżeli zatem $(x/c - t)$ jest dodatnie, to

$$|I_R| \leqslant 2R \int_0^{\pi/2} |\psi(z)| \exp\left[-\frac{2R}{\pi}\left(\frac{x}{c}-t\right)\theta\right] d\theta.$$

Mamy teraz $|\psi(z)| \to 0$ dla $R \to \infty$, napiszmy więc dla dużych R, $|\psi(z)| \leqslant aR^{-\lambda}(\lambda > 0)$; wtedy

$$|I_R| \leqslant 2aR^{1-\lambda} \int_0^{\pi/2} \exp\left[-\frac{2}{\pi}R\left(\frac{x}{c}-t\right)\theta\right] d\theta$$

lub

$$|I_R| \leqslant \frac{\pi a}{R^{\lambda}[(x/c)-t]}\left[1-\exp\left\{-R\left(\frac{x}{c}-t\right)\right\}\right].$$

Jeżeli przyjmiemy, że $x/c > t$, wtedy dla $R \to \infty$ widzimy, że $|I_R| \to 0$. Zauważcie, że jeżeli $x/c < t$, to nie możemy takiego wniosku wyciągnąć ze względu na obecność w powyższej nierówności rosnącej eksponenty. Tak więc dla $R \to \infty$ równ. (6.39) przyjmuje postać

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\omega) \exp\left\{i\omega\left[\frac{n(\omega)}{c}x - t\right]\right\} d\omega = 0$$

dla $x/c > t$. Dochodzimy zatem do zadowalającego wniosku, że jeżeli nie ma żadnego sygnału w $x = 0$ w chwili $t = 0$, to nie będzie żadnego sygnału w $x = x_0 > 0$ przed czasem $t = x_0/c$, co oznacza, że sygnał może rozchodzić się co najwyżej z prędkością światła c, nawet mimo że $c/n(\omega)$ może być większe niż c, ponieważ wiadomo z eksperymentu, iż $n(\omega)$ może być dla dużych częstotliwości mniejsze niż 1 [nie może być oczywiście mniejsze od 1 dla małych częstości, bo jak pokazaliśmy $n(0) \geqslant 1$].

Przechodzimy teraz do jednego z najważniejszych zastosowań twierdzenia Cauchy'ego–Goursata, a mianowicie do możliwości rozwinięcia funkcji analitycznej na szereg potęgowy.

Twierdzenie Laurenta. Niech $f(z)$ będzie funkcją analityczną w pierścieniowym obszarze zamkniętym między dwoma okręgami C_1 i C_2 o wspólnym środku z_0. Wtedy dla każdego punktu w tym pierścieniu

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n(z-z_0)^n, \tag{6.40}$$

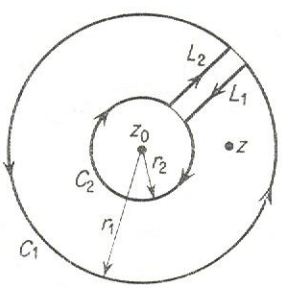
przy czym szereg ten jest jednostajnie zbieżny w każdym domkniętym obszarze leżącym całkowicie wewnątrz pierścienia; w powyższym wzorze

$$A_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z'-z_0)^{n+1}} dz', \tag{6.41}$$

dla $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, a C jest dowolnym zamkniętym konturem wewnątrz pierścienia okrążającego z_0.

Dowód. Rozważmy kontur K otaczający obszar R tak, jak na rys. 6.14; symbolicznie można napisać $K = C_1 + L_1 - C_2 + L_2$. Trzymamy się tutaj umowy, że proste kołowe kontury są zawsze przebiegane w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara. Ponieważ wewnętrzny okrąg przebiegany jest w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara, gdy rozważamy go jako część K, piszemy go w postaci $-C_2$, gdzie C_2 jest konwencjonalnie skierowaną krzywą. Ponieważ funkcja $f(z)$ jest analityczna wewnątrz i na K, to

$$2\pi i f(z) = \oint_K \frac{f(z')}{z'-z} dz' = \int_{C_1} \frac{f(z')}{z'-z} dz' + \int_{L_1} \frac{f(z')}{z'-z} dz' + \int_{-C_2} \frac{f(z')}{z'-z} dz' + \int_{L_2} \frac{f(z')}{z'-z} dz',$$



Rys. 6.14

gdzie $z \in R$. Przy pomocy tego samego argumentu, którego używaliśmy przy wyprowadzaniu całkowej formuły Cauchy'ego widzimy, że jeżeli L_1 i L_2 będą poprowadzone dowolnie blisko siebie, całki wzdłuż L_1 i L_2 zniosą się i

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_1} \frac{f(z')}{z'-z} dz' - \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} \frac{f(z')}{z'-z} dz', \tag{6.42}$$

gdzie użyliśmy równania (6.11). Równanie (6.42) jest punktem wyjścia do dowodu twierdzenia Laurenta. Aby pójść dalej, skorzystamy z tożsamości

$$\frac{1}{\alpha-\beta}=\frac{1}{\alpha}+\frac{\beta}{\alpha(\alpha-\beta)}.$$

Drugi wyraz wynosi po prostu $(\beta/\alpha)[1/(\alpha-\beta)]$, tzn. β/α razy pierwotnie rozkładana wielkość, tak więc iterując N razy otrzymujemy

$$\frac{1}{\alpha-\beta}=\sum_{n=0}^{N}\frac{\beta^n}{\alpha^{n+1}}+\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{N+1}\frac{1}{\alpha-\beta}. \tag{6.43}$$

Pamiętając o tym ostatnim równaniu napiszmy równ. (6.42) w postaci

$$f(z)=\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_1}\frac{f(z')}{[(z'-z_0)-(z-z_0)]}\,dz'+\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_2}\frac{f(z')}{[(z-z_0)-(z'-z_0)]}\,dz'.$$

Używając równania (6.43) możemy to wyrażenie zapisać jako

$$\begin{aligned}f(z)=&\frac{1}{2\pi i}\sum_{n=0}^{N}\oint_{C_1}\frac{(z-z_0)^n}{(z'-z_0)^{n+1}}f(z')\,dz'+\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_1}\left[\frac{z-z_0}{z'-z_0}\right]^{N+1}\frac{f(z')}{z'-z}\,dz'+\\&+\frac{1}{2\pi i}\sum_{m=0}^{N}\oint_{C_2}\frac{(z'-z_0)^m}{(z-z_0)^{m+1}}f(z')\,dz'+\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_2}\left[\frac{z'-z_0}{z-z_0}\right]^{N+1}\frac{f(z')}{z-z'}\,dz'.\end{aligned} \tag{6.44}$$

Zgodnie ze znanymi już teraz argumentami kontury C_1 i C_2 w pierwszym i trzecim członie powyższego równania mogą być zastąpione przez dowolny kontur C wokół z_0, który jest zawarty w pierścieniu ograniczonym przez C_1 i C_2. Dokonując w trzecim członie zamiany wskaźnika $m=n+1$ otrzymujemy

$$f(z)=\sum_{n=-N-1}^{N}A_n(z-z_0)^n+R_N(z),$$

gdzie A_n dane jest równaniem (6.41) i

$$R_N(z)=\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_1}\left[\frac{z-z_0}{z'-z_0}\right]^{N+1}\frac{f(z')}{z'-z}\,dz'+\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_2}\left[\frac{z'-z_0}{z-z_0}\right]^{N+1}\frac{f(z')}{z-z'}\,dz'.$$

Jeżeli możemy pokazać, że dla dostatecznie dużego N, gdzie N jest niezależne od z, wielkość $R_N(z)$ może być uczyniona mniejszą od dowolnie uprzednio zadanej liczby ε, wtedy dowód będzie kompletny. Niech r_1 będzie promieniem C_1 i r_2 promieniem C_2, mamy wtedy

$$|R_N(z)|\leqslant\frac{1}{2\pi}\left[\int_0^{2\pi}\frac{|z-z_0|^{N+1}}{r_1^{N+1}}\frac{|f(z')|}{|z'-z|}r_1\,d\theta+\int_0^{2\pi}\frac{r_2^{N+1}}{|z-z_0|^{N+1}}\frac{|f(z')|}{|z-z'|}r_2\,d\theta\right].$$

Definiujemy teraz

$$\begin{aligned}M_1&\equiv\operatorname*{Max}_{z\in C_1}|f(z)|, & M_2&\equiv\operatorname*{Max}_{z\in C_2}|f(z)|,\\ l_1&\equiv\operatorname*{Max}_{z\in R}|z-z_0|, & l_2&\equiv\operatorname*{Min}_{z\in R}|z-z_0|,\\ d_1&\equiv\operatorname*{Min}_{\substack{z\in R\\ z'\in C_1}}|z'-z|, & d_2&\equiv\operatorname*{Min}_{\substack{z\in R\\ z'\in C_2}}|z'-z|.\end{aligned}$$

Ponieważ R jest obszarem wewnątrz pierścienia ograniczonego przez C_1 i C_2,

$$l_1 < r_1, \quad l_2 > r_2, \tag{6.45}$$

zatem

$$|R_N(z)| \leqslant \frac{M_1 r_1}{d_1}\left(\frac{l_1}{r_1}\right)^{N+1} + \frac{M_2 r_2}{d_2}\left(\frac{r_2}{l_2}\right)^{N+1}. \tag{6.46}$$

Ale zgodnie z (6.45) $(l_1/r_1) < 1$ i $(r_2/l_2) < 1$, niezależnie od z i zatem dla dostatecznie dużego N wielkość $R_N(z)$ może być dowolnie mała. Ponieważ ograniczenie (6.46) jest niezależne od z, dowód jednostajnej zbieżności szeregu (6.40) jest zupełny. Szereg ten znany jest pod nazwą *rozwinięcia Laurenta* funkcji $f(z)$ wokół punktu z_0.

Przykład 1. Rozważmy funkcję

$$f(z) = \frac{z^3+2z^2+4}{(z-1)^3}.$$

Otrzymamy rozkład Laurenta funkcji $f(z)$ wokół osobliwego punktu $z = 1$. Pisząc $z \equiv$ $\equiv (z-1)+1$, mamy

$$f(z) = \frac{[(z-1)+1]^3+2[(z-1)+1]^2+4}{(z-1)^3} = 1+\frac{5}{z-1}+\frac{7}{(z-1)^2}+\frac{7}{(z-1)^3}.$$

W oczywisty sposób jest to rozkład Laurenta funkcji $f(z)$ wokół punktu $z = 1$ i zaleca się czytelnikowi sprawdzenie tego przez obliczenie tych współczynników A_n z równ. (6.41), które nie znikają dla tej szczególnej funkcji $f(z)$.

Przykład 2. Rozważymy teraz szereg Laurenta w mniej trywialnym przypadku, mianowicie dla funkcji $\cosh(z+1/z)$. Cosinus hiperboliczny jest funkcją całkowitą. Jej argument $z+1/z$ jest analityczny wszędzie z wyjątkiem początku układu, a zatem $\cosh(z+1/z)$ jest analityczny wszędzie z wyjątkiem początku układu. Możemy wobec tego wybrać w charakterze C_2 dowolnie mały okrąg wokół początku układu i jako C_1 dowolnie duży okrąg o tym samym środku. Wtedy mamy

$$\cosh\left(z+\frac{1}{z}\right) = \sum_{-\infty}^{\infty} A_n z^n, \quad \text{gdzie} \quad A_n = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{\cosh(z'+1/z')}{(z')^{n+1}}\,dz'$$

i C jest dowolnym zamkniętym konturem wokół początku układu. Niech C będzie jednostkowym okręgiem, wtedy $z' = e^{i\theta}$ na C, całka przyjmuje więc postać

$$A_n = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \cosh(2\cos\theta)\,e^{-in\theta}\,d\theta = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \cosh(2\cos\theta)\cos n\theta\,d\theta.$$

Całka ta może być obliczona z pomocą całkowego przedstawienia dla funkcji Bessela, które będzie dyskutowane w paragrafie 6.9. W dalszej części tego paragrafu obliczymy A_n jeszcze inną metodą, ale tutaj dla pełności podamy wynik

$$A_{2n} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!(m+2|n|)!}, \tag{6.47}$$

$$A_{2n+1} = 0 \quad \text{dla} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Przykład 3. W celu zilustrowania problemu innego rodzaju związanego z rozwinięciem Laurenta, rozważymy funkcję $f(z) = (z^2-1)^{-1/2}$. Zgodnie z dyskusją z paragrafu 6.2, funkcja ta ma punkty rozgałęzienia w $z = -1$ i $z = 1$. Możemy wybrać cięcie biegnące

między tymi dwoma punktami wzdłuż osi rzeczywistej definiując jednowartościową gałąź przez

$$f(z) = (\varrho_1\varrho_2)^{-1/2} e^{-i\phi_1/2} e^{-i\phi_2/2},$$

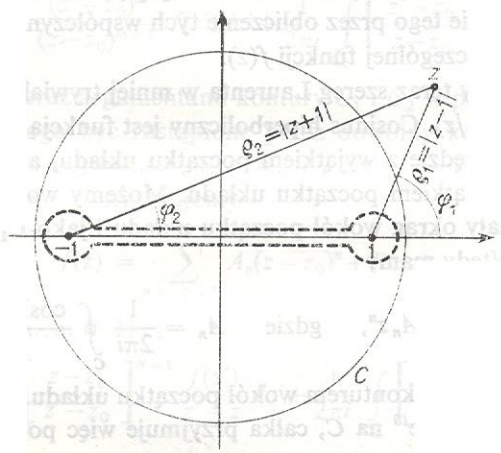
gdzie $0 \leqslant \phi_1 < 2\pi$, $0 \leqslant \phi_2 < 2\pi$, $\varrho_1 = |z-1|$, $\varrho_2 = |z+1|$ i $(\varrho_1\varrho_2)^{-1/2}$ oznacza dodatni pierwiastek kwadratowy z $1/\varrho_1\varrho_2$ (patrz rys. 6.15). Przy tych definicjach funkcja $f(z)$ jest analityczna wszędzie z wyjątkiem osi rzeczywistej między punktami $z = -1$ i $z = 1$. Jeżeli zatem wybierzemy C_2 jako okrąg wokół $z = 0$ o promieniu infinitezymalnie większym niż 1 i C_1 jako okrąg o dowolnie dużym promieniu, możemy uzyskać rozwinięcie Laurenta funkcji $f(z)$ w pierścieniu między C_1 i C_2. Jak zwykle

$$(z^2-1)^{-1/2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n z^n,$$

gdzie

$$A_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{(z'^2-1)^{-1/2}}{(z')^{n+1}} dz'.$$

Dla $n \geqslant 0$ wybieramy C jako okrąg o dowolnie dużym promieniu; jest oczywiste, że dla tego konturu odpowiednie całki znikają, a więc $A_n = 0$ dla $n \geqslant 0$. W przypadku n ujemnych wybieramy jako kontur dowolny okrąg o promieniu większym od 1 (patrz rys. 6.15).



Rys. 6.15 Kołowy kontur C jest punktem wyjścia przy wyliczaniu współczynników A_n szeregu Laurenta funkcji $(z^2-1)^{-1/2}$ dla n ujemnych. ϱ_1, ϱ_2, ϕ_1 i ϕ_2 definiują jednowartościową gałąź tej funkcji i narysowany linią przerywaną kontur o kształcie „psiej kości" powstaje przez deformację konturu C, która umożliwia nam obliczenie współczynników.

Zgodnie z naszymi wynikami odnośnie niezależności całki od drogi, kontur ten może być zdeformowany do konturu o kształcie „psiej kości", jak pokazuje rys. 6.15. Wkłady do A_n od nieskończenie małych okręgów na końcach konturu znikają, mamy więc po prostu

$$A_n = \frac{1}{2\pi i}\left[\int_1^{-1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} e^{-i\pi/2} x^m dx + \right.$$

$$\left. + \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} e^{-i(\pi+2\pi)/2} x^m dx\right] = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{x^m}{\sqrt{1-x^2}} dx,$$

gdzie $m = -n-1$ (zauważcie, że dla rozważanego zakresu zmienności n, m nie jest nigdy ujemne). Widać jasno, że dla m nieparzystych (n parzystych) A_n znika. Dla m parzystych (n nieparzystych) całka jest elementarnie prosta, mamy wtedy

$$A_n = \frac{2}{\pi}\int_0^1 \frac{x^m}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} \sin^m\theta\,d\theta = \frac{m!}{2^m[(m/2)!]^2}.$$

zatem

$$(z^2-1)^{-1/2} = \sum_{m=0}{}' \frac{m!}{2^m[(m/2)!]^2}\frac{1}{z^{m+1}},$$

gdzie prim wskazuje, że tylko parzyste wartości m wchodzą do sumy. Kładąc $m = 2\nu$, mamy ostatecznie

$$(z^2-1)^{-1/2} = \sum_{\nu=0}^{\infty}{}' \frac{(2\nu)!}{4^\nu(\nu!)^2}\frac{1}{z^{2\nu+1}} = \frac{1}{z}+\frac{1}{2}\frac{1}{z^3}+\frac{3}{8}\frac{1}{z^5}+\frac{5}{16}\frac{1}{z^7}+\ldots.$$

Wynik ten nie jest zaskakujący, bowiem to właśnie otrzymalibyśmy rozwijając $(z^2-1)^{-1/2}$ przy użyciu metod zmiennej rzeczywistej. Zauważcie, że w zgodzie z naszą definicją jednowartościowych gałęzi funkcji $(z^2-1)^{-1/2}$ szereg Laurenta daje wartość pierwiastka kwadratowego, która jest dodatnia na dodatniej części osi rzeczywistej i ujemna na ujemnej części tej osi.

Do tej pory mówiliśmy o osobliwościach jako o punktach, w których funkcja jest nieanalityczna, ale nie próbowaliśmy dokonać żadnej klasyfikacji punktów osobliwych. Różnice między takimi punktami istnieją, jak możemy się spodziewać rozważając punkty osobliwe $z = 0$ trzech funkcji $1/z$, $1/z^2$ i $\cosh(z+1/z)$. Czujemy, że osobliwość $1/z^2$ jest trochę gorsza niż $1/z$ i że osobliwość $\cosh(z+1/z)$ jest okropna. Sposobu klasyfikacji osobliwości dostarcza szereg Laurenta każdej funkcji.

Przypuśćmy, że funkcja $f(z)$ jest analityczna w obszarze R z wyjątkiem $z = z_0$. Rozwińmy $f(z)$ na szereg Laurenta wokół z_0 w obszarze R

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(z-z_0)^n + \sum_{n=1}^{\infty} b\,\frac{1}{(z-z_0)^n}.$$

Jeżeli $b_n = 0$ dla $n = N+1, N+2, \ldots$ tzn., jeżeli szereg ujemnych potęg $(z-z_0)$ kończy się na N-tej potędze, wtedy mówimy, że $f(z)$ ma biegun rzędu N w z_0. Funkcje $1/z$ i $1/z^2$ mają bieguny rzędu odpowiednio pierwszego i drugiego. Natomiast rozwinięcie Laurenta funkcji $\cosh(z+1/z)$ ma nieskończoną liczbę ujemnych potęg z; to samo ma miejsce w przypadku rozwinięcia Laurenta funkcji $e^{1/z}$, jak wkrótce się przekonamy. Osobliwości tych funkcji w początku układu noszą nazwę *istotnych osobliwości*. Nie dają się one usunąć drogą mnożenia funkcji przez jakąś skończoną potęgę z, jak to ma miejsce w przypadku biegunów $1/z$ i $1/z^2$. Zauważcie jednak, że obecność nieskończonej liczby ujemnych potęg z w szeregu Laurenta nie gwarantuje obecności istotnej osobliwości. Przykład 3 powyżej pokazuje, że osobliwość typu punktu rozgałęzienia może także prowadzić do nieskończonej liczby ujemnych potęg w szeregu Laurenta. Tylko wtedy gdy wiemy, że rozważana osobliwość może być zamknięta w dowolnie małym obszarze, możemy wnioskować, że nieskończona liczba ujemnych potęg z pociąga za sobą istnienie

istotnej osobliwości. Funkcję nie posiadającą w jakimś obszarze istotnych osobliwości — choć może mieć ona tam bieguny — nazywamy *funkcją meromorficzną.*

Twierdzenie Laurenta ma szczególnie ważne konsekwencje, w przypadku gdy nie ma żadnych osobliwości wewnątrz mniejszego okręgu C_2, tzn. $f(z)$ jest analityczne wszędzie wewnątrz C_1. Używając twierdzenia Laurenta możemy napisać

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n (z-z_0)^n,$$

gdzie

$$A_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z'-z_0)^{n+1}} dz'. \tag{6.48}$$

Jeżeli jednak $f(z')$ jest analityczne wewnątrz C_1, wtedy dla $n = -1, -2, \ldots$ wyrażenie podcałkowe w równ. (6.48) jest analityczne wewnątrz i na C_1, ponieważ C leży wewnątrz C_1. Zatem zgodnie z twierdzeniem Cauchy'ego–Goursata $A_n = 0$ dla $n \leqslant -1$. Co więcej, dla $n \geqslant 0$ mamy, używając równania (6.17),

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z')}{(z'-z_0)^{n+1}} dz' = \frac{1}{n!} f^{(n)}(z_0),$$

gdzie $f^{(n)}(z_0)$ oznacza n-tą pochodną $f(z)$ w $z = z_0$, a $f^{(0)}(z) \equiv f(z_0)$, zatem

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(z_0)\,(z-z_0)^n. \tag{6.49}$$

Wynik ten znany jest jako twierdzenie Taylora i szereg w równaniu (6.49) nazywany jest *szeregiem Taylora* dla $f(z)$ wokół punktu z_0. Ten bardzo ważny rezultat może być sformułowany następująco:

Twierdzenie Taylora. Jeżeli funkcja $f(z)$ jest analityczna we wszystkich punktach wewnętrznych okręgu C o środku z_0, wtedy w dowolnym zamkniętym obszarze zawartym całkowicie w C

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(z_0)\,(z-z_0)^n \tag{6.50}$$

i szereg ten jest jednostajnie zbieżny.

Możemy teraz wyrazić funkcję analityczną $f(z)$ jako jednostajnie zbieżny szereg funkcji analitycznych (łatwo pokazać, że dowolny, jednostajnie zbieżny szereg funkcji analitycznych jest analityczny). Ze względu na jednostajną zbieżność łatwo można pokazać, że całka $f(z)$ wzdłuż dowolnej drogi w obszarze zbieżności szeregu potęgowego (6.49) może być obliczona przez całkowanie szeregu człon po członie (patrz zadanie 6.28). Posługując się równaniem (6.17) widzimy, że oznacza to także, iż pochodne funkcji $f(z)$ mogą być obliczone również przez różniczkowanie człon po członie. Równanie (6.49) podaje zatem funkcję $f(z)$ i jej wszystkie pochodne w całym obszarze zbieżności.

Przykłady

1. $e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!}$, dla $|z| < \infty$.

2. $\sin z = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{z^{2n+1}}{(2n+1)!}$, dla $|z| < \infty$.

3. $(1-z)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n$, dla $|z| < 1$.

Wszystkie te szeregi sprowadzają się dla rzeczywistych wartości z do znanych wzorów.

Często jest możliwe uzyskanie rozwinięcia Laurenta jakiejś funkcji przy użyciu związanego z nim rozwinięcia Taylora. Zatem w przykładzie 1 powyżej otrzymujemy

$$e^{1/z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!\, z^n}, \quad (|z| > 0).$$

Widać z tego jasno, że $e^{1/z}$ ma w $z = 0$ istotną osobliwość. Trochę ważniejszym przykładem jest rozwinięcie Taylora funkcji $\cosh z$. Łatwo pokazać, że

$$\cosh z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{2n}}{(2n)!}$$

dla $|z| < \infty$. Zatem dla $|z| > 0$ mamy

$$\cosh(z+1/z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} (z+1/z)^{2n}.$$

Stosując wzór dwumianowy znajdujemy

$$\cosh(z+1/z) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{2n} \frac{z^{2(n-m)}}{(2n-m)!\, m!} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\mu=-n}^{n} \frac{z^{2\mu}}{(n+\mu)!\,(n-\mu)!}.$$

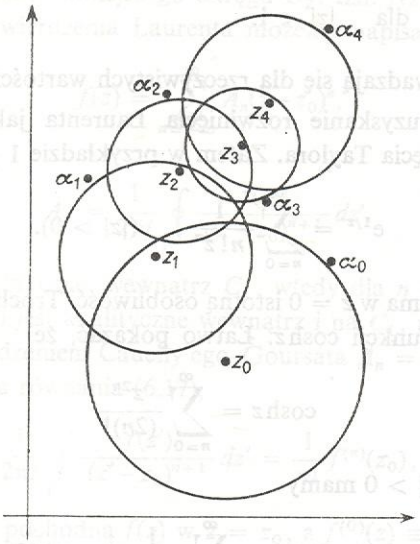
Jeżeli w równaniu (6.50) zamienimy porządek sumowania i następnie dokonamy zamiany zmiennych $\nu = n-\mu$, otrzymujemy

$$\cosh(z+1/z) = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} z^{2\mu} \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{(\nu+2|\mu|)!\,\nu!} \right]$$

w zgodzie z równaniem (6.47).

Obszar, w którym można dla funkcji stosować rozwinięcie Taylora wokół punktu z_0, ograniczony jest przez istnienie osobliwości tej funkcji. Widzieliśmy, że jeżeli osobliwość ta ma miejsce w punkcie α_0, rozwinięcie Taylora stosuje się wewnątrz okręgu o promieniu $|\alpha_0 - z_0|$ wokół z_0. Rozwinięcie Taylora daje wartości funkcji analitycznej i jej wszystkich pochodnych w każdym punkcie w obszarze analityczności. W szczególności wielkości te znane są w punkcie z_1 (patrz rys. 6.16) w pobliżu granicy obszaru. Możemy teraz użyć punktu z_1 jako punktu, wokół którego rozwiniemy funkcję w inny szereg Taylora. Możemy to zrobić, ponieważ $f^{(n)}(z_1)$ znane jest dla wszystkich n z pierwszego rozwinięcia funkcji wokół z_0. Promień zbieżności tego drugiego rozwinięcia na szereg wokół z_1 określony jest przez odległość od z_1 do najbliższej osobliwości. Postępując tym sposobem (rys. 6.16) możemy funkcję określić we wszystkich punktach z wyjątkiem tych, w których jest osobliwa. Przy takim postępowaniu potrzebujemy tylko znać na początek wartości funkcji analitycz-

nej w jakimś obszarze, dowolnie małym. Proces ten nazywa się *przedłużaniem analitycznym*. To tak, jak gdyby paleontolog zrekonstruował całego dinozaura ze skamieniałych pozostałości jego jednego pazura.



Rys. 6.16 Ciąg rozwinięć Taylora, które przedłużają analitycznie funkcję znaną pierwotnie w pewnym obszarze wokół z_0. Promień pierwszego rozwinięcia ograniczony jest przez osobliwość w α_0. Następne rozwinięcie Taylora wokół z_1 (które leży wewnątrz promienia zbieżności pierwszego rozwinięcia) ograniczone jest przez drugą osobliwość w α_1 itd.

Proces przedłużania analitycznego jest najlepszą demonstracją sztywnej struktury wewnętrznej funkcji analitycznych. Widzimy ponownie, jak bardzo są od siebie zależne wartości funkcji analitycznych: wartości funkcji analitycznej w jakimkolwiek obszarze na płaszczyźnie określają jej wartości wszędzie, gdzie jest ona analityczna. Ten plan rekonstrukcji wszystkich wartości funkcji analitycznej demonstruje również konieczność własności, która mówi, że wszystkie pochodne funkcji analitycznej są analityczne. Gdyby tak nie było, nie moglibyśmy przedłużyć funkcji analitycznej przez ciąg rozwinięć Taylora. Aby dało się to zrobić, niezbędna jest możliwość przybliżenia funkcji dowolnie dobrze, a to z kolei oznacza, że wszystkie jej pochodne muszą istnieć tak, aby szereg Taylora mógł być rozciągnięty dla uzyskania dowolnej dokładności. Natychmiastową konsekwencją faktu, iż funkcja analityczna może być przedłużona, jest to, że funkcja, która jest zerem wzdłuż dowolnej krzywej w obszarze R, w którym jest analityczna, musi być zerem wszędzie w R. Oznacza to, że jeżeli dwie funkcje $f(z)$ i $g(z)$ są równe na jakiejś krzywej w jednospójnym obszarze R, w którym obie są jednowartościowe i analityczne, wtedy muszą one być równe wszędzie w R, ponieważ $f(z)-g(z)$ jest zerem na tej krzywej, a więc wszędzie w R. Jak pamiętamy, funkcje analityczne e^z, $\sin z$, $\sinh z$ itp. były zdefiniowane dla zespolonych argumentów w sposób, który sprowadzał się do zwykłej definicji na osi rzeczywistej. Dyskutowana wyżej zasada wskazuje, że nie mogłyby one być inaczej zdefiniowane poza osią rzeczywistą tak, aby pozostać analitycznymi. Ponadto wyjaśnia to, czemu wszystkie znane tożsamości spełniane przez funkcje dla wartości rzeczywistych pozostają nadal słuszne na płaszczyźnie zespolonej.

Należy także zwrócić uwagę, że proces przedłużania analitycznego jest ściśle związany z problemem funkcji wielowartościowych i płatów Riemanna dyskutowanych w paragrafie 6.2. Przypuśćmy, że mamy dany analityczny szereg potęgowy dla pewnej funkcji w jakimś obszarze, np.

$$w(z) = \sqrt{z} = \sqrt{1-(1-z)} = 1-\frac{1}{2}(1-z)-\frac{1}{8}(1-z)^2+\ldots$$

w obszarze składającym się z wnętrza okręgu o jednostkowym promieniu i środku w $z = 1$. Jeżeli próbujemy przedłużać taką funkcję wzdłuż pewnych dróg w płaszczyźnie z (w powyższym przypadku wzdłuż dowolnej drogi okrążającej początek układu współrzędnych), to może się zdarzyć, że wracając do pierwotnego obszaru, w którym funkcja była zdefiniowana, nie powrócimy do pierwotnych wartości funkcji. Prowadzi to w naturalny sposób do konstrukcji płatów Riemanna dyskutowanych w paragrafie 6.2.

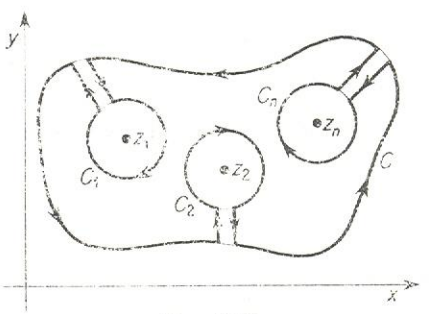
6.8. TEORIA RESIDUÓW — OBLICZANIE RZECZYWISTYCH CAŁEK OZNACZONYCH I SUMOWANIE SZEREGÓW

W tym paragrafie nie ma w zasadzie nic nowego. Wszystkie twierdzenia były już udowodnione; tutaj zastosujemy je po prostu na różne sposoby w celu wyznaczenia wartości pewnych rzeczywistych całek oznaczonych.

Twierdzenie o residuach. Całka z $f(z)$ wzdłuż zamkniętego konturu C zawierającego skończoną liczbę n punktów osobliwych funkcji $f(z)$ równa się sumie n całek z $f(z)$ po n okręgach, z których każdy otacza jeden i tylko jeden z punktów osobliwych.

Dowód. Jeżeli zastosujemy twierdzenie Cauchy'ego do obszaru pokazanego na rys. 6.17, to otrzymamy

$$\int_C f(z)dz + \int_{C_1} f(z)dz + \int_{C_2} f(z)dz + \ldots + \int_{C_n} f(z)dz = 0.$$



Rys. 6.17

Zauważcie, że kontury C_j przebiegane są na rys. 6.17 w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara. Wynika stąd, że

$$\oint_C f(z)dz = 2\pi i \sum_{j=1}^{n} R_j,$$

gdzie $R_j = (1/2\pi i) \oint_{C_j} f(z)dz$ nazywane jest *residuum* w punkcie z_j. W tym równaniu na R_j znak całki ma zwykły sens, tzn. kontury C_j przebiegane są w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara.

W powyższym twierdzeniu nie ma nic nowego z wyjątkiem nazwy „residuum". W celu obliczania residuów będziemy często używać całkowej formuły Cauchy'ego, albo formuły dla pochodnej funkcji analitycznej wyprowadzonej z formuły Cauchy'ego przez różniczkowanie.

Istnieje jednak inny, czasem użyteczny, sposób obliczania residuów. Rozwińmy funkcję $f(z)$ na szereg Laurenta wokół osobliwego punktu z_0, wtedy

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z-z_0)^n + \sum_{n=1}^{\infty} b_n (z-z_0)^{-n},$$

przy czym $b_1 = (1/2\pi i) \oint_{C_0} f(z)dz = R_0$. Pouczające jest sprawdzenie tego wzoru przez scałkowanie obu stron rozwinięcia Laurenta po okręgu, który zawiera z_0, ale nie zawiera innych osobliwości. Zamieniając kolejność sumowania i całkowania, co jest dozwolone, ponieważ szeregi te są jednostajnie zbieżne, otrzymujemy

$$\oint_{C_0} f(z)dz = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \oint_{C_0} (z-z_0)^n dz + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \oint_{C_0} \frac{dz}{(z-z_0)^n}.$$

Pierwsza całka znika dla wszystkich n, ponieważ $(z-z_0)^n$ jest analityczne. Dla $n = 1$ druga całka daje, przy pomocy wzoru całkowego Cauchy'ego, $2\pi i b_1$. Dla $n > 1$ napiszemy $b_n \equiv g(z)$, wtedy z równania (6.17) otrzymujemy

$$\oint_{C_0} \frac{b_n dz}{(z-z_0)^n} = \oint_{C_0} \frac{g(z)dz}{(z-z_0)^n} = \frac{2\pi i}{(n-1)!} g^{n-1}(z_0) = 0,$$

ponieważ $g(z) = b_n = \text{const}$. Zatem $(1/2\pi i) \oint_{C_0} f(z)dz = b_1 =$ residuum w z_0, tak więc residuum może być znalezione przez rozwinięcie funkcji na szereg Laurenta i wybranie współczynnika przy wyrazie $(z-z_0)^{-1}$. Nie ma w tym nic tajemniczego; jest to po prostu konsekwencja całkowej formuły Cauchy'ego.

Przykłady

1. $I = \oint_C e^{1/z} dz$, gdzie C = jednostkowy okrąg wokół początku układu oraz $e^{1/z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!\, z^n}$, a więc $b_1 = 1$, zatem $I = 2\pi i$.

2. $I = \oint \frac{3z^2+2}{z(z+1)} dz$, gdzie C jest okręgiem: $|z| = 3$. Najszybszym sposobem wykonania tej całki jest zapisanie jej w postaci

$$\oint_C = \oint_{C_0} + \oint_{C_1} = \oint_{C_0} \frac{(3z^2+2)/(z+1)}{z} dz + \oint_{C_1} \frac{(3z^2+2)/z}{(z+1)} dz,$$

gdzie C_0 jest małym okręgiem wewnątrz C okrążającym $z = 0$, ale nie $z = -1$ i C_1 jest małym okręgiem okrążającym $z = -1$, ale nie $z = 0$. Używając wtedy całkowej formuły Cauchy'ego do obliczenia obu całek otrzymujemy $I = 2\pi i(2-5) = -6\pi i$.

3. $I = \oint_C \frac{3z+2}{z(z+1)^3} dz$,

gdzie C jest okręgiem: $|z| = 3$. Rozdzielając całkę na części tak, jak poprzednio mamy

$$I = \oint_{C_0} \frac{(3z+2)/(z+1)^3}{z}\,dz + \oint_{C_1} \frac{(3z+2)/z}{(z+1)^3}\,dz = 2\pi i[2] + 2\pi i\left[\frac{f''(z)}{2!}\right]_{z=-1},$$

gdzie $f(z) = (3z+2)/z$. Zatem $f''(-1) = -4$, a więc residuum w $z = -1$ wynosi -2, stąd $I = 2\pi i(2-2) = 0$.

W tym ostatnim przykładzie obliczyliśmy residuum funkcji mającej postać $f(z)/(z-z_0)^n$ w punkcie osobliwym z_0 posługując się wzorem Cauchy'ego dla pochodnej funkcji analitycznej. W ogólności, jeżeli $f(z)$ jest analityczne wewnątrz pewnego konturu C otaczającego z_0 i na nim, to residuum funkcji $f(z)/(z-z_0)^n$ w z_0 wynosi

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{f(z)}{(z-z_0)^n}\,dz = \frac{f^{(n-1)}(z_0)}{(n-1)!}.$$

Pouczającą interpretację tego wzoru można uzyskać rozwijając funkcję $f(z)$ na szereg Taylora wokół z_0. Jest to możliwe, ponieważ funkcja $f(z)$ jest analityczna w pewnym obszarze wokół z_0, bo osobliwości są odosobnione, wtedy

$$f(z) = f(z_0) + f'(z_0)(z-z_0) + \ldots + \frac{f^{(n-1)}(z_0)(z-z_0)^{n-1}}{(n-1)!} + \ldots.$$

Jeżeli utworzymy teraz wielkość $f(z)/(z-z_0)^n$ dzieląc obie strony przez $(z-z_0)^n$, to współczynnik przy wyrazie $1/(z-z_0)$, który jest właśnie residuum funkcji $f(z)/(z-z_0)^n$, wynosi $f^{(n-1)}(z_0)/(n-1)!$, w zgodzie z powyżej podanym wzorem.

Zastosujemy teraz przedstawione metody do obliczania różnych całek określonych.

a) $\int_0^{2\pi} R(\cos\theta, \sin\theta)\,d\theta$, gdzie R jest funkcją wymierną, tzn.

$$R = \frac{a_1\cos\theta + a_2\sin\theta + a_3\cos^2\theta + \ldots}{b_1\cos\theta + b_2\sin\theta + b_3\cos^2\theta + b_4\sin^2\theta + \ldots}$$

W celu obliczenia tej całki położymy $z = e^{i\theta}$ tak, że

$$\cos\theta = \frac{1}{2}\left(z + \frac{1}{z}\right), \qquad \sin\theta = \frac{1}{2i}\left(z - \frac{1}{z}\right)$$

i $d\theta = -i(dz/z)$. Całka przyjmuje postać

$$-i\oint_C R\left[\frac{1}{2}\left(z+\frac{1}{z}\right), \frac{1}{2i}\left(z-\frac{1}{z}\right)\right]\frac{dz}{z},$$

gdzie C jest okręgiem jednostkowym.

Przykład

$$I = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{a+\cos\theta}, \qquad a > 1.$$

$$I = -i\oint_{|z|=1} \frac{1}{\left(a + \frac{z}{2} + \frac{1}{2z}\right)}\,\frac{dz}{z} = -2i\oint_{|z|=1} \frac{dz}{z^2 + 2az + 1}.$$

Mianownik może być rozłożony na czynniki jako $(z-\alpha)(z-\beta)$, gdzie

$$\alpha = -a+(a^2-1)^{1/2}, \quad \beta = -a-(a^2-1)^{1/2}.$$

Ponieważ $a > 1$, natychmiast widzimy, że $|\alpha| < 1$ i $|\beta| > 1$. Wyrażenie podcałkowe ma zatem jeden punkt osobliwy wewnątrz koła jednostkowego w $z = \alpha$ i

$$I = -2i(2\pi i)\frac{1}{\alpha-\beta} = \frac{2\pi}{(a^2-1)^{1/2}}.$$

Następnie rozważymy całki w postaci:

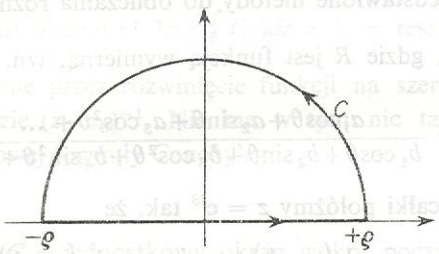
b) $\int_{-\infty}^{\infty} R(x)dx$, gdzie $R(x)$ jest funkcją wymierną, tzn. stosunkiem dwóch wielomianów, bez biegunów na osi rzeczywistej.

Jeżeli na osi rzeczywistej nie ma biegunów, wtedy całka istnieje, gdy stopień mianownika $R(x)$ jest przynajmniej o dwa wyższy od stopnia licznika. Oznacza to, że $|R(z)| \to 1/|z^2|$, gdy $|z| \to \infty$. Mamy zatem

$$\oint_C R(z)\,dz = \int_{-\varrho}^{\varrho} R(x)\,dx + \int_{\text{półokrąg}} R(z)\,dz$$

(patrz rys. 6.18). Gdy $\varrho \to \infty$, zamknięty kontur C obejmuje wszystkie bieguny $R(z)$ w górnej półpłaszczyźnie, a więc

$$\oint_C R(z)\,dz = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res} R(z),$$



Rys. 6.18

gdzie notacja ta ma oznaczać utworzenie sumy wszystkich residuów $R(z)$ z górnej półpłaszczyzny. Teraz w granicy dużych $|z|$

$$\left|\int_{\text{półokrąg}} R(z)\,dz\right| \leqslant \int \frac{|\text{const}|\varrho\,d\theta}{\varrho^2} = \frac{|\text{const}|}{\varrho},$$

co dąży do zera, gdy $\varrho \to \infty$, zatem

$$\oint_C R(z)\,dz = \int_{-\infty}^{\infty} R(x)dx = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res} R(z).$$

Kiedy mówimy, że całka po „konturze w nieskończoności" znika, mamy w rzeczywistości na myśli, że dla dowolnego danego ε istnieje taki skończony kontur C, iż $\left|\oint_C f(z)dz\right| < \varepsilon$.

Jeżeli tak jest, mówimy, że całka po konturze w ∞ jest zerem; w rzeczywistości wszystkie kontury są skończone.

Przykład

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2+1)^2}.$$

Aby znaleźć zera mianownika w górnej półpłaszczyźnie, musimy rozwiązać równanie $z^2 = -1$. Otrzymujemy $z = \pm i$. Tylko pierwiastek $+i$ znajduje się w górnej półpłaszczyźnie, zatem

$$I = \oint \frac{dz}{(z+i)^2(z-i)^2} = \frac{2\pi i}{1!} \frac{d}{dz}\left(\frac{1}{(z+i)^2}\right)\Big|_{z=i} = (2\pi i)\cdot(-2)\cdot \frac{1}{(z+i)^3}\Big|_{z=i} = \frac{\pi}{2}.$$

c) Inną ważną klasą całek są całki typu $\int_{-\infty}^{\infty} R(x)e^{ix}dx$. Jest to całka Fouriera wymiernej funkcji $R(x)$. Jej część rzeczywistą i zespoloną określają całki

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x)\cos x\,dx \quad \text{i} \quad \int_{-\infty}^{\infty} R(x)\sin x\,dx.$$

Zachowujemy założenie, że na osi rzeczywistej nie ma biegunów. Tym razem także rozważamy całkę $\oint_C R(z)e^{iz}dz$ po półokręgu. Ponieważ $|e^{iz}| = e^{-y} \leqslant 1$ dla każdego punktu w górnej półpłaszczyźnie, całka ta będzie istniała, jeżeli funkcja wymierna $R(x)$ ma w nieskończoności zero przynajmniej drugiego rzędu. Wtedy, jak poprzednio całka po nieskończonym półokręgu znika pozostawiając

$$\oint_C R(z)\,e^{iz}dz = \int_{-\infty}^{\infty} R(x)\,e^{ix}dx = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res}[R(z)\,e^{iz}].$$

Przykład

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikr}}{k^2+\mu^2}dk.$$

Jeżeli $r > 0$, wtedy kładąc $x = rk$ stwierdzamy, że całka wynosi

$$I = r\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix}}{x^2+(\mu r)^2}dx = r\oint \frac{e^{iz}}{z^2+(\mu r)^2}dz =$$

$$= 2\pi i r \sum_{y>0} \operatorname{Res}\left(\frac{e^{iz}}{z^2+(\mu r)^2}\right) = 2\pi i r \frac{e^{iz}}{z+i\mu r}\Big|_{z=i\mu r} = \pi\frac{e^{-\mu r}}{\mu}.$$

Zauważcie, że

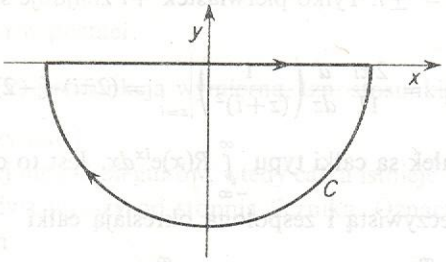
$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos kr}{k^2+\mu^2}dk$$

i zatem powyższy rezultat jest faktycznie niezależny od znaku r. Wobec tego

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikr}}{k^2+\mu^2}dk = \pi\frac{e^{-\mu|r|}}{\mu}.$$

Innym sposobem stwierdzenia tego może być obliczenie całki przy założeniu, że $r < 0$. Wtedy musimy rozważyć kontur w dolnej półpłaszczyźnie, ponieważ $|e^{ikr}| = e^{-(\mathrm{Im}\,k)r}$, co jest ograniczone tylko dla $\mathrm{Im}(k) < 0$, jeżeli $r < 0$. Jak poprzednio dla dostatecznie dużego półokręgu (rys. 6.19)

$$\oint_C = \int_{-\infty}^{\infty} = -2\pi i \sum_{y<0} \mathrm{Res}.$$



Rys. 6.19

Znak minus bierze się stąd, że kontur C przebiegany jest zgodnie z ruchem wskazówek zegara. Zatem

$$I = -2\pi i r \frac{e^{iz}}{z - i\mu r}\bigg|_{z=-i\mu r} = \frac{\pi e^{\mu r}}{\mu},$$

co dla $r < 0 = \pi e^{-\mu|r|}/\mu$. Residuum obliczono tutaj dla jedynego bieguna w dolnej półpłaszczyźnie $z = -i\mu r$.

d) Problem stanowią całki typu $\int_{-\infty}^{\infty} R(x)e^{i\alpha x}dx$, gdzie funkcja wymierna $R(x)$ ma w nieskończoności zero rzędu pierwszego. Całki

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x)\cos\alpha x\,dx \quad \text{i} \quad \int_{-\infty}^{\infty} R(x)\sin\alpha x\,dx$$

stanowią rzeczywistą i urojoną część powyższej całki.

Z powyższej dyskusji nie jest jasne, czy całki te istnieją. Lemat Jordana, który teraz udowodnimy, mówi nam, że one istnieją. Znów zakładamy, że na osi rzeczywistej nie ma biegunów.

Lemat Jordana. Jeżeli dla $\varrho \to \infty$ (na rys. 6.20), $|R(z)| \to 0$ jednostajnie w θ dla $0 < \theta < \pi$, wtedy $\lim_{\varrho\to\infty} \int_{|z|=\varrho} R(z)e^{i\alpha z}dz = 0$ dla $\alpha > 0$.

Dowód. Lemat ten prawie udowodniliśmy w paragrafie o związkach dyspersyjnych. Tam jednakże korzystaliśmy z analityczności $R(z)$ w górnej półpłaszczyźnie. Tutaj skorzystamy z założenia o jednostajnej zbieżności $|R(z)|$ do zera. Niech $M(\varrho)$ będzie maksimum $|R(z)|$ na półokręgu $|z| = \varrho$. Wtedy stwierdzenie, że $|R(z)| \to 0$ jednostajnie oznacza, że $|R(z)| \leqslant M(\varrho)$, gdzie $\lim_{\varrho\to\infty} M(\varrho) = 0$, niezależnie od θ.

Niech

$$I = \int_{|z|=\varrho} R(z)e^{i\alpha z}dz,$$

wtedy

$$|I| \leqslant M(\varrho) \int_0^{\pi} |e^{i\alpha(\varrho\cos\theta + i\varrho\sin\theta)}|\,|\varrho i e^{i\theta}|\,d\theta = \varrho M(\varrho) \int_0^{\pi} e^{-\alpha\varrho\sin\theta}\,d\theta.$$

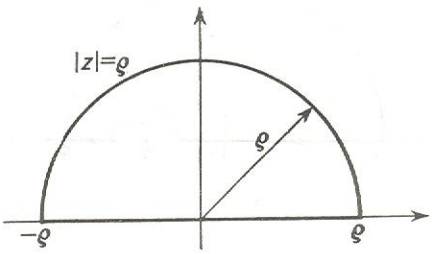
Postępując z tą całką dokładnie tak jak w paragrafie 6.6 otrzymujemy

$$|I| < \pi M(\varrho)\frac{(1-e^{-\alpha\varrho})}{\alpha} \to 0, \quad \text{gdy} \quad \varrho \to \infty,$$

ponieważ $\alpha > 0$ i $M(\varrho) \to 0$, gdy $\varrho \to \infty$. Otrzymujemy zatem wzór

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x)e^{i\alpha x}\,dx = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res}[R(z)e^{i\alpha z}]$$

dla $\alpha > 0$. Dla $\alpha < 0$ przy wyprowadzaniu rozważamy kontur leżący tylko w dolnej półpłaszczyźnie ($y < 0$) i do powyższego wzoru należy wprowadzić odpowiednie zmiany.



Rys. 6.20

Przykład

$$I = \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2+\mu^2}d\mathbf{k} = \int_0^{2\pi} kd\phi \int_0^{\pi} k\sin\theta d\theta \int_0^{\infty} dk \frac{e^{ik\cdot|\mathbf{r}|\cos\theta}}{k^2+\mu^2} =$$

$$= 2\pi \int_{-1}^{1} dt \int_0^{\infty} dk \frac{k^2 e^{ik|\mathbf{r}|t}}{k^2+\mu^2} = \frac{2\pi}{i|\mathbf{r}|}\int_0^{\infty} dk \frac{k(e^{ik|\mathbf{r}|}-e^{-ik|\mathbf{r}|})}{k^2+\mu^2} = \frac{2\pi}{i|\mathbf{r}|}\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{ke^{ik|\mathbf{r}|}}{k^2+\mu^2}.$$

Lemat Jordana mówi nam, że dla zespolonych k całka ta po nieskończonym półokręgu znika. Zatem

$$I = \frac{2\pi}{i|\mathbf{r}|} 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res} \frac{ke^{ik|\mathbf{r}|}}{k^2+\mu^2} = \frac{4\pi^2}{|\mathbf{r}|}\frac{i\mu e^{i\cdot i\mu|\mathbf{r}|}}{2i\mu} = \frac{2\pi^2}{|\mathbf{r}|}e^{-\mu|\mathbf{r}|}, \tag{6.51}$$

ponieważ w górnej półpłaszczyźnie znajduje się tylko jeden biegun ($k = +i\mu$).

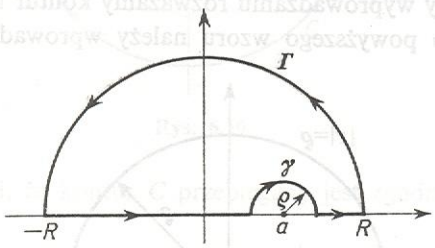
e) Jak dotąd nie dopuszczaliśmy, aby funkcja podcałkowa miała bieguny na osi rzeczywistej. Jeżeli $Q(z)$ jest funkcją meromorficzną w górnej półpłaszczyźnie, jeżeli na osi rzeczywistej funkcja ta ma tylko bieguny rzędu pierwszego (tzn. proste bieguny) i jeżeli $Q(z)$ zachowuje się w nieskończoności jak którekolwiek z wyrażeń podcałkowych klasy b, c lub d, wtedy metody zastosowane w tych przypadkach mogą być rozszerzone na przypadek całek typu

$$P\int_{-\infty}^{\infty} Q(x)\,dx,$$

gdzie P oznacza wartość główną Cauchy'ego, która występuje tu ze względu na obecność biegunów na osi rzeczywistej.

Niech $Q(z)$ ma pojedynczy prosty biegun na osi rzeczywistej $z = a$. Rozważmy wygięty kontur C (rys. 6.21) składający się z małego półokręgu γ wokół punktu a, dużego półokręgu Γ wokół początku układu i dwóch prostoliniowych odcinków na osi rzeczywistej od $-R$ do $a-\varrho$ i od $a+\varrho$ do R. Weźmiemy γ tak małe, że obejmuje ono tylko biegun znajdujący się w a. Γ jest na tyle duże, że obejmuje wszystkie bieguny w górnej półpłaszczyźnie i na tyle duże, że całka po Γ dąży do zera, gdy $R \to \infty$. Mamy wtedy

$$\Big(\int_{\Gamma} + \int_{-R}^{a-\varrho} + \int_{\gamma} + \int_{a+\varrho}^{R}\Big) Q(z)\,dz = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res} Q(z).$$



Rys. 6.21

Biorąc granicę dla $R \to \infty$ otrzymujemy

$$\Big[\lim_{R\to\infty}\Big(\int_{-R}^{a-\varrho} + \int_{a+\varrho}^{R}\Big) + \int_{\gamma}\Big] Q(z)\,dz = P\int_{-\infty}^{\infty} Q(x)\,dx + \int_{\gamma} Q(z)\,dz = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res} Q(z).$$

Rozważamy teraz $\int_{\gamma} Q(z)dz$. Na γ, $z = a+\varrho e^{i\theta}$, a więc

$$\int_{\gamma} Q(z)\,dz = \int_{\pi}^{0} Q(a+\varrho e^{i\theta})\,\varrho e^{i\theta} i\,d\theta.$$

Ponieważ $Q(z)$ ma w a prosty biegun, zawiera ono czynnik $(z-a)^{-1}$. Możemy zatem napisać $Q(z) = \phi(z)/(z-a)+\psi(z)$, gdzie $\phi(z)$ i $\psi(z)$ są analityczne w $z = a$ i w sąsiedztwie tego punktu. Widać, że $\psi(z)$ nie daje wkładu do całki po konturze γ dla $\varrho \to 0$, a ponieważ $z-a = \varrho e^{i\theta}$, to mamy:

$$\int_{\gamma} Q(z)\,dz = \int_{\pi}^{0} \phi(a+\varrho e^{i\theta})\,i\,d\theta.$$

Rozwijamy teraz ϕ na szereg Taylora wokół a (jest ono tam analityczne)

$$\phi(a+\varrho e^{i\theta}) = \phi(a)+\text{człony zależne od } \varrho,$$

zatem dla $\varrho \to 0$ otrzymujemy

$$\int_{\gamma} Q(z)\,dz = \int_{\pi}^{0} \phi(a)\,i\,d\theta = -i\pi\phi(a).$$

$\phi(a)$ jest oczywiście residuum $Q(z) = \phi(z)/(z-a)$ w $z = a$, a więc ostateczny wynik może być napisany w postaci

$$P\int_{-\infty}^{\infty} Q(x)\,dx = 2\pi i \sum_{y>0} \operatorname{Res} Q(z) + \pi i \sum_{y=0} \operatorname{Res} Q(z),$$

gdzie $\sum_{y=0} \operatorname{Res} Q(z)$ oznacza sumę residuów $Q(z)$ w każdym z prostych biegunów tej funkcji na osi rzeczywistej (uogólniając przypadek do kilku prostych biegunów).

Przykład

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x}\,dx.$$

Wartość tej całki może być określona z następującej prostej zależności

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix}}{x}\,dx = \pi i \sum_{y=0} \operatorname{Res}\left(\frac{e^{iz}}{z}\right) = \pi i.$$

W tym przypadku jedyny biegun leży na osi rzeczywistej w $z = x = 0$. Przyrównując część rzeczywistą i urojoną otrzymujemy

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos x}{x}\,dx = 0,$$

co jest trywialnym wynikiem, bo funkcja podcałkowa jest nieparzysta, ponadto

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x}\,dx = \pi$$

otrzymaliśmy poprzednio z teorii transformat Hilberta. W tym wzorze symbol P jest zbyteczny, bo funkcja podcałkowa nie ma bieguna. Wiele całek zawierających $\sin x$ lub $\cos x$ można obliczyć tak, jak to tutaj zrobiliśmy, zastępując funkcję trygonometryczną przez e^{iz} i biorąc następnie część rzeczywistą i urojoną.

f) W następnej kolejności rozważymy całki typu $\int_0^{\infty} x^{\lambda-1} R(x)dx$, gdzie $R(z)$ jest wymierne, analityczne w $z = 0$ i nie ma biegunów na dodatniej osi rzeczywistej i gdzie $|z^{\lambda} R(z)| \to 0$ jednostajnie, gdy $|z| \to 0$ i gdy $|z| \to \infty$. Ponieważ przypadek całkowitego λ może być rozważony przy pomocy metod opisanych powyżej założymy, że λ nie jest równe liczbie całkowitej.

Zagadnienie to wiąże się z punktami rozgałęzienia i cięciami, ponieważ $z^{\lambda-1}$ nie jest w ogólności funkcją jednowartościową. Niech $z^{\lambda-1}$ oznacza następującą gałąź funkcji potęgowej

$$z^{\lambda-1} = \exp[(\lambda-1)\log z] = \exp[(\lambda-1)(\log r + i\theta)],$$

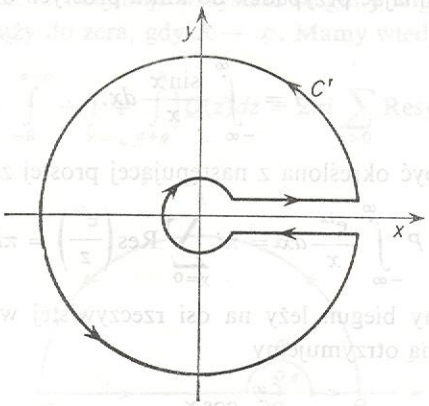
gdzie $0 < \theta < 2\pi$ i $r > 0$, wtedy

$$z^{\lambda-1} = r^{\lambda-1} e^{i(\lambda-1)\theta}, \quad 0 < \theta < 2\pi, \quad r > 0.$$

Cięcie zostało poprowadzone wzdłuż dodatniej osi rzeczywistej. Dla $\theta = 0$ funkcja potęgowa ma wartość

$$z^{\lambda-1} = r^{\lambda-1} = x^{\lambda-1}.$$

Rozważmy teraz całkę konturową $\oint_{C'} z^{\lambda-1}R(z)dz$, gdzie zamknięty kontur C' jest pokazany na rys. 6.22. C' składa się tu z małego okręgu wokół $z = 0$, którego promień będzie później ściągnięty do zera i dużego okręgu, który zostanie później rozszerzony do nieskończoności oraz dwóch całek wzdłuż dodatniej osi rzeczywistej w kierunkach przeciwnych i po przeciwnych krawędziach cięcia. Ponieważ funkcja podcałkowa jest nieciągła na cięciu, te dwie



Rys. 6.22

całki nie zniosą się. W celu wykonania całki należy wszędzie określić fazę wyrażenia $z^{\lambda-1}$. Dokonaliśmy tego powyżej definiując ją jako równą 0 na dodatniej osi rzeczywistej, a więc $z^{\lambda-1} = x^{\lambda-1}$, co jest zgodne ze zwykłą umową. Wobec tego tuż poniżej osi rzeczywistej $z^{\lambda-1} = x^{\lambda-1}e^{i2\pi(\lambda-1)}$. Całki po małym i dużym okręgu znikają, ponieważ $|z^{\lambda}R(z)| \to 0$ dla $|z| \to 0$ i $|z| \to \infty$,
zatem

$$\oint_{C'} z^{\lambda-1}R(z)dz = -\int_0^{\infty} e^{2\pi i(\lambda-1)}x^{\lambda-1}R(x)dx + \int_0^{\infty} x^{\lambda-1}R(x)dx,$$

gdzie pierwsza całka po prawej stronie jest wkładem od prostej poniżej osi x, a druga jest wkładem od prostej powyżej osi x. Razem całki te dają

$$[1-e^{2\pi i(\lambda-1)}]\int_0^{\infty} x^{\lambda-1}R(x)dx = \left(\frac{-2i\sin\pi\lambda}{e^{-\pi i\lambda}}\right)\int_0^{\infty} x^{\lambda-1}R(x)dx.$$

Ponieważ

$$\oint_{C'} z^{\lambda-1}R(z)dz = 2\pi i \sum_{\text{wewnątrz } C'} \text{Res}[z^{\lambda-1}R(z)],$$

otrzymujemy

$$\int_0^{\infty} x^{\lambda-1}R(x)dx = \frac{-\pi e^{-\pi i\lambda}}{\sin\pi\lambda} \sum_{\text{wewnątrz } C'} \text{Res}[z^{\lambda-1}R(z)] = \frac{\pi(-1)^{\lambda-1}}{\sin\pi\lambda} \sum_{\text{wewnątrz } C'} \text{Res}[z^{\lambda-1}R(z)], \tag{6.52}$$

bo $e^{-i\pi\lambda} = (-1)^{\lambda}$. Dalej nie możemy już się posunąć bez wyspecyfikowania funkcji $R(z)$. Bardzo prostym przykładem tego typu jest całka

$$I = \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1}}{1+x}\,dx, \qquad 0 < \lambda < 1.$$

Po obliczeniu tej całki użyjemy jej do uzyskania pewnych rezultatów związanych z funkcjami beta i gamma.

Po pierwsze, ponieważ $0 < \lambda < 1$ i $|z^{\lambda}/(1+z)| \to 0$ dla $|z| \to \infty$ i $|z| \to 0$, zatem

$$\int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1}}{1+x}\,dx = \frac{\pi(-1)^{\lambda-1}}{\sin\pi\lambda}\,\mathrm{Res}\left(\frac{z^{\lambda-1}}{1+z}\right)_{z=-1} = \frac{\pi}{\sin\pi\lambda}.$$

Funkcja beta $\beta(x, y)$ zdefiniowana jest przez

$$\beta(x, y) \equiv \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}\,dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}, \qquad x, y > 0, \tag{6.53}$$

gdzie $\Gamma(x)$ jest funkcją gamma:

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}\,dt. \tag{6.54}$$

Dowód tożsamości (6.53) można znaleźć w wielu podręcznikach z analizy; zauważmy że

$$\beta(x, 1-x) = \Gamma(x)\Gamma(1-x) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{-x}\,dt, \qquad \text{jeżeli} \qquad 0 < x < 1.$$

Jeżeli w ostatniej całce dokonamy zamiany zmiennych

$$t = \frac{u}{1+u} = 1 - \frac{1}{1+u},$$

przyjmuje ona postać

$$\int_0^\infty \frac{u^{x-1}}{1+u}\,du,$$

co dokładnie pokrywa się z całką, którą dopiero co obliczyliśmy, wtedy

$$\beta(x, 1-x) = \Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin\pi x}, \qquad \text{dla} \qquad 0 < x < 1. \tag{6.55}$$

Wzór ten może być uogólniony drogą przedłużenia analitycznego na wszystkie z w płaszczyźnie zespolonej. W szczególności dla $x = 1/2$ mamy $\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\right]^2 = \pi$, zatem

$$\pi^{1/2} = \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \equiv \int_0^\infty t^{-1/2}e^{-t}\,dt = 2\int_0^\infty e^{-u^2}\,du = \int_{-\infty}^\infty e^{-u^2}\,du, \tag{6.56}$$

gdzie dokonaliśmy podstawienia $t = u^2$.

Na zakończenie tego paragrafu o teorii residuów pokażemy, jak można dokonywać sumowania szeregów przy pomocy całkowania po konturach. Wynik, który otrzymamy, opie-

rał się będzie na tym, że $\pi\operatorname{ctg}\pi z$ ma bieguny rzędu pierwszego w zerach funkcji $\sin\pi z$ (tzn. w $z = n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$) i residuum każdego z tych biegunów wynosi 1.

Twierdzenie. Niech $f(z)$ będzie funkcją meromorficzną i niech C będzie konturem, który obejmuje zera funkcji $\sin\pi z$, znajdujące się w punktach $z = \varrho, \varrho+1, \ldots, n$. Jeżeli założymy, że bieguny funkcji $f(z)$ i $\sin\pi z$ nie pokrywają się, to

$$\sum_{m=\varrho}^{n} f(m) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)\,dz - \sum_{\substack{\text{bieguny } f(z)\\ \text{wewnątrz } C'}} \operatorname{Res}[\pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)]. \tag{6.57}$$

Dowód

$$\oint_C \pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)\,dz = 2\pi i \sum (\text{Residua wszystkich biegunów funkcji podcałkowej}) =$$

$$= 2\pi i\left[\sum_{m=\varrho}^{n} f(m) + \sum_{\substack{\text{bieguny } f(z)\\ \text{wewnątrz } C'}} \operatorname{Res}[\pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)]\right]$$

c.b.d.o.

Przykład. Użyjemy tego twierdzenia do udowodnienia równoważności funkcji Langevina ($\operatorname{ctgh} x - 1/x$) i sumy

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2+n^2\pi^2}.$$

Posłużymy się następnie tym twierdzeniem w celu wyrażenia $\sin\theta$ przez nieskończony iloczyn, co stanowi samo w sobie bardzo interesującą formułę.

Kładąc $f(z) = 2x/(x^2+z^2\pi^2)$ i używając powyższego wzoru otrzymujemy

$$\sum_{m=-N}^{N} \frac{2x}{x^2+m^2\pi^2} = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)\,dz - \sum_{\substack{\text{bieguny } f(z)\\ \text{wewnątrz } C}} \operatorname{Res}[\pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)],$$

gdzie C jest jakimś zamkniętym konturem, powiedzmy prostokątem obejmującym punkty $z = -N, -N+1, \ldots 0, 1, \ldots N-1, N$. Niech teraz długość i szerokość prostokąta C dążą do ∞. Podczas tego

$$\left|\frac{1}{2\pi i}\oint_C \pi\operatorname{ctg}(\pi z) f(z)\,dz\right| \leqslant \frac{1}{2}\oint_C |\operatorname{ctg}\pi z|\left|\frac{2x}{x^2+z^2\pi^2}\right||dz| \to 0.$$

W celu stwierdzenia, że ta całka znika, gdy $|z| \to \infty$ zauważmy, iż

$$|\operatorname{ctg}\pi z| = \frac{|\cos\pi z|}{|\sin\pi z|} = \left(\frac{\cos^2\pi x+\sinh^2\pi y}{\sin^2\pi x+\sinh^2\pi y}\right)^{1/2}.$$

Można teraz uzyskać dowolnie wielką dokładność w sumowaniu tego szeregu przez takie wybranie prostokąta, że jego pionowe boki przecinają oś x w dostatecznie dużej nieparzystej wielokrotności jednej drugiej, na przykład $\left(10^{97}+\frac{1}{2}\right)$, gdzie $\cos\pi\left(10^{97}+\frac{1}{2}\right) = 0$ i $\sin\pi\left(10^{97}+\frac{1}{2}\right) = 1$. Wtedy na tych bokach prostokąta

$$|\operatorname{ctg}\pi z| = \left|\left(\frac{\sinh^2\pi y}{1+\sinh^2\pi y}\right)^{1/2}\right| = |\operatorname{tgh}\pi y| \leqslant 1.$$

Na poziomych bokach prostokąta $\lim_{|z|\to\infty} |\operatorname{ctg}\pi z| = 1$, zatem wyrażenie podcałkowe dąży do $|1/z^2|$ dla $|z| \to \infty$ i całka znika.

Jeżeli weźmiemy nieskończony kontur prostokątny, to

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{2x}{x^2+m^2\pi^2} = -\operatorname{Res}\left[\frac{(\pi\operatorname{ctg}\pi z)2x}{x^2+z^2\pi^2}\right]_{z=\pm ix/\pi} =$$

$$= -\frac{2x}{\pi}\left[\frac{\operatorname{ctg}\pi(ix/\pi)}{2ix/\pi} + \frac{\operatorname{ctg}\pi(-ix/\pi)}{-2ix/\pi}\right] = 2i\operatorname{ctg} ix = 2\operatorname{ctgh} x.$$

Zatem

$$2\sum_{m=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2+m^2\pi^2} + \frac{2}{x} = 2\operatorname{ctgh} x$$

lub

$$\operatorname{ctgh} x - \frac{1}{x} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2x}{x^2+m^2\pi^2}, \tag{6.58}$$

co dowodzi sformułowanej na początku zależności.

Ten konkretny wzór, oprócz zilustrowania opisanej techniki sumowania, nie jest szczególnie interesujący. Jednak, gdy scałkujemy obie strony w granicach od 0 do x, to otrzymujemy

$$\sum_{m=1}^{\infty} \ln\left(1+\frac{x^2}{m^2\pi^2}\right) = \ln\left(\frac{\sinh x}{x}\right).$$

Stąd

$$\ln\left(\frac{\sinh x}{x}\right) = \sum_{m=1}^{\infty} \ln\left(1+\frac{x^2}{m^2\pi^2}\right) = \ln\prod_{m=1}^{\infty}\left(1+\frac{x^2}{m^2\pi^2}\right),$$

a więc

$$\frac{\sinh x}{x} = \prod_{m=1}^{\infty}\left(1+\frac{x^2}{m^2\pi^2}\right). \tag{6.59}$$

Możemy uogólnić ten rezultat na wszystkie wartości z w płaszczyźnie zespolonej drogą przedłużenia analitycznego. Kładąc wtedy $x = i\theta$ (θ rzeczywiste) otrzymujemy

$$\sin\theta = \theta\prod_{n=1}^{\infty}\left(1-\frac{\theta^2}{n^2\pi^2}\right). \tag{6.60}$$

To wyrażenie zawierające nieskończony iloczyn pokazuje w sposób jawny wszystkie zera funkcji $\sin\theta$. Stanowi ono kompletną faktoryzację szeregu Taylora. Faktycznie wyrażenie to może być użyte jako definicja funkcji sinus.

Przyrównując współczynniki przy członie θ^3 po obu stronach powyższego równania otrzymujemy użyteczny wzór

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}. \tag{6.61}$$

Jest to szczególna wartość funkcji dzeta Riemanna

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^z}. \tag{6.62}$$

Istnieje wiele specyficznych trików użytecznych przy wykonywaniu całek i sumowaniu szeregów. Dokonaliśmy przeglądu tylko podstawowych metod, ale czytelnik nie będzie miał trudności w zrozumieniu żadnej szczególnej procedury, z którą może się zetknąć, jeżeli rozumie ten paragraf. Zadanie 31 dostarcza zastosowań wszystkich podstawowych metod rachunku residuów, które były rozwinięte powyżej.

6.9. ZASTOSOWANIA DO FUNKCJI SPECJALNYCH I PRZEDSTAWIEŃ CAŁKOWYCH

W tym paragrafie użyjemy wzorów na pochodną funkcji analitycznej w celu znalezienia *funkcji tworzących* pewnych funkcji specjalnych i ich *wzorów Rodriguesa*. Wyprowadzimy także *przedstawienia całkowe* dla funkcji Bessela i wielomianów Legendre'a.

Funkcje Bessela

Funkcja $e^{(1/2)z(w-1/w)}$ jest analityczna wszędzie w płaszczyźnie w z wyjątkiem $w = 0$, może być więc rozwinięta na szereg Laurenta w dowolnym pierścieniu $R_2 < |w| < R_1$ bez względu na to, jak małe jest R_2 (> 0) lub jak duże R_1. Oznaczając współczynniki rozwinięcia przez $J_n(z)$, mamy

$$e^{(1/2)z(w-1/w)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z) w^n. \tag{6.63}$$

Współczynniki rozwinięcia są funkcjami zmiennej zespolonej z. Oznaczenie przyjęte dla nich uprzedza fakt, że okażą się one funkcjami Bessela o całkowitym wskaźniku. Innymi słowami $e^{(1/2)z(w-1/w)}$ jest funkcją tworzącą dla funkcji Bessela.

Udowodnimy teraz, że funkcje $J_n(z)$ rzeczywiście spełniają różniczkowe równanie Bessela

$$z^2 \frac{d^2 J_n}{dz^2} + z \frac{dJ_n}{dz} + (z^2 - n^2) J_n = 0. \tag{6.64}$$

Po drodze znajdziemy całkowe przedstawienie dla funkcji Bessela i także jawną dla nich formułę.

Z twierdzenia Laurenta

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(w)}{(w - w_0)^{n+1}} dw, \tag{6.65}$$

gdzie C jest dowolnym zamkniętym konturem zawartym w pierścieniu. Przyjmiemy C w postaci jednostkowego okręgu $w = e^{i\theta}$, wtedy w równaniu (6.65) $w_0 = 0$ i $f(w) = e^{(1/2)z(w-1/w)}$. Na jednostkowym okręgu $w - 1/w = 2i\sin\theta$, zatem

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{iz\sin\theta} e^{-in\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i(n\theta - z\sin\theta)} d\theta =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n\theta - z\sin\theta) d\theta - \frac{i}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(n\theta - z\sin\theta) d\theta.$$

Druga całka jest jednak zerem, ponieważ wyrażenie podcałkowe jest nieparzyste w θ. Ponieważ pierwsza funkcja podcałkowa jest parzysta w θ, to

$$J_n(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \cos(n\theta - z\sin\theta)\,d\theta. \tag{6.66}$$

Jest to całkowe przedstawienie funkcji $J_n(z)$, która jak teraz udowodnimy przez podstawienie do równania (6.64), jest rozwiązaniem równania Bessela. Sprawdzenie tego jest bardziej zawiłe niż można się spodziewać, oprzemy się więc pokusie aby „pozostawić to czytelnikowi". Zachęcamy oczywiście czytelnika, aby sam spróbował, nim będzie czytał dalej. Mamy

$$J_n'(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\sin(n\theta - z\sin\theta)\,d\theta = -\frac{1}{\pi}\cos\theta\sin(n\theta - z\sin\theta)\Big|_0^{\pi} + \tag{6.67a}$$

$$+\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \cos\theta\cos(n\theta - z\sin\theta)\,(n - z\cos\theta)\,d\theta, \tag{6.67b}$$

gdzie dokonaliśmy całkowania przez części. Pierwszy człon zeruje się. Różniczkując ponownie równanie (6.67a) mamy

$$J_n''(z) = -\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \sin^2\theta\cos(n\theta - z\sin\theta)\,d\theta.$$

Tworzymy teraz wielkość $z^2(J_n'' + J_n) + zJ_n' - n^2 J_n$, posługując się równaniem (6.67b) na $J_n'(z)$. Wyrażenie to musi być tożsamościowo równe zeru, jeżeli $J_n(z)$ są funkcjami Bessela. Otrzymujemy

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \cos(n\theta - z\sin\theta)\,[z^2 - z^2\sin^2\theta + z\cos\theta(n - z\cos\theta) - n^2]\,d\theta =$$

$$= \frac{-n}{\pi}\int_0^{\pi} [\cos(n\theta - z\sin\theta)\,(n - z\cos\theta)]\,d\theta.$$

Funkcja $\sin(n\theta - z\sin\theta)$ jest funkcją pierwotną wyrażenia podcałkowego. Znika ona zarówno dla 0 jak i π, dowód jest więc pełny: $J_n(z)$ są rozwiązaniami równania Bessela. Łatwo pokazać, że

$$\begin{aligned} J_0(0) &= 1, \quad J_n(0) = 0 \quad \text{dla} \quad n \neq 0, \\ J_1'(0) &= \tfrac{1}{2}, \quad J_n'(0) = 0 \quad \text{dla} \quad n \neq 1, \end{aligned} \tag{6.68}$$

a więc te funkcje są rzeczywiście rozwiązaniami równania Bessela znanymi jako *funkcje Bessela pierwszego rodzaju* (które są analityczne w początku układu współrzędnych) o wskaźniku n (całkowitym).

Zwykle rozwiązanie równania Bessela wyrażane jest jako nieskończona suma, a nie jako całka. Wyprowadzimy teraz z funkcji tworzącej rozwiązanie typu nieskończonego szeregu

$$e^{(1/2)z(w-1/w)} = e^{(1/2)zw}e^{-z/2w} = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(z/2)^r w^r}{r!}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-z/2)^m w^{-m}}{m!} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} w^n J_n(z).$$

W celu uzyskania $J_n(z)$, współczynnika przy $w^n (n > 0)$, mnożymy każdy człon przy w^{-m} w drugim szeregu przez człon w^{n+m} w pierwszym szeregu i sumujemy następnie po wszystkich m, więc

$$J_n(z)w^n = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{n+m}w^{n+m}(-z/2)^m w^{-m}}{(n+m)!m!} = \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{(-1)^m(z/2)^{2m+n}}{(n+m)!m!}\right] w^n,$$

zatem

$$J_n(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m(z/2)^{2m+n}}{(n+m)!m!}. \tag{6.69}$$

Jest to rozwiązanie typu nieskończonego szeregu dla całkowitych $n \geqslant 0$. Czytelnik może pokazać, że dla całkowitych n

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z). \tag{6.70}$$

Rozwiązania te są więc liniowo zależne i musi istnieć inny zbiór liniowo niezależnych rozwiązań. Nazywane są one *funkcjami Neumanna* i oznaczane przez $N_n(z)$. Z równań Bessela i funkcji Bessela można skonstruować całą rodzinę równań i funkcji stanowiących rozwiązania, jeżeli dopuścimy niecałkowite i połówkowe wartości wskaźnika n. Również rozmaite liniowe kombinacje funkcji Bessela i Neumanna dla rzeczywistych i urojonych argumentów prowadzą do *zmodyfikowanych funkcji Bessela* i *funkcji Hankela*. Sferyczne funkcje Bessela, które będą dyskutowane w rozdziale 7, są jeszcze jednym zbiorem funkcji definiowanych za pomocą funkcji Bessela. Każdy z tych zbiorów funkcji tworzy *układ Sturma–Liouville'a*. Naszym celem tutaj nie jest dostarczenie wyczerpującego i wyczerpującego dla czytelnika opisu tych funkcji, pragniemy jedynie wyprowadzić i przedyskutować podstawowe rezultaty aby czytelnik mógł dogrzebać się konkretnych faktów potrzebnych mu w swojej pracy z obszernych rozpraw na ten temat.

Wielomiany Legendre'a

Pokazaliśmy poprzednio, że wielomiany Legendre'a zdefiniowane przez wzór Rodriguesa

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n,$$

są *ortogonalnym zbiorem funkcji* na odcinku $[-1, 1]$ i spełniają *równanie Legendre'a*

$$(1-x^2)P_n'' - 2xP_n' + n(n+1)P_n = 0.$$

W paragrafie 1.8 wspomniano, choć nie było to udowodnione z wyjątkiem P_0, P_1 i P_2, że *funkcją tworzącą* wielomianów Legendre'a jest

$$\frac{1}{(1-2xt+t^2)^{1/2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n, \quad 0 < t < 1, \quad |x| \leqslant 1. \tag{6.71}$$

Porównując to równanie z równaniem (1.101) czytelnik zauważy, że położyliśmy $t \equiv r'/r$ i $x \equiv \cos\theta$. Udowodnimy teraz ten związek dla wszystkich n. Zaczniemy od przedstawienia

wzoru Rodriguesa jako całki konturowej, posługując się wzorem na n-tą pochodną funkcji analitycznej,

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(1-x^2)^n = \frac{(-1)^n}{2^n}\frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{(1-z^2)^n}{(z-x)^{n+1}}\,dz. \tag{6.72}$$

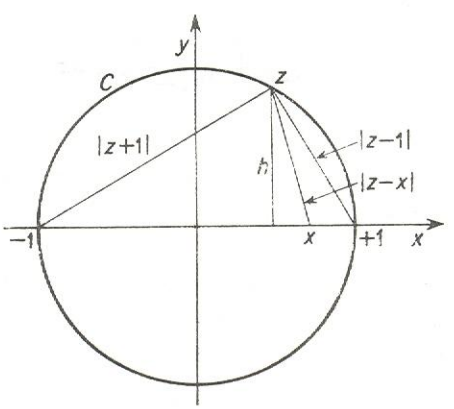
Skorzystaliśmy tu z faktu, że funkcja $(1-z^2)^n$ jest całkowita (C jest zamkniętym konturem, który obejmuje punkt x). To całkowe przedstawienie wielomianów Legendre'a znane jest jako *całkowy wzór Schläfli*. Jeżeli utworzymy teraz szereg $S = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n$, używając całkowego przedstawienia dla $P_n(x)$ i zamienimy porządek całkowania i sumowania, to otrzymamy

$$S = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{dz}{z-x}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{2^n}t^n\left(\frac{1-z^2}{z-x}\right)^n.$$

Jest to prosty szereg geometryczny, który jest zbieżny i daje się łatwo wysumować, jeżeli

$$\left|\frac{t}{2}\,\frac{1-z^2}{z-x}\right| < 1.$$

Musimy jednak pokazać, że kontur C obejmujący punkt x może być tak wybrany, aby było to zawsze słuszne dla wszystkich x i t z ich odpowiednich zakresów zmienności. Niech C będzie jednostkowym okręgiem oraz z dowolnym punktem na C, a x niech znajduje się



Rys. 6.23

na osi rzeczywistej wewnątrz lub na C tak, jak pokazuje rys. 6.23. Powierzchnia trójkąta prostokątnego z wierzchołkami w -1, z, $+1$ dana jest przez

$$A = \frac{1}{2}|z+1|\,|z-1| = \frac{1}{2}|1-z^2|.$$

Dana jest ona także przez $\frac{1}{2}(2h) = h$; ale $|z-x| \geqslant h$ dla wszystkich z i x, a więc

$$|z-x| \geqslant h = A = \frac{1}{2}|1-z^2| \Rightarrow \left|\frac{1}{2}\cdot\frac{1-z^2}{z-x}\right| \leqslant 1,$$

skąd $$\left|\frac{t}{2}\frac{1-z^2}{z-x}\right|<1,$$

bo $t<1$. Możliwy jest także czysto algebraiczny dowód, ale ten dowód geometryczny jest prostszy. Sumujemy teraz szereg geometryczny i uzyskujemy

$$S=\frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{dz}{z-x}\frac{1}{1-\left[\frac{-t}{2}\frac{(1-z)^2}{(z-x)}\right]}=-\frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{2/t\,dz}{z^2-\frac{2}{t}z-\left(1-\frac{2}{t}x\right)}.$$

Mianownik ma dwa pierwiastki

$$z_\pm=\frac{1}{t}\pm\left(\frac{1}{t^2}-\frac{2x}{t}+1\right)^{1/2}=\frac{1}{t}[1\pm(1-2xt+t^2)^{1/2}].$$

Pamiętając, że $0<t<1$ i $-1\leqslant x\leqslant 1$, łatwo nam pokazać iż $z_+>1$ i $-1<z_-<1$, a więc z_- jest pierwiastkiem obejmowanym przez kontur. Obliczając residuum w z_- mamy

$$S=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n=\frac{-1}{2\pi i}\frac{2}{t}2\pi i\frac{1}{z_--z_+}=\frac{1}{(1-2xt+t^2)^{1/2}},$$

c.b.d.o.

Dokładnie w ten sam sposób można otrzymać funkcje tworzące *wielomianów Hermite'a* i *wielomianów Laguerre'a* z odpowiednich wzorów Rodriguesa (patrz zadania 36 i 37).

Wróćmy do całkowego przedstawienia Schläfli dla wielomianów Legendre'a

$$P_n(x)=\frac{1}{2\pi i}\oint_C\frac{(z^2-1)^n}{2^n(z-x)^{n+1}}\,dz. \tag{6.73}$$

Można udowodnić bezpośrednio z tego wzoru, że $P_n(x)$ spełniają równanie różniczkowe Legendre'a. Już jednak dowodziliśmy, że $P_n(x)$ dane przez wzór Rodriguesa spełniają równanie Legendre'a, ominiemy więc ten dowód. Tutaj wyprowadzimy inne przedstawienie całkowe: *całkę rzeczywistą*.

Jako kontur C bierzemy okrąg wokół x o promieniu $|(x^2-1)^{1/2}|$, wtedy dla każdego punktu z na C możemy położyć $z=x+(x^2-1)^{1/2}e^{i\theta}$, gdzie θ wzrasta od $-\pi$ do π. Dokonując tego podstawienia we wzorze Schläfli otrzymujemy

$$P_n(x)=\frac{1}{2\pi i}\int_{-\pi}^{\pi}\left[\frac{(x-1+(x^2-1)^{1/2}e^{i\theta})(x+1+(x^2-1)^{1/2}e^{i\theta})}{2(x^2-1)^{1/2}e^{i\theta}}\right]^n id\theta,$$

gdzie napisaliśmy $(z^2-1)^n$ w postaci $[(z-1)(z+1)]^n$ przed podstawieniem $z=x+(x^2-1)^{1/2}e^{i\theta}$. Wtedy całe wyrażenie w nawiasie powyżej upraszcza się po krótkich przekształceniach do $x+(x^2-1)^{1/2}\cos\theta$, co jest parzystą funkcją θ. Mamy zatem rzeczywiste przedstawienie całkowe dla wielomianów Legendre'a, które zawdzięczamy Laplace'owi

$$P_n(x)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}[x+(x^2-1)^{1/2}\cos\theta]^n\,d\theta,\qquad\text{dla}\qquad |x|\leqslant 1. \tag{6.74}$$

Zauważcie, w jak oczywisty sposób wynika z powyższego wzoru, że $P_n(1)=1$ i $P_n(-1)=$

Tabela 6.1. *Własności ortogonalnych funkcji powstających z układów Sturma–Liouville'a*

Nazwa i zastosowanie fizyczne	Wzór Rodriguesa	Funkcja tworząca	Równanie różniczkowe	Równanie różniczkowe w postaci Sturma–Liouville'a	Ortonormalność
Wielomiany Legendre'a: [a) Rozkład na multipole, b) ∇^2 we współrzędnych sferycznych]	$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$	$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n = \frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}$, $0<t<1$	$(1-x^2)P_n''-2xP_n'+n(n+1)P_n=0$	$\frac{d}{dx}[(1-x^2)P_n']+n(n+1)P_n=0$	$\int_{-1}^{1} P_nP_m dx = \delta_{nm}\frac{2}{2n+1}$
Wielomiany Hermite'a [Kwantowy oscylator]	$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n}$	$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}t^n = e^{-t^2+2tx}$, $t>0$	$H_n''-2xH'+2nH_n=0$	$\frac{d}{dx}(e^{-x^2}H_n')+2ne^{-x^2}H_n=0$	$\int_{-\infty}^{\infty} H_nH_m e^{-x^2}dx = \delta_{nm}\sqrt{\pi}\,2^n n!$
Wielomiany Laguerre'a [Atom wodoru (równanie radialne)]	$L_n(x) = e^x\frac{d^n}{dx^n}x^n e^{-x}$	$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{L_n(x)}{n!}t^n = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t}$, $0<t<1$	$xL_n''+(1-x)L_n'+nL_n=0$	$\frac{d}{dx}(xe^{-x}L_n')+ne^{-x}L_n=0$	$\int_0^{\infty} L_nL_m e^{-x}dx = \delta_{nm}(n!)^2$
	Przedstaw. szeregowe				
Funkcje Bessela (o wskaźniku całkowitym) [∇^2 we współrzędnych cylindrycznych]	$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m(x/2)^{2m+n}}{(n+m)!\,m!}$	$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x)t^n = e^{(1/2)x(t-1/t)}$, $t>0$	$x^2J_n''+xJ_n'+(x^2-n^2)J_n=0$	$\frac{d}{dx}(xJ_n')+\left(x-\frac{n^2}{x}\right)J_n=0$	Patrz zadanie 5.23
Funkcje trygonometryczne [Klasyczny oscylator]	$f_n = \sin(nx) = \sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{(nx)^{2m+1}}{(2m+1)!}$, $g_n = \cos(nx) = \sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\frac{(nx)^{2m}}{(2m)!}$		$f_n''+n^2f_n=0$, $g_n''+n^2g_n=0$	$\frac{d}{dx}(f_n')+n^2f_n=0$, $\frac{d}{dx}(g_n')+n^2g_n=0$	$\int_{-\pi}^{\pi} f_nf_m dx = \delta_{nm}\pi$, $\int_{-\pi}^{\pi} g_ng_m dx = \delta_{nm}\pi$, $\int_{-\pi}^{\pi} f_ng_m dx = 0$

$= (-1)^n$. Kształcące jest wyliczenie P_0, P_1 i P_2 z powyższego wzoru. Chociaż $(x^2-1)^{1/2}$ jest czysto urojone dla $|x| < 1$, wszystkie człony zawierające $(x^2-1)^{1/2}$ w powyższym wzorze znikają przy wykonywaniu całki, bo $\int_0^{\pi} \cos^m\theta d\theta = 0$ dla nieparzystych m.

Zakończymy ten paragraf tablicą 6.1. Podsumowuje ona pewne bardziej użyteczne informacje o funkcjach specjalnych używanych w fizyce matematycznej.

ZADANIA

1. Niech $f(z) = \dfrac{xy^2(x+iy)}{x^2+y^2}$, gdzie dla $z \neq 0$, $f(0) = 0$.

Pokaż, gdzie funkcja ta, jeżeli gdziekolwiek jest: a) różniczkowalna, b) analityczna.

2. Pokaż, że liczby zespolone z_1, z_2 i z_3 leżą na linii prostej wtedy i tylko wtedy, gdy $(z_1-z_3)/(z_2-z_3)$ jest liczbą rzeczywistą.

Wskazówka: zadanie to może być rozwiązane bardzo prosto, jeżeli rozważa się liczby zespolone geometrycznie jako wektory. Może ono być także rozwiązane algebraicznie, ale metoda geometryczna jest z pewnością prostsza.

3. Udowodnij, że $u = \sin x \cosh y + 2\cos x \sinh y + x^2 - y^2 + 4xy$ jest funkcją harmoniczną i znajdź stowarzyszoną funkcję harmoniczną v. Znajdź zespoloną funkcję zmiennej zespolonej z taką, że $f(z) = u+iv$.

4. a) Wyznacz wszystkie wartości stałych a, b, c, d, dla których wielomian $u(x, y) = ax^3+bx^2y+cxy^2+dy^3$ jest harmoniczny, tzn. spełnia dwuwymiarowe równanie Laplace'a w całej płaszczyźnie.

b) Znajdź $v(x, y)$ harmoniczną funkcję stowarzyszoną do $u(x, y)$.

c) Znajdź funkcję analityczną $f(z) = u(x, y)+iv(x, y)$, gdzie $z = x+iy$.

5. Zespolona funkcja $E^*(z)$ jest zdefiniowana przez $E^*(z) = E_x(x, y)-iE_y(x, y)$, gdzie E_x i E_y są składowymi pola elektrycznego w dwóch wymiarach. Pokaż, że statyczne równania Maxwella w próżni pociągają za sobą analityczność $E^*(z)$ jako funkcji z.

6. Pokaż, że jeżeli napiszemy $z = re^{i\theta}$, to równania Cauchy'ego–Riemanna przyjmują w zmiennych r i θ postać

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial \theta}, \qquad \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta}.$$

7. Przeanalizuj funkcję $z^{1/3}$ z punktu widzenia pojęcia płatów Riemanna dyskutowanych w paragrafie 6.2.

8. Korzystając z wyników zadania 6.6 pokaż, że $\log z$, $z^{1/2}$ i $z^{1/3}$ są analityczne wszędzie na ich odpowiednich płatach Riemanna z wyjątkiem punktu $z = 0$.

9. Pokaż, że dwupłatowa powierzchnia Riemanna dla $w(z) = \sqrt{(z-a)(z-b)}$ może być rozcięta i połączona wzdłuż odcinka $[a, b]$ osi rzeczywistej (załóż dla wygody, że a i b są rzeczywiste). Zdefiniuj odpowiednie $w(z)$ za pomocą biegunowego przedstawienia liczb zespolonych, łącznie z definicją zakresu zmienności faz.

10. Znajdź powierzchnię Riemanna, na której $\sqrt{z-a}+\sqrt{z-b}$ (a, b rzeczywiste dodatnie) jest jednowartościową funkcją analityczną wszędzie z wyjątkiem punktów $z = a$ i $z = b$.

11. Znajdź powierzchnię Riemanna, na której $\sqrt{(z-1)(z-2)(z-3)}$ jest jednowartościową funkcją analityczną z wyjątkiem $z = 1, 2, 3$.

12. Pokaż, że $w(z) = z^{\alpha}(0 < \alpha < 1)$, gdzie α jest niewymierne, można uczynić funkcją jednowartościową tylko na powierzchni Riemanna o nieskończonej liczbie płatów. Zastanów się jak te płaty powinny być połączone.

13. Pokaż, że zgodnie z definicjami paragrafu 6.2

$$\operatorname{tg}(\operatorname{arctg} z) = z, \quad \log(e^z) = z + 2\pi n i.$$

14. *Twierdzenie o wartości średniej.* Pokaż, że w dwuwymiarowej przestrzeni wolnej od ładunków, wartość potencjału elektrostatycznego w dowolnym punkcie równa jest średniej potencjału na powierzchni dowolnego koła o środku w tym punkcie. Przeprowadź ten dowód rozważając potencjał jako część rzeczywistą funkcji analitycznej.

15. Znajdź wszystkie osobliwości funkcji $\operatorname{tgh} z$.

16. Wyjaśnij dlaczego jedna z podanych poniżej całek ma sens, a druga jest pozbawiona sensu. Oblicz tę, która ma sens, zapisując wynik w postaci $a+bi$.

$$\text{a) } \int_{-1}^{1} z^* dz, \qquad \text{b) } \int_{0}^{i} \sin 2z\, dz.$$

17. Oblicz korzystając z całkowego wzoru Cauchy'ego.

a) $\oint_C \frac{e^z dz}{z - \pi i/2}$, C = granica kwadratu o bokach wyznaczonych przez $x = \pm 2, y = \pm 2$.

b) $\oint_C \frac{dz}{z^2+2}$, C = okrąg o promieniu 1 i środku w i.

(Oba kontury skierowane są przeciwnie do ruchu wskazówek zegara.)

18. Pokaż, że

a) $\oint_C \frac{z^4+2z+1}{(z-z_0)^4} dz = 8\pi i z_0$, gdzie C jest dowolnym zamkniętym konturem obejmującym z_0.

b) $\oint_C \frac{\cosh z}{z^{n+1}} dz = \frac{2\pi i}{n!} \frac{[1+(-1)^n]}{2}$, gdzie C jest dowolnym zamkniętym konturem obejmującym początek układu.

19. Całkowy wzór Cauchy'ego dla wielomianu. Niech $P(z)$ będzie wielomianem. Używając twierdzenia Cauchy'ego udowodnij, że $\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{P(z)}{z-a} dz = P(a)$, gdzie C obejmuje punkt a.

Wskazówka: Rozważ

$$Q(z) = \frac{P(z) - P(a)}{z-a},$$

co jest także wielomianem (dlaczego?) i oblicz z tego wyrażenia całkę, która jest ci potrzebna.

20. Udowodnij, że jeżeli $f(z)$ jest analityczne na zamkniętym konturze C i wewnątrz niego, a α i β są dwoma różnymi punktami wewnątrz C, to

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-\alpha)(z-\beta)} dz = \frac{f(\alpha)}{\alpha-\beta} + \frac{f(\beta)}{\beta-\alpha}.$$

Przy pomocy tego wyniku wydedukuj twierdzenie Liouville'a, które mówi, że funkcja musi być stałą.

[*Wskazówka*: Jeżeli dla dowolnych α i β, $f(\alpha) = f(\beta)$, to $f(z) = \text{const.}$]

21. *Twierdzenie Morera.* Twierdzenie Morera jest w pewnym sensie odwrotnością twierdzenia Cauchy'ego–Goursata. Mówi ono, że jeżeli funkcja $f(z)$ jest ciągła w obszarze R i jeżeli $\oint f(z)dz = 0$ dla dowolnej krzywej C w R, to $f(z)$ jest analityczne w R. Udowodnij to twierdzenie. Twierdzenie Morera dostarcza nam innego sposobu stwierdzania analityczności funkcji. Możemy użyć go zamiast sprawdzania warunków Cauchy'ego–Riemanna i czasami kłopotliwego dodatkowego warunku analityczności — ciągłości pochodnej $f(z) = u+iv$, to znaczy ciągłości czterech pierwszych pochodnych u i v.

22. *Odwzorowania konforemne.* Rozważ funkcję analityczną $w = f(z)$ jako transformację zespolonej płaszczyzny z na zespoloną płaszczyznę w. Przyjmij, że dwie krzywe F_z^1 i F_z^2 na płaszczyźnie z przecinają się pod kątem α w z_0. Udowodnij, że przetransformowane krzywe F_w^1 i F_w^2 na płaszczyźnie w przecinają się pod tym samym kątem, jeżeli $f'(z_0) \neq 0$. Warunek, że $f'(z_0) \neq 0$ ma podstawowe znaczenie dla konforemności w punkcie z_0. Rozważ funkcję analityczną $w = z^2$, dla której $w'(0) = 0$. Osie współrzędnych, które przechodzą przez początek układu współrzędnych i tworzą kąt 90°, odwzorowane są na proste, które tworzą kąt 180°. Kąt między dwoma dowolnymi prostymi przechodzącymi przez początek układu współrzędnych będzie na płaszczyźnie w podwojony. Odwzorowanie nie jest zatem konforemne w początku układu. Jednakże jest ono konforemne w każdym innym punkcie.

23. *Wzór Poissona.*

a) Niech $f(z)$ będzie funkcją analityczną wewnątrz i na okręgu C o promieniu a. Udowodnij, że

$$f(z') = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \left[\frac{f(z)}{z-z'} - \frac{f(z)}{z-(a^2/z'^*)}\right]dz,$$

jeżeli $z' = re^{i\phi}$ i $r < a$, we współrzędnych biegunowych umieszczonych w środku okręgu C.

b) Przy pomocy powyższego wzoru wyprowadź wzór Poissona:

$$f(re^{i\phi}) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \frac{a^2-r^2}{a^2+r^2-2ar\cos(\theta-\phi)} f(ae^{i\theta})\,d\theta.$$

c) Udowodnij przy pomocy wzoru Poissona, że jeżeli funkcja jest analityczna wewnątrz i na okręgu, to wartość funkcji w środku okręgu, $f(0)$, jest średnią jej wartości granicznych na okręgu (twierdzenie o wartości średniej).

d) Startując teraz z równania

$$f(z') = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \left[\frac{f(z)}{z-z'} + \frac{f(z)}{z-(a^2/z'^*)}\right]dz$$

[które różni się od równania w części (a) znakiem +, ale jest słuszne z tego samego powodu] udowodnij, że [używając ewentualnie części (c)]

$$f(z') = f(0) - \frac{iar}{\pi}\int_0^{2\pi} \frac{\sin(\theta-\phi)f(ae^{i\theta})}{a^2+r^2-2ar\cos(\theta-\phi)}\,d\theta.$$

e) Kładąc $f(z') = f(re^{i\phi}) = u(r, \phi)+iv(r, \phi)$, itd. wyprowadź (d) ze wzorów

$$u(a, \phi) = u(0)+\frac{1}{2\pi}P\int_0^{2\pi} v(a, \theta)\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta-\phi}{2}\right)d\theta,$$

$$v(a, \phi) = v(0)-\frac{1}{2\pi}P\int_0^{2\pi} u(a, \theta)\operatorname{ctg}\left(\frac{\theta-\phi}{2}\right)d\theta.$$

Wzory te wyrażają część rzeczywistą funkcji analitycznej na okręgu przez jej część urojoną na tym okręgu i na odwrót. Istnieje wiele dalszych zastosowań tych wzorów.

24. *Alternatywne podejście do transformat Hilberta.*

a) Pokaż, że jeżeli $f(z)$ jest analityczne w górnej półpłaszczyźnie z i jeżeli $a = \alpha+i\beta$, przy czym $\beta > 0$, to

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_C\left[\frac{f(z)}{z-a}+\frac{f(z)}{z-a^*}\right]dz = f(a),$$

gdzie C jest półokręgiem o dowolnie dużym promieniu, którego podstawą jest oś rzeczywista.

b) Jeżeli $|f(z)| \to 0$ dla $|z| \to \infty$ w górnej półpłaszczyźnie, to pokaż, że

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{f(x)}{x-a}+\frac{f(x)}{x-a^*}\right]dx = f(a).$$

Dodaj ułamki, aby otrzymać

$$\frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(x-\alpha)f(x)}{(x-\alpha)^2+\beta^2}dx = f(a).$$

c) Jeżeli $f(z) = u(x, y)+iv(x, y)$, to pokaż, że (b) redukuje się do

$$u(\alpha, \beta) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(x-\alpha)v(x, 0)}{(x-\alpha)^2+\beta^2}dx,$$

$$v(\alpha, \beta) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(x-\alpha)u(x, 0)}{(x-\alpha)^2+\beta^2}dx.$$

d) Pokaż stąd, że jeżeli położymy $\beta = 0$, to

$$u(\alpha, 0) = \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{v(x, 0)}{x-\alpha}dx, \qquad v(\alpha, 0) = -\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{u(x, 0)}{x-\alpha}dx,$$

co z wyjątkiem notacji stanowi parę transformat Hilberta wyprowadzonych w paragrafie 6.5 [równ. (6.19a) i (6.19b)].

25. Rozważ całkę

$$I_{\pm} = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-A}^{+B}\frac{f(x)}{x \pm i\varepsilon}dx,$$

gdzie A i B są dodatnimi liczbami rzeczywistymi, a $\varepsilon > 0$.

a) Pokaż, że $I_{\pm}$ można zapisać w postaci

$$I_{\pm} = \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-A}^{-\delta}\frac{xf(x)}{x^2+\varepsilon^2}dx+\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{+\delta}^{+B}\frac{xf(x)}{x^2+\varepsilon^2}dx+\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\delta}^{+\delta}\frac{xf(x)}{x^2+\varepsilon^2}dx \pm i\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\int_{-A}^{B}\frac{f(x)}{x^2+\varepsilon^2}dx,$$

gdzie δ jest małą liczbą dodatnią.

b) Użyj wiarogodnych argumentów (na przykład tego typu, jak w paragrafie 5.3) w celu pokazania, że $I_{\pm}$ można zapisać w postaci

$$I_{\pm} = \int_{-A}^{-\delta}\frac{f(x)}{x}dx+\int_{\delta}^{+B}\frac{f(x)}{x}dx+f(0)\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\delta}^{\delta}\frac{x\,dx}{x^2+\varepsilon^2}\mp if(0)\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\int_{-A}^{B}\frac{dx}{x^2+\varepsilon^2}.$$

c) Pokaż, że trzeci człon w równaniu (b) znika z powodu symetrii. Wykonując w sposób jawny czwartą całkę pokaż, że

$$I_{\pm} = P\int_{-A}^{B}\frac{f(x)}{x}dx \mp if(0)\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{B}{\varepsilon}\right)+\operatorname{arctg}\left(\frac{A}{\varepsilon}\right)\right].$$

d) Połóż $\varepsilon \to 0$ i użyj definicji funkcji δ, aby ostatecznie napisać

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-A}^{B}\frac{f(x)}{x\pm i\varepsilon}dx = P\int_{-A}^{+B}\frac{f(x)}{x}dx \mp i\pi f(0) = P\int_{-A}^{B}\frac{f(x)}{x}dx \mp i\pi\int_{-A}^{B}\delta(x)f(x)dx.$$

Relacja ta jest czasem zapisywania raczej tajemniczo jako

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{x\pm i\varepsilon} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x).$$

26. Rozwiąż równanie całkowe

$$\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{u(x)}{x-t}dx = -\frac{1}{1+t^2} \equiv -v(t),$$

znajdując transformatę Hilberta funkcji $v(t)$. Znajdź funkcję zespoloną $f(z) = u(x,y)+$ $+iv(x,y)$ taką, że $u(x,0) \equiv u(x) = \operatorname{Re}(f(z))$ i $v(x,0) \equiv v(x) = \operatorname{Im}(f(z))$ oraz sprawdź, że ta funkcja ma dwie własności (co to są za własności?), które gwarantują, że $u(x)$ i $v(x)$ są parą transformat Hilberta.

27. Wyprowadź wzór dyspersyjny dla $f(z)$, jeżeli $|f(z)/z|$ dąży do stałej, gdy $|z| \to \infty$.

28. Udowodnij, że jednostajnie zbieżny szereg funkcji analitycznych może być scałkowany człon po członie. Pokaż stąd, że jednostajnie zbieżny szereg funkcji analitycznych jest funkcją analityczną.

Wskazówka: użyj twierdzenia Morera z zadania 22.

29. Znajdź rząd bieguna w początku układu, residuum tego bieguna i całkę po (małym) konturze otaczającym początek układu, ale nie zawierającym wewnątrz żadnej innej osobliwości, dla następujących funkcji:

a) $\operatorname{ctg} z$, b) $\operatorname{cosec}^2 z \log(1-z)$, c) $\dfrac{z}{\sin z - \operatorname{tg} z}$.

30. Jakie są położenia i natura osobliwości oraz ich residua następujących funkcji w płaszczyźnie z, wyłączając punkt w nieskończoności?

a) $f_1(z) = \dfrac{\operatorname{ctg}\pi z}{(z-1)^2}$, b) $f_2(z) = \dfrac{1}{z(e^z-1)}$.

Uwaga: obie te funkcje mają nieodosobnione, a zatem istotne osobliwości w nieskończoności, ponieważ początek układu jest dla funkcji $f_1(1/z)$ i $f_2(1/z)$ punktem granicznym biegunów.

31. Zadania na obliczanie rzeczywistych całek określonych przez całkowanie po konturze

a) $$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{a+b\sin\theta} = \frac{2\pi}{(a^2-b^2)^{1/2}}, \quad a > b > 0,$$

b) $$\int_0^{2\pi} \frac{\sin^2\theta\, d\theta}{a+b\cos\theta} = \frac{2\pi}{b^2}[a-(a^2-b^2)^{1/2}], \quad a > b > 0,$$

c) $$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(a+b\cos\theta)^2} = \frac{2\pi a}{(a^2-b^2)^{3/2}}; \quad a > b > 0,$$

d) $$\int_0^{\infty} \frac{dx}{1+x^4} = \frac{\pi}{2\sqrt{2}},$$ e) $$\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{(a^2+x^2)^3} = \frac{\pi}{16a^3},$$

f) $$\int_0^{\infty} \frac{\sin x\, dx}{x(a^2+x^2)} = \frac{\pi}{2a^2}(1-e^{-a}),$$ g) $$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi,$$

h) $$\int_0^{\infty} \frac{x^{2a-1}}{b^2+x^2} dx = \frac{\pi b^{2(a-1)}}{2} \operatorname{cosec} \pi a, \quad 0 < a < 1,$$

i) $$\int_0^{\infty} \frac{\log x}{b^2+x^2} dx = \frac{\pi \log b}{2b},$$

j) $$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(\omega'-\omega_0)^2+a^2} \frac{1}{\omega'-\omega} d\omega' = \frac{\pi}{a} \frac{\omega_0-\omega}{(\omega_0-\omega)^2+a^2},$$

k) $$\int_0^{\infty} \frac{dx}{x^3+a^3} = \frac{2\pi}{3a^2\sqrt{3}}.$$

l) Rozważ całkę rzeczywistą

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

gdzie τ jest rzeczywiste. W tym przypadku łatwo pokazać, że

$$G(x, x', \tau) = \frac{1}{(4\pi\tau)^{1/2}} e^{-(x-x')^2/4\tau}.$$

Pokaż, że ten wynik jest nadal słuszny w przypadku, gdy τ jest czysto urojone.

Wskazówka: wartość całki

$$\int_0^{\infty} e^{-iu^2} du$$

można znaleźć rozważając całkę z e^{-z^2} po granicy kołowego sektora $0 \leqslant \theta \leqslant \pi/4$, $0 \leqslant r \leqslant R$. Udowodnij, że w granicy $R \to \infty$ wkład od całki po kołowym łuku dąży do zera. Wkłady od pozostałych prostoliniowych odcinków konturu dają wartość całki niezbędną w zadaniu.

Uwaga: Ta całka konturowa dostarcza wartości dwóch oznaczonych całek rzeczywistych

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin(x^2)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \cos(x^2)\,dx = (\pi/2)^{1/2}$$

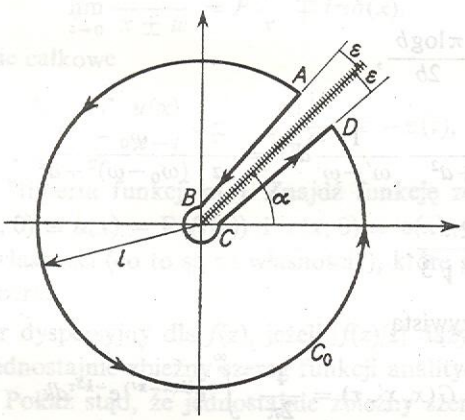
poprzez wzięcie części rzeczywistej i urojonej. Drogą zamiany zmiennych $x^2 = t$ wynik ten może być przekształcony do postaci

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin t}{\sqrt{t}}\,dt = \int_0^{\infty} \frac{\cos t}{\sqrt{t}}\,dt = (\pi/2)^{1/2}.$$

32. Widzieliśmy w jaki sposób funkcja $\pi\operatorname{ctg}(\pi z)$ może być użyta do sumowania pewnych szeregów. Jest ona jednak bezużyteczna, jeżeli szereg jest naprzemienny. Pokaż jak można sumować naprzemienne szeregi używając funkcji $\pi\operatorname{cosec}(\pi z)$ zamiast $\pi\operatorname{ctg}(\pi z)$. Użyj ogólnego wyniku aby pokazać, że

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1}\frac{1}{n^2} = \pi^2/12.$$

33. Rozważ zagadnienie obliczenia całki z funkcji $z^{1/2}$ od A do D wzdłuż kołowej drogi C pokazanej na rys. 6.24. Cięcie wybieramy wzdłuż promienia $\theta = \alpha$ i definiujemy $z^{1/2} \equiv r^{1/2}e^{i\theta/2}$ dla $\alpha \leqslant \theta < \alpha+2\pi$. Porównaj ten wynik z wartością otrzymaną z całkowania $z^{1/2}$ od A do D wzdłuż drogi $ABCD$ typu „dziurki od klucza". Czy wyniki się zgadzają? Czy powinny się zgadzać? Dlaczego?



Rys. 6.24 Kontur potrzebny w zadaniu 6.34. Kąty ε określające kształt drogi typu „dziurka od klucza" są dowolnie małe. Promień okręgu C_0 wynosi l i cięcie biegnie wzdłuż kierunku $\theta = \alpha_0$.

34. Rozważ następującą funkcję reakcji $G(t)$, która znika dla ujemnych wartości argumentu i która dla wartości dodatnich dana jest przez

$$G(t) = G_0\frac{\sin^2\mu t}{t^{3/2}}.$$

Zwróć uwagę, że funkcja ta spełnia warunki (a), (b) i (c) z początku paragrafu 6.6. Pokaż, że transformata Fouriera $g(\omega)$ dana jest wzorami:

$$g(\omega) = \frac{i-1}{2}G_0\left[\sqrt{\omega} - \frac{1}{2}\sqrt{\omega+2\mu} - \frac{1}{2}\sqrt{\omega-2\mu}\right], \qquad \omega \geqslant 2\mu,$$

$$g(\omega) = \frac{i-1}{2} G_0\left[\sqrt{\omega} - \frac{1}{2}\sqrt{\omega+2\mu}\right] + \frac{i+1}{2} G_0\left[\frac{1}{2}\sqrt{2\mu-\omega}\right], \quad 0 \leqslant \omega \leqslant 2\mu$$

$$g(-\omega) = g^*(\omega).$$

Pokaż, że funkcja o wartościach zespolonych, która redukuje się na osi rzeczywistej do powyższego wyrażenia ma postać

$$g(z) = \frac{i-1}{2} G_0\left[\sqrt{z} - \frac{1}{2}\sqrt{z+2\mu} - \frac{1}{2}\sqrt{z-2\mu}\right].$$

Widzimy zatem, że $g(z)$ ma na osi rzeczywistej punkty rozgałęzienia; ewentualność, której nie wykluczają warunki (a), (b) i (c). Zauważ, że możemy wybrać cięcia tak, aby leżały w dolnej półpłaszczyźnie, dzięki czemu funkcja $g(z)$ jest analityczna w górnej półpłaszczyźnie.

Wskazówka: będzie tu użyteczna całka wymieniona w uwadze po zadaniu 6.32.

35. Funkcja Θ (lub funkcja schodkowa) jest zdefiniowana przez

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla} \quad x < 0, \\ \frac{1}{2} & \text{dla} \quad x = 0, \\ 1 & \text{dla} \quad x > 0. \end{cases}$$

Udowodnij, że

a) $\Theta(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega x}}{\omega} d\omega$, b) $\frac{d\Theta(x)}{dx} = \delta(x)$.

Wskazówka: patrz równanie (5.63).

36. Wielomiany Laguerre'a generowane są przez funkcję tworzącą

$$\psi(x, t) = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n(x)}{n!} t^n, \quad 0 < t < 1.$$

Dane są one bezpośrednio wzorem

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}), \quad 0 \leqslant x \leqslant \infty,$$

analogicznym do wzoru Rodriguesa dla wielomianów Legendre'a.

a) Różniczkując funkcję tworzącą względem x [otrzymując $(1-t)\psi' = -t\psi$] wyprowadź równanie rekurencyjne

$$L_n' - nL_{n-1}' = -nL_{n-1}.$$

Różniczkując $\psi(x, t)$ względem t można otrzymać inne równanie rekurencyjne. Pokaż, że

$$L_{n+1} - (2n+1-x)L_n + n^2 L_{n-1} = 0.$$

b) Z tych dwóch związków rekurencyjnych wyprowadź różniczkowe równanie Laguerre'a

$$xL_n'' + (1-x)L_n' + nL_n = 0.$$

c) Pokaż, że $L_n(0) = n!$

d) Wyprowadź funkcję tworzącą ze wzoru Rodriguesa przez całkowanie po konturze.

37. W paragrafie 5.10 zdefiniowaliśmy wielomiany Hermite'a przy pomocy funkcji tworzącej

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n, \quad t > 0$$

i stąd wyprowadziliśmy wzór Rodriguesa

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

Udowodnij teraz rzecz odwrotną, a mianowicie, że wzór Rodriguesa pociąga za sobą istnienie takiej funkcji tworzącej. Po drodze udowodnij przedstawienie całkowe

$$H_n(x) = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} e^{x^2} \oint_C \frac{e^{-z^2}}{(z-x)^{n+1}} dz,$$

gdzie C obejmuje punkt x.

38. Udowodnij całkowe przedstawienie wielomianów Hermite'a

$$H_n(x) = \frac{2^n}{\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} (x+it)^n e^{-t^2} dt.$$

Użyj tego wyniku do wyprowadzenia jawnego przedstawienia wielomianów Hermite'a przez szereg

$$H_n(x) = \sum_{\substack{r=0 \\ (2r \leqslant n)}}^{n} \frac{(-1)^r n!}{r!(n-2r)!} (2x)^{n-2r}.$$

39. Pokaż, że

a) $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ dla $x > 0$,

b) $\Gamma(n+1) = n!$, gdzie n jest dodatnią liczbą całkowitą.

LITERATURA POMOCNICZA

R. V. Churchill *Complex Variables and Applications*. Drugie wydanie. McGraw-Hill, New York 1960. Doskonała, niezwykle jasno napisana książka, idealna dla samodzielnej nauki. Książka Churchilla miała wpływ na całe pokolenie fizyków włączając w to autorów.

P. Franklin *Functions of Complex Variables*. Prentice Hall, Englewood Cliffs–New York 1958.

E. Goursat *Functions of a Complex Variable*. Dover Publications, New York 1966. Bardzo łatwa do czytania.

E. Hille *Analytic Function Theory*, Tom I i II. Ginn, Boston 1959. Wyczerpująco traktuje temat.

K. Knopp *Theory of Functions*, Część I i II. Dover, New York 1945. Książce tej towarzyszą dwa zbiory zadań.

E. Landau *Foundations of Analysis*. Chelsea, New York 1960. Aksjomatyczne omówienie różnych systemów liczbowych włącznie z liczbami zespolonymi.

S. Seshu i N. Balabarian *Linear Network Analysis*. Wiley, New York 1959. Książka omawia inżynierskie zastosowania związków dyspersyjnych.

S. Schweber *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*. Row Peterson, Evanston Ill. 1961. Patrz str. 411, gdzie dyskutowany jest problem przyczynowości i związków dyspersyjnych.

E. C. Titchmarsh *Introduction to the Theory of Fourier Integrals*. Oxford University Press, New York 1937. Rozdział 5 omawia w sposób ścisły zagadnienie par transformat Hilberta.

H. Weyl *Philosophy of Mathematics and Natural Science*. Princeton University Press Princeton–New York 1949. Rozdział II poświęcony jest różnym systemom liczbowym.

FUNKCJE GREENA

WSTĘP

W bieżącym rozdziale skierowujemy naszą uwagę na operatory całkowe. Okazuje się, że istnieje szczególnie bliski związek między operatorami różniczkowymi i operatorami całkowymi. Kluczowym ogniwem łączącym te dwa pojęcia są warunki brzegowe, znane czytelnikowi z teorii równań różniczkowych. Związek między różniczkowymi i całkowymi operatorami stanowi właśnie teoria funkcji Greena, dział fizyki teoretycznej, który nabrał szczególnego znaczenia w związku z nowoczesnymi kierunkami rozwoju mechaniki kwantowej. Jest rzeczą zupełnie niemożliwą podanie wszechstronnego przeglądu tego ogromnego przedmiotu w jednym tylko rozdziale, spróbujemy jednak zilustrować główne idee. Funkcje Greena mogą być użyteczne w fizyce klasycznej, główny jednak nacisk położymy na ich rolę w mechanice kwantowej, ponieważ w dużej mierze właśnie sformułowania za pomocą funkcji Greena wyjaśniły wiele aspektów matematycznej struktury mechaniki kwantowej, zarówno nierelatywistycznej jak i relatywistycznej.

7.1. NOWY SPOSÓB ROZWIĄZYWANIA RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH

Najprostszym niewątpliwie równaniem różniczkowym jest równanie

$$-i\frac{dy}{dx} = f(x). \tag{7.1}$$

[Dla wygody przyszłych rozważań umieściliśmy i przed pochodną; zwróćcie uwagę na analogię z kwantowomechanicznym operatorem $p_x = -i\hbar d/dx$.] Jeżeli jako warunek początkowy wybierzemy $y(a) = y_0$, natychmiast można napisać rozwiązanie równania (7.1)

$$y(x) = y_0 + i\int_a^x f(x')dx'. \tag{7.2}$$

Rozwiązaliśmy już zatem proste równanie różniczkowe przez scałkowanie.

Jest to w rzeczywistości trywialny przykład, ponieważ w ten sposób każda całka, którą się pisze, może być zaszczytnie nazwana „Rozwiązanie Równania Różniczkowego". Spróbujemy jednak posunąć się trochę dalej. Wyobraźmy sobie, że x leży na domkniętym odcinku $[a, b]$. Możemy wtedy równanie (7.2) przepisać w postaci

$$y(x) = y_0 + i\int_a^b \Theta(x-x')f(x')dx', \tag{7.3}$$

gdzie $\Theta(t)$ jest nieciągłą funkcją schodkową zdefiniowaną przez

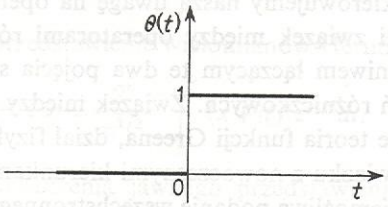
$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0, \\ 0, & t \leqslant 0. \end{cases} \tag{7.4}$$

$\Theta(t)$ bywa czasem nazywane *funkcją Heaviside'a* (rys. 7.1). Jej obecność w równ. 7.3 służy do urwania całkowania po x' przy $x' = x$; równ. (7.3) jest więc równoważne (7.2). Zauważmy, że $y(x)$ ma postać

$$y(x) = y_0 + Kf(x), \tag{7.5}$$

gdzie całkowy operator K zdefiniowany jest przez

$$Kf(x) \equiv i \int_a^b \Theta(x-x')f(x')dx'. \tag{7.6}$$



Rys. 7.1 Funkcja Heaviside'a.

W tym wyrażeniu $i\Theta(x-x')$ jest *jądrem operatora całkowego* K i kiedy jądro pochodzi z rozwiązania równania zawierającego operator różniczkowy, nazywane ono często bywa *funkcją Greena* tego operatora różniczkowego dla odpowiednich warunków granicznych. Zatem

$$G_1(x, x') = i\Theta(x-x') \tag{7.3'}$$

jest funkcją Greena należącą do operatora id/dx dla układu poddanego warunkom brzegowym $y(a) = y_0$.

Bardziej interesującym przykładem jest równanie

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x), \tag{7.7}$$

gdzie $y(x)$ poddane jest jednopunktowym warunkom brzegowym $y(a) = y_0$, $y'(a) = \tilde{y}_0$. Całkując jednokrotnie równanie (7.7) uzyskujemy

$$\frac{dy}{dx} = \tilde{y}_0 + \int_a^x f(x')dx',$$

a drugie całkowanie daje

$$y(x) = y_0 + \tilde{y}_0(x-a) + \int_a^x dx'' \int_a^{x''} dx' f(x').$$

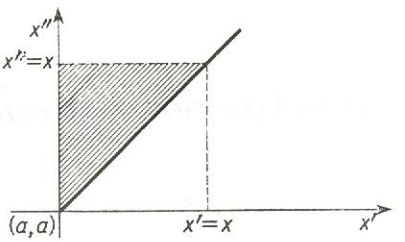
W tym wyrażeniu całkujemy po trójkątnym obszarze w płaszczyźnie $x'x''$ (zacieniowany obszar na rys. 7.2) całkując najpierw po x' od $x' = a$ do $x' = x''$, a następnie po x'' od a do x. Jednakże równie dobrze możemy całkować po x'' od $x'' = x'$ do $x'' = x$

i następnie całkować po x' od a do x. Ponieważ całkowana funkcja zależy tylko od x' korzystne jest zamienić w ten sposób porządek granic całkowania. Otrzymujemy

$$y(x) = y_0 + \tilde{y}_0(x-a) + \int_a^x dx' f(x') \int_{x'}^x dx'',$$

skąd

$$y(x) = y_0 + \tilde{y}_0(x-a) + \int_a^x (x-x') f(x') dx'. \tag{7.8}$$



Rys. 7.2

Czytelnik może sprawdzić ten wynik przez podwójne zróżniczkowanie i porównanie z (7.3). Jeżeli znów ograniczymy x do odcinka $[a, b]$, możemy napisać

$$y(x) = y_0 + \tilde{y}_0(x-a) + \int_a^b (x-x')\Theta(x-x') f(x') dx'. \tag{7.9}$$

To rozwiązanie dla $y(x)$ ma dokładnie tę samą formę jak rozwiązanie równ. (7.1). Stosując wcześniej wprowadzoną terminologię możemy powiedzieć, że funkcja

$$G_1(x, x') = (x-x')\Theta(x-x') \tag{7.9'}$$

jest funkcją Greena odpowiadającą operatorowi d^2/dx^2 dla warunków brzegowych $y(a) = y_0$ i $y'(a) = \tilde{y}_0$. Zauważcie, że ta funkcja Greena jest ciągła, podczas gdy funkcja Greena operatora d/dx jest nieciągła w $x = x'$.

W obu równaniach (7.3) i (7.9) człon po prawej stronie, który nie znajduje się pod całką, jest rozwiązaniem jednorodnego równania przy danych warunkach brzegowych. Mamy

$$\frac{dy}{dx} = 0$$

w przypadku równania (7.3) i

$$\frac{d^2y}{dx^2} = 0$$

w przypadku równ. (7.9). Zatem ogólnym rozwiązaniem równ. (7.7) jest

$$y(x) = \alpha + \beta x + \int_a^b (x-x')\Theta(x-x') f(x') dx', \tag{7.10}$$

gdzie α i β są określone przez warunki brzegowe.

Przykładowo, jeśli mamy dwupunktowe warunki brzegowe

$$y(0) = y_0, \quad y(1) = y_1,$$

to rozwiązanie na odcinku [0, 1] dane będzie przez

$$y(x) = \alpha+\beta x+\int_0^1 (x-x')\Theta(x-x')f(x')dx',$$

gdzie α i β określone są przez równania

$$y_0 = \alpha-\int_0^1 x'\Theta(-x')f(x')dx' = \alpha$$

i

$$y_1 = \alpha+\beta+\int_0^1 (1-x')\Theta(1-x')f(x')dx'.$$

Zatem

$$\alpha = y_0, \ \beta = y_1-y_0-\int_0^1 (1-x')f(x')dx'.$$

Wobec tego rozwiązanie ma postać

$$y(x) = y_0+(y_1-y_0)x-\int_0^1 x(1-x')f(x')dx'+\int_0^1 (x-x')\Theta(x-x')f(x')dx'.$$

Oznaczając

$$G_3(x, x') = -x(1-x')+(x-x')\Theta(x-x'),$$

mamy

$$y(x) = y_0+(y_1-y_0)x+\int_0^1 G_3(x, x')f(x')dx'. \tag{7.11}$$

Przyjrzyjmy się bliżej funkcji $G_3(x, x')$. Gdy $0 \leqslant x' \leqslant x$,

$$G_3(x, x') = -x(1-x')+(x-x') = -x'(1-x),$$

a kiedy $x \leqslant x' \leqslant 1$, to

$$G_3(x, x') = -x(1-x').$$

Podsumowując, rozwiązanie równania (7.7) dane jest przez równ. (7.11), gdzie $G_3(x, x')$ jest postaci

$$G_3(x, x') = \begin{cases} -x'(1-x), & 0 \leqslant x' \leqslant x, \\ -x(1-x'), & x \leqslant x' \leqslant 1. \end{cases} \tag{7.11'}$$

Używając funkcji $\Theta(x)$, $G_3(x, x')$ można konwencjonalnie zapisać w postaci

$$G_3(x, x') = xx'-x'\Theta(x-x')-x\Theta(x'-x). \tag{7.11''}$$

Zauważcie, że $G_3(x, x')$ znika w $x = 0$ i $x = 1$, a także w $x' = 0$ i $x' = 1$.

Interesujące jest rozważenie zasadniczego wpływu jaki mają na postać funkcji Greena warunki brzegowe. Po pierwsze, zmienia się postać funkcyjna. Co więcej funkcja Greena (7.11'') jest symetryczną funkcją x i x', ponieważ

$$G_3(x, x') = G_3(x', x),$$

ale funkcja Greena (7.9') jest niesymetryczna. Jednakże zarówno $G_2(x, x')$ jak i $G_3(x, x')$ są funkcjami Greena operatora d^2/dx^2. Jedyna różnica leży w warunkach brzegowych.

Zbadajmy teraz efekt zmiany warunków brzegowych w równaniu pierwszego rzędu. Wracamy do równ. (7.1) i tym razem próbujemy warunki brzegowe $y(1) = Cy(0)$. Rozwiązanie będzie miało ogólną postać typu

$$y(x) = A + i\int_0^1 \Theta(x-x')f(x')dx'.$$

Żądamy teraz, aby

$$y(1) = A + i\int_0^1 f(x')dx' = Cy(0) = CA,$$

gdzie w powyższym równaniu podstawiliśmy zarówno $x = 1$ jak i $x = 0$. Stąd natychmiast znajdujemy

$$A = -\frac{i}{1-C}\int_0^1 f(x')dx'.$$

Zatem

$$y(x) = -\frac{i}{1-C}\int_0^1 f(x')dx' + i\int_0^1 \Theta(x-x')f(x')dx'$$

lub

$$y(x) = G_4(x, x')f(x')dx', \tag{7.12}$$

gdzie

$$G_4(x, x') = -i\left[\frac{1}{1-C} - \Theta(x-x')\right].$$

Wobec tego

$$G_4(x, x') = \begin{cases} -\dfrac{iC}{1-C}, & x > x', \\ -\dfrac{i}{1-C}, & x \leqslant x', \end{cases}$$

a jeżeli położymy $|C| = 1$, wtedy

$$G_4(x, x') = \begin{cases} -\dfrac{i}{C^*-1}, & x > x', \\ +\dfrac{i}{C-1}, & x \leqslant x', \end{cases} \tag{7.12'}$$

skąd widzimy, że funkcja Greena jest symetryczna w sensie

$$G(x, x') = G(x', x)^*.$$

Ta definicja symetrii motywowana jest definicją macierzy hermitowskiej jako takiej, której elementy spełniają relacje

$$a_{ij} = a_{ji}^*.$$

Jak zobaczymy, związek między symetrycznymi funkcjami takimi, jak $G_4(x, x')$ i macierzami hermitowskimi jest bardzo ścisły i owocny. W tej chwili możemy wyciągnąć wniosek, że nawet w prostym przypadku pojedynczej pochodnej, wybór warunków brzegowych może oznaczać różnicę między symetryczną i niesymetryczną funkcją Greena [ponieważ funkcja $G_1(x, x')$ z równ. (7.3') jest niesymetryczna].

Fakt, że pewne warunki graniczne prowadzą do funkcji Greena, która jest symetryczna, a inne nie, łatwo uzasadnić. Czytelnik może prosto pokazać, że w przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie, które spełniają $f(1) = Cf(0)$, gdzie $C = e^{ip}$, operator różniczkowy $p = -id/dx$ jest symetryczny w sensie, że $(f, pg) = (pf, g)$ gdzie $(\ ,\ )$ oznacza iloczyn skalarny z równania (5.3) dla $a = 0$ i $b = 1$. Jednakże p nie będzie symetryczne, jeżeli zażądamy tylko, aby funkcje w tej przestrzeni przyjmowały ustaloną wartość w $x = 0$. Podobne uwagi odnoszą się do operatora d^2/dx^2, jeżeli pamiętać, że znajdując funkcję Greena operatora d^2/dx^2 działającego w przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie, które przyjmują ustalone wartości $x = 0$ i $x = 1$ zawsze można przyjąć krańcowe wartości równe zeru. Wynika to prosto z faktu, że jeżeli rozwiążemy równanie

$$\frac{d^2\eta}{dx^2} = f(x)$$

przy warunkach $\eta(0) = 0$ i $\eta(1) = 0$, to rozwiązanie

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x)$$

z $y(0) = y_0$ i $y(1) = y_1$ dane jest po prostu przez $y(x) = y_0 + (y_1 - y_0)x + \eta(x)$. Ponieważ funkcje Greena $G_3(x, x')$ i $G_4(x, x')$ są symetrycznymi funkcjami x i x', łatwo pokazać, że operatory całkowe K_3 i K_4, których jądrami są odpowiednio $G_3(x, x')$ i $G_4(x, x')$ są operatorami symetrycznymi w tym sensie w jakim p było symetryczne, tzn. $(f, K_3 g) = (K_3 f, g)$ i $(f, K_4 g) = (K_4 f, g)$. Nie jest wobec tego zadziwiające, że wydaje się, iż istnieje ścisły związek między symetrycznymi operatorami różniczkowymi i symetrycznymi funkcjami Greena.

Czytelnik z powodzeniem może zastanowić się dlaczego zadaliśmy sobie trud rozwinięcia takiej skomplikowanej metody całkowania prostych równań różniczkowych. Jeden ważny powód jest następujący. Przypuśćmy, że zamiast równania (7.1), mielibyśmy rozwiązać równanie

$$-i\frac{dy}{dx} = f(x, y). \tag{7.13}$$

Jest to prawdziwe równanie różniczkowe w tym sensie, że nie daje się ono natychmiast całkować. Na podstawie naszych poprzednich rozważań mamy

$$y(x) = \alpha + \int_0^1 G(x, x') f[x', y(x')]dx'. \tag{7.14}$$

Jeżeli warunkiem brzegowym jest $y(0) = y_0$, to $\alpha = y_0$ i $G(x, x') = -i\Theta(x - x')$. Jeżeli warunkiem brzegowym jest $y(1) = Cy(0)$, gdzie $|C| = 1$, to $\alpha = 0$ i $G(x, x')$ dane jest przez symetryczną funkcję $G_4(x, x')$ z równ. (7.12). Ponieważ nieznana funkcja $y(x)$ pojawiła się teraz pod znakiem całki, przekształciliśmy równanie różniczkowe w równanie całkowe. Podobnie, jeżeli mamy

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x, y)$$

dla $y(0) = y_0$ i $y(1) = y_1$, to jako odpowiednie równanie całkowe otrzymujemy

$$y(x) = y_0 + (y_1 - y_0)x + \int_0^1 G_3(x, x') f[x', y(x')]dx',$$

gdzie $G_3(x, x')$ jest symetryczną funkcją daną równ. (7.11'). Przykładowo, dobrze znane równanie różniczkowe drugiego rzędu

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \lambda y = 0, \quad y(0) = 0 = y(1)$$

przekształca się w równanie całkowe

$$y(x) = -\lambda \int_0^1 G_3(x, x')y(x')dx'.$$

Istnieje pewien bardzo interesujący i delikatny aspekt tych równań, który należy tu wspomnieć. Z grubsza mówiąc operator różniczkowy id/dx jest nieograniczony w tym sensie, że może on działać na funkcje z *przestrzeni Hilberta* unormowane do jedności i przekształcać je na funkcje o dowolnie dużej normie. Przykładowo norma funkcji e^{inx} w przestrzeni Hilberta funkcji całkowalnych w kwadracie na odcinku [0, 1] wynosi 1, ale norma funkcji

$$i\frac{d}{dx}[e^{inx}] = -ne^{inx}$$

wynosi n, co może być tak duże jak sobie tego życzymy. Jak później zobaczymy, teoria takich nieograniczonych operatorów jest raczej misterna.

Jednakże operator, którego jądrem jest $G_4(x, x')$, jest ograniczony w tym sensie, że przekształca on dowolną funkcję całkowalną w kwadracie o normie jednostkowej na funkcję, której norma jest mniejsza od pewnej danej liczby. Połóżmy ogólnie

$$f(x) = \int_0^1 K(x, y)g(y)dy.$$

Jeżeli przyjmiemy, że funkcja $g(y)$ jest całkowalna w kwadracie i że $K(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie po zmiennej y dla wszystkich x, wtedy na podstawie nierówności Schwartza [równ. (4.10)] mamy

$$|f(x)| \leqslant \left[\int_0^1 |K(x, y)|^2 dy\right]^{1/2} \left[\int_0^1 |g(y)|^2 dy\right]^{1/2}.$$

Zatem, jeżeli g ma normę jednostkową, otrzymujemy

$$|f(x)| \leqslant \left[\int_0^1 |K(x, y)|^2 dy\right]^{1/2}.$$

To oznacza jednak

$$\int_0^1 |f(x)|^2 dx \leqslant \int_0^1 \int_0^1 |K(x, y)|^2 dx dy.$$

Jeżeli $K(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie w płaszczyźnie xy, co ma miejsce dla wszystkich funkcji Greena dyskutowanych powyżej, to przypominając sobie, że

$$\int_0^1 \int_0^1 |K(x, y)|^2 dx dy = C,$$

mamy

$$\int_0^1 |f(x)|^2 dx \equiv \|f\|^2 \leqslant C$$

dla dowolnej funkcji $g(x)$ o jednostkowej normie. Jądra typu całkowalnego w kwadracie mają w rzeczywistości wiele innych przyjemnych własności. Na przykład jądro $G_4(x, x')$ przekształca ciąg funkcji o jednostkowych normach e^{inx} w ciąg funkcji, których normy dążą do zera. W rzeczywistości dla jąder tego typu każdy nieskończony ograniczony ciąg funkcji (tzn. funkcji $f_n(x)$ spełniających $\|f_n\| \leqslant C$ dla wszystkich n) będzie przekształcony w ciąg zawierający podciąg, który jest zbieżny w sensie średnim. O operatorach tego typu mówi się, że są całkowicie ciągłe i powiemy o nich dużo więcej w rozdziale 9. Analiza tych operatorów jest znacznie prostsza niż w przypadku operatorów nieograniczonych, w rzeczywistości bardzo przypomina zwykłą teorię macierzy. Przekształcając zatem równanie różniczkowe w równanie całkowe lub inaczej mówiąc przekształcając operator różniczkowy w operator całkowy, możliwe jest często znaczne matematyczne uproszczenie zagadnienia.

7.2. FUNKCJE GREENA I FUNKCJA δ

Mając już w pamięci ogólne pojęcie co to jest funkcja Greena, spróbujmy teraz podejść do problemu rozwiązania równania różniczkowego w trochę inny sposób. Przypuśćmy, że mamy równanie

$$Ly = f, \tag{7.15}$$

gdzie L jest jakimś zwykłym liniowym operatorem różniczkowym, a f jest jakąś daną funkcją. Nie bawiąc się w ścisłość przypuśćmy, że L posiada zupełny, ortonormalny układ *funkcji własnych* $\{\phi_n(x)\}$ taki, że

$$L\phi_n(x) = \lambda_n \phi_n(x).$$

W tych warunkach moglibyśmy napisać, pomijając kropkę nad znakiem równości, która oznacza zbieżność w sensie średnim

$$y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \phi_n(x), \tag{7.16a}$$

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \phi_n(x). \tag{7.16b}$$

Sumy biegną do nieskończoności co odzwierciedla fakt, że w nieskończenie wymiarowej przestrzeni Hilberta zupełny ortonormalny układ funkcji zawiera nieskończenie wiele elementów.

Jeżeli teraz podstawimy równania (7.16a) i (7.16b) do (7.15), to otrzymujemy

$$Ly = L\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \phi_n = \sum_{n=1}^{\infty} L\alpha_n \phi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \lambda_n \phi_n = f = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \phi_n,$$

zatem

$$\sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_n \lambda_n - \beta_n) \phi_n = 0.$$

Ponieważ funkcje ϕ_n są liniowo niezależne wnioskujemy, że

$$\alpha_n = \beta_n/\lambda_n,$$

stąd

$$y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} \beta_n \phi_n(x), \tag{7.17}$$

gdzie $\beta_n = (\phi_n, f)$. Jeżeli jakieś $\lambda_n = 0$, to rozwiązanie istnieje jedynie wtedy, gdy odpowiednie $\beta_n = 0$. W tym przypadku rozwiązania nie będą jednoznaczne, do każdego rozwiązania można dodać dowolną wielokrotność ϕ_n odpowiadającego $\lambda_n = 0$ (patrz twierdzenie 3.17). Chwilowo założymy zatem, że $\lambda_n \neq 0$ dla wszystkich n i napiszemy równanie (7.17) bardziej szczegółowo

$$y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} \phi_n(x)(\phi_n, f) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} \phi_n(x) \int \phi_n^*(x') f(x') dx' =$$

$$= \int \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(x)\phi_n^*(x')}{\lambda_n} f(x') dx'.$$

Zatem

$$y(x) = \int G(x, x') f(x') dx', \tag{7.18}$$

gdzie

$$G(x, x') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(x)\phi_n^*(x')}{\lambda_n}. \tag{7.18'}$$

(Zamieniliśmy tutaj porządek sum i całek raczej w nonszalancki sposób, tzn. nie sprawdzając jednostajnej zbieżności sumy.) W ten sposób uzyskaliśmy przedstawienie funkcji Greena poprzez nieskończone rozwinięcie na funkcje własne. Jeżeli λ_n są rzeczywiste, to $G(x, x')$ jest symetryczne

$$G(x, x') = G(x', x)^*.$$

Jako przykład rozważmy operator

$$L = \frac{d^2}{dx^2}$$

dla x z odcinka $[0, 1]$. Unormowanymi funkcjami własnymi operatora L na odcinku $[0, 1]$, znikającymi na końcach tego odcinka, są funkcje $\phi_n(x) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$, dla $n = 1, 2, \ldots$ o wartościach własnych $\lambda_n = -n^2\pi^2$. W tym przypadku funkcja Greena jest zatem dana przez

$$G(x, x') = -\frac{2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(n\pi x)\sin(n\pi x')}{n^2}. \tag{7.19}$$

Ponieważ kolejne wyrazy szeregu są zawsze mniejsze od $1/n^2$, mamy jednostajną zbieżność do funkcji ciągłej. W rzeczywistości funkcja, do której szereg z równ. (7.19) jest zbieżny, musi być funkcją (7.11'), ponieważ już stwierdziliśmy inną metodą (bardziej ścisłą), że jest to funkcja Greena operatora d^2/dx^2 z dwupunktowymi warunkami brzegowymi. Interesu-

jące jest obliczenie $G_3(x, x')$ dla kilku punktów w celu stwierdzenia, czy równania (7.11') i (7.19) są zgodne. Na przykład w $x = x' = \frac{1}{2}$ funkcja $G_3\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{4}$, podczas gdy równ. (7.19) daje

$$G\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = -\frac{2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty}{}' \frac{1}{n^2},$$

gdzie prim przy znaku sumy oznacza, że suma przebiega tylko po nieparzystych wartościach n. Używając równ. (6.61) i wyników zadania 6.32 łatwo uzyskać rezultat

$$\sum_{n=1}^{\infty}{}' \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{8}$$

tak, że $G\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{4}$ w zgodzie z poprzednio otrzymanym wynikiem dla $G_3\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

Pouczające jest także przyjrzenie się operatorowi $p = -id/dx$ działającemu w przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie na odcinku [0,1], które spełniają relację $f(1) = Cf(0)$, gdzie $C = e^{i\psi}$ i $0 \leqslant \psi < 2\pi$. W poprzednim paragrafie rozpatrywaliśmy ten operator z innego punktu widzenia. Łatwo stwierdzić, że unormowanymi funkcjami własnymi tego operatora są funkcje $\phi_n = e^{i(2\pi n+\psi)x}$, gdzie $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Odpowiednie wartości własne wynoszą $\lambda_n = 2\pi n + \psi$. Funkcja Greena tego operatora ma zatem postać

$$G(x, x') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(2\pi n+\psi)(x-x')}}{2\pi n+\psi}.$$

Zauważcie, że jeżeli $\psi = 0$, tzn. $C = 1$, to wyrażenie dla $G(x, x')$ jest źle określone, ponieważ mianownik przyjmuje wartość zero dla $n = 0$. Ilustruje to typ trudności występujących w przypadku, gdy operator ma *wektor własny* z zerową wartością własną. W powyższym przypadku $\lambda_0 = 0$, tak więc rozwiązanie (7.17) przestaje się stosować, chyba że $(\phi_0, f) = 0$. Nawet, jeżeli $(\phi_0, f) = 0$, rozwiązanie równania (7.15) nie jest jednoznaczne. Jednakże, gdy $\psi \neq 0$, to problem jest dobrze postawiony i wyznaczenie $G(x, x')$ jest w rzeczywistości bardzo proste. Zobaczymy w następnym paragrafie, że funkcja Greena operatora p musi być stała z wyjątkiem, gdy $x = x'$. W celu obliczenia $G(x, x')$, gdy $x > x'$ możemy przyjąć bez straty ogólności $x - x' = 1/2$, zatem

$$G(x, x') = \frac{1}{2\pi} e^{i\psi/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+\psi/2\pi}, \quad (x > x')$$

i podobnie biorąc $x - x' = -1/2$,

$$G(x, x') = \frac{1}{2\pi} e^{-i\psi/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n+\psi/2\pi}, \quad (x < x').$$

Na podstawie wyników zadania 6.32 (patrz także równ. (6.57)) łatwo można obliczyć występującą powyżej sumę. Czytelnik stwierdzi, że funkcja Greena uzyskana w ten sposób dokładnie zgadza się z funkcją Greena $G_4(x, x')$ z równ. (7.12'), którą uzyskaliśmy dla operatora p bardziej elementarnym sposobem.

Interesującym sposobem rozpatrywania funkcji Greena jest podziałanie na $G(x, x')$ operatorem L, wtedy

$$LG(x, x') = L \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(x)\phi_n^*(x')}{\lambda_n}.$$

Jeżeli zamienimy porządek sumowania i operacji oznaczonej przez L, biorąc $L\phi_n(x) = \lambda_n\phi_n(x)$, to mamy

$$LG(x, x') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L\varphi_n(x)\phi_n^*(x')}{\lambda_n} = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n^*(x') \equiv I(x, x').$$

Dla dowolnej funkcji $f(x)$,

$$\int I(x, x')f(x')dx' = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \int \phi_n^*(x')f(x')dx' = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)(\phi_n, f).$$

Ponieważ jednak ϕ_n tworzą zgodnie z założeniem zupełny ortonormalny układ funkcji, równanie to można zapisać w postaci

$$\int I(x, x')f(x')dx' = f(x).$$

Widzieliśmy już w rozdziale 5, że funkcja $I(x, x')$, która ma powyższą własność, jest po prostu funkcją δ Diraca, $\delta(x-x')$. Możemy zatem napisać

$$LG(x, x') = \delta(x-x'). \tag{7.20}$$

Równanie to lepiej napisać w postaci

$$LK = I, \tag{7.21}$$

gdzie K jest operatorem całkowym zdefiniowanym przez

$$Kf = \int G(x, x')f(x')dx'.$$

Zatem z punktu widzenia równ. (7.21) znalezienie funkcji Greena operatora L jest równoznaczne z odwróceniem L tak, że równanie typu $Ly = f$ można rozwiązać zgodnie z

$$y = L^{-1}f = Kf = \int G(x, x')f(x')dx'.$$

Ta analiza mówi nam, że jeżeli wrócimy do naszej najprostszej funkcji Greena $G_1(x, x')$ z równ. (7.3'), to powinniśmy mieć

$$-i\frac{d}{dx}G_1(x, x') = \delta(x-x').$$

Posługując się równaniem (7.3') stwierdzamy, że równanie powyższe przyjmuje postać

$$\frac{d}{dx}\Theta(x-x') = \delta(x'-x')$$

lub

$$\frac{d}{dt}\Theta(t) = \delta(t). \tag{7.22}$$

Sprawdźmy czy $d\Theta/dt$ ma własności funkcji δ dyskutowanej w paragrafie 5.3. Używając definicji $\Theta(t)$ widzimy, że

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d\Theta(t)}{dt} dt = \Theta(\varepsilon) - \Theta(-\varepsilon) = 1,$$

a więc jedna podstawowa własność funkcji δ spełniona jest w trywialny sposób. Także, ponieważ $\Theta(t)$ jest stałe wszędzie z wyjątkiem $t = 0$, to $d\Theta/dt$ znika wszędzie z wyjątkiem punktu $t = 0$. Jeżeli teraz sprawdzimy jaki efekt wywiera $d\Theta(t)/dt$ jako czynnik w wyrażeniu podcałkowym, mamy

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d\Theta(t)}{dt} f(t) dt = [\Theta(t) f(t)]_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \Theta(t) f'(t) dt,$$

gdzie scałkowaliśmy raz przez części. Używając definicji $\Theta(t)$ otrzymujemy

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d\Theta}{dt} f(t) dt = f(\varepsilon) - \int_{0}^{\varepsilon} f'(t) dt = f(\varepsilon) - [f(\varepsilon) - f(0)] = f(0).$$

Zatem $d\Theta/dt$ ma najważniejszą własność funkcji δ, mianowicie

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(t) f(t) dt = f(0).$$

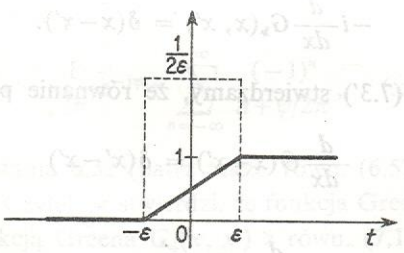
Intuicyjnym sposobem stwierdzenia, że $d\Theta/dt = \delta(t)$ jest napisanie przybliżonego $\Theta(t)$, jako

$$\Theta_\varepsilon(t) = \begin{cases} 0, & t < -\varepsilon, \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2\varepsilon} t, & -\varepsilon \leqslant t \leqslant \varepsilon, \\ 1, & t > \varepsilon. \end{cases}$$

Oczywiście $\Theta_\varepsilon(t) \to \Theta(t)$, gdy $\varepsilon \to 0$. Obliczamy teraz $d\Theta_\varepsilon(t)/dt$ i znajdujemy, że

$$\Theta'_\varepsilon(t) = \begin{cases} 0, & t < -\varepsilon, \\ 1/2\varepsilon, & -\varepsilon \leqslant t \leqslant \varepsilon, \\ 0, & t > \varepsilon. \end{cases}$$

Ciąg funkcji $\{\Theta'_\varepsilon(t)\}$ był jednym z tych, jak pokazaliśmy w paragrafie 5.3, które przybliżały funkcję δ. Rys. 7.3 pokazuje funkcje $\Theta_\varepsilon(t)$ i $\Theta'_\varepsilon(t)$. Pamiętając o tych własnościach



Rys. 7.3 Linia ciągła przedstawia funkcję $\Theta_\varepsilon(t)$; linia przerywana przedstawia $\Theta'_\varepsilon(t)$.

funkcji δ, czytelnik powinien sprawdzić, czy wszystkie funkcje Greena wyprowadzone w ostatnim paragrafie spełniają równanie (7.20).

Różniczkowa reprezentacja funkcji δ dana równaniem (7.22) jest bardzo użyteczna i zwróćmy uwagę, dla przyszłych zastosowań, na kilka jej prostych konsekwencji. Po pierwsze, ponieważ

$$\Theta(at) = \Theta(t), \qquad \text{jeżeli} \quad a > 0,$$

i

$$\Theta(at) = 1 - \Theta(t), \qquad \text{jeżeli} \quad a < 0,$$

to przez różniczkowanie otrzymujemy

$$a\frac{d\Theta(at)}{d(at)} = \frac{d\Theta}{dt}, \qquad a > 0,$$

$$a\frac{d\Theta(at)}{d(at)} = -\frac{d\Theta}{dt}, \qquad a < 0,$$

zatem

$$a\delta(at) = \delta(t), \qquad a > 0,$$

$$a\delta(at) = -\delta(t), \qquad a < 0$$

lub

$$\delta(at) = \frac{1}{|a|}\delta(t). \tag{7.23}$$

Druga użyteczna relacja dotyczy funkcji signum (x), zwykle zapisywanej $\operatorname{sgn}(x)$. Jest to funkcja, która równa się $+1$ dla x dodatnich i -1 dla x ujemnych. Widzimy, że

$$\operatorname{sgn}(x) = \Theta(x) - \Theta(-x),$$

a więc

$$\frac{d}{dx}[\operatorname{sgn}(x)] = \frac{d\Theta(x)}{dx} + \frac{d\Theta(-x)}{d(-x)} = \delta(x) + \delta(-x) = 2\delta(x),$$

to znaczy

$$\frac{d}{dx}\operatorname{sgn}(x) = 2\delta(x). \tag{7.24}$$

Naturalną konsekwencją tego rezultatu jest

$$\frac{d^2}{dx^2}|x| = \frac{d^2}{dx^2}[x\operatorname{sgn}(x)] = \frac{d}{dx}[\operatorname{sgn}(x) + 2x\delta(x)] = \frac{d}{dx}[\operatorname{sgn}(x)] = 2\delta(x).$$

Skorzystaliśmy tu z faktu, że $x\delta(x) = 0$ i z równania (7.24).

Pamiętając o tych raczej nieformalnych interpretacjach funkcji Greena i funkcji δ, przejdziemy teraz do niektórych zastosowań.

7.3. FUNKCJE GREENA W JEDNYM WYMIARZE

Po zbadaniu na wstępie kilku prostych operatorów spróbujemy teraz naszych możliwości w przypadku operatorów bardziej ogólnego typu i jednocześnie wprowadzimy inną metodę badania funkcji Greena. Zaczniemy od przykładu z mechaniki klasycznej, ale nim

skończymy wywody stanie się jasne, że możliwości zastosowań wynikające z tego prostego przypadku są rzeczywiście ogromne.

Rozważmy równanie tłumionego oscylatora harmonicznego z siłą wymuszającą

$$\ddot{x}(t)+2\gamma\dot{x}(t)+\omega_0^2 x(t) = F(t), \tag{7.25}$$

gdzie różniczkowanie względem czasu zaznaczone jest przez kropkę. Jednostkę masy wybraliśmy w ten sposób, że: $m = 1$, γ jest w zasadzie współczynnikiem oporu tarcia, ω_0 jest pierwiastkiem kwadratowym z (dodatniej) stałej siłowej, a $F(t)$ jest zewnętrzną siłą wymuszającą. Zakładamy, że $F(t)$ ma transformatę Fouriera

$$\hat{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikt} F(t)\,dt.$$

Ponieważ założyliśmy, że $F(t)$ ma transformatę Fouriera, to $F(t)$ musi dążyć do zera dla dużych $|t|$. Ten fakt łącznie z obecnością tłumienia powoduje, że rozsądne jest założenie, iż $x(t)$ i jego pierwsza pochodna dążą do 0 dla dużych $|t|$ i wobec tego mają transformaty Fouriera. Biorąc transformaty Fouriera obu stron równania (7.25) otrzymujemy

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\ddot{x}+2\gamma x+\omega_0^2 x)e^{ikt}dt = \hat{F}(k).$$

Niech

$$\hat{x}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikt} x(t)\,dt,$$

wtedy

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2x}{dt^2} e^{ikt}dt + 2\gamma \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{dt} e^{ikt}dt + \omega_0^2 \hat{x}(k) = \hat{F}(k). \tag{7.26}$$

W pierwszym członie całkujemy raz przez części i otrzymujemy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2x}{dt^2} e^{ikt}dt = \left[\frac{dx}{dt} e^{ikt}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{dt}\right) \frac{d}{dt}(e^{ikt})\,dt = -ik \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{dt}\right) e^{ikt}dt.$$

W tym wyrażeniu wkład od punktów końcowych znika, ponieważ założyliśmy, że $x(t)$ i $\dot{x}(t)$ mogą być przetransformowane po fourierowsku i zatem znikają na dużych odległościach. Równanie (7.26) pociąga zatem za sobą relację

$$\frac{(2\gamma - ik)}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{dt}\right) e^{ikt}dt + \omega_0^2 \hat{x}(k) = \hat{F}(k). \tag{7.27}$$

Wreszcie całkując jeszcze raz przez części i używając warunków brzegowych w nieskończoności znajdujemy

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{dx}{dt}\right) e^{ikt}dt = -ik \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t)e^{ikt}dt = -ik\hat{x}(k).$$

Stąd równanie (7.27) przyjmuje postać

$$(-k^2 - 2i\gamma k + \omega_0^2)\hat{x}(k) = \hat{F}(k). \tag{7.28}$$

Ponieważ $\omega_0^2 - 2i\gamma k - k^2$ nie ma zer na osi rzeczywistej, to

$$\hat{x}(k) = \frac{\hat{F}(k)}{-k^2 - 2i\gamma k + \omega_0^2},$$

a z podstawowej własności transformat Fouriera wynika

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{F}(k)}{-k^2 - 2i\gamma k + \omega_0^2} e^{-ikt} dk.$$

Posługując się definicją $\hat{F}(k)$, otrzymujemy

$$x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{F(t')e^{ikt'}}{-k^2 - 2i\gamma k + \omega_0^2} e^{-ikt}.$$

Możemy teraz dodać dowolną kombinację liniową rozwiązań równania jednorodnego, aby ostatecznie otrzymać

$$x(t) = Ax_1(t) + Bx_2(t) + \int_{-\infty}^{\infty} G(t, t')F(t')dt', \tag{7.29a}$$

gdzie

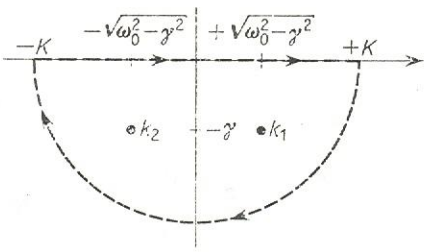
$$G(t, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik(t-t')}}{-k^2 - 2i\gamma k + \omega_0^2} dk, \tag{7.29b}$$

a A i B muszą być tak wybrane, aby spełnione były warunki brzegowe. Jako dwa liniowo niezależne rozwiązania równania jednorodnego możemy przyjąć

$$\begin{aligned} x_1(t) &= e^{-\gamma t}\sin\left[\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}\, t\right], \\ x_2(t) &= e^{-\gamma t}\cos\left[\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}\, t\right]. \end{aligned} \tag{7.30}$$

Zobaczymy teraz, czy możemy obliczyć $G(t, t')$. Napiszmy najpierw

$$G(t, t') = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik(t-t')}dk}{(k-k_1)(k-k_2)}, \tag{7.31}$$



Rys. 7.4 Zespolona płaszczyzna k z konturem używanym przy obliczaniu funkcji Greena dla tłumionego oscylatora harmonicznego.

gdzie $k_1 = (\omega_0^2 - \gamma^2)^{1/2} - i\gamma$ i $k_2 = -(\omega_0^2 - \gamma^2)^{1/2} - i\gamma$. Dla ustalenia uwagi założymy, że $\omega_0 > \gamma$, ale nie ma to żadnego zasadniczego znaczenia dla przytoczonych w dalszym ciągu rozważań. Ważną rzeczą odnośnie k_1 i k_2 jest to, że ich części urojone są zawsze ujemne. Nasze wiadomości z teorii zmiennej zespolonej pozwalają nam łatwo wykonać

tę całkę — rozważmy całkę z równ. (7.31) jako część całki konturowej w zespolonej płaszczyźnie k. Odpowiedni kontur — który nazwiemy C — biegnie wzdłuż osi rzeczywistej od $-K$ do K i następnie jest zamknięty w dolnej półpłaszczyźnie półokręgiem o promieniu K, którego środek znajduje się w początku układu współrzędnych (rys. 7.4). Zobaczymy, że jest to właściwy kontur, gdy $t-t' > 0$. Natomiast, gdy $t-t' < 0$, właściwym konturem jest ten, który zamyka się w górnej półpłaszczyźnie, wtedy

$$I \equiv -\frac{1}{2\pi}\oint_C \frac{e^{-ik(t-t')}dk}{(k-k_1)(k-k_2)} = -\frac{1}{2\pi}\int_{-K}^{K} \frac{e^{-ik(t-t')}dk}{(k-k_1)(k-k_2)} -$$

$$-\frac{1}{2\pi}\int_0^{-\pi} \frac{e^{-iK(t-t')}e^{i\phi}}{(Ke^{i\phi}-k_1)(Ke^{i\phi}-k_2)} iKe^{i\phi}d\phi. \tag{7.32}$$

W pierwszym członie po prawej stronie (7.32) całka brana jest wzdłuż osi rzeczywistej, w drugim członie całkujemy wzdłuż półokręgu o promieniu K, na którym

$$k = Ke^{i\phi}, \quad dk = iKe^{i\phi}d\phi,$$

a ϕ zmienia się w zakresie od $\phi = 0$ do $\phi = -\pi$. Rozpatrujemy teraz sytuację, w której K promień konturu, staje się bardzo duży. Wtedy, ponieważ urojone części k_1 i k_2 znajdują się obie w dolnej półpłaszczyźnie, kontur C obejmuje je w pewnym momencie i możemy obliczyć całkę metodą residuów. Otrzymujemy

$$-2\pi I = \lim_{K\to\infty}\oint_C \frac{e^{-ik(t-t')}}{(k-k_1)(k-k_2)}dk = (-1)(2\pi i)\left[\frac{e^{-ik_1(t-t')}}{k_1-k_2}+\frac{e^{-ik_2(t-t')}}{k_2-k_1}\right].$$

Czynnik (-1) pojawia się z powodu zamykania konturu w dolnej półpłaszczyźnie, co pociąga za sobą przebieganie konturu w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara. Podstawiając wartości k_1 i k_2 otrzymujemy

$$I = \frac{e^{-\gamma(t-t')}\sin\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}(t-t')\right]}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}.$$

Gdy $K \to \infty$, pierwszy człon po prawej stronie równ. (7.32) staje się po prostu równy $G(t, t')$ z równania (7.31), a więc

$$\frac{e^{-\gamma(t-t')}\sin\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}(t-t')\right]}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}} = G(t, t') + \lim_{K\to\infty} R, \tag{7.33}$$

gdzie

$$R = -\frac{1}{2\pi}\int_0^{-\pi} \frac{e^{-iKe^{i\phi}(t-t')}}{(Ke^{i\phi}-k_1)(Ke^{i\phi}-k_2)} iKe^{i\phi}d\phi.$$

Ta całka znika jednak na podstawie lematu Jordana (paragraf 6.8), zatem

$$G(t, t') = \frac{e^{-\gamma(t-t')}\sin\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}(t-t')\right]}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}, \quad t > t'. \tag{7.34}$$

Jeżeli teraz $t < t'$, to powyższy argument jest niesłuszny, bo całki występujące przy szacowaniu R rosną wykładniczo. W tym jednak przypadku wybieramy kontur, który

zamknięty jest w górnej półpłaszczyźnie. Wtedy wyrażenie podcałkowe w I z równania (7.32) nie ma osobliwości wewnątrz konturu i wobec tego

$$G(t, t') = 0, \quad t < t'.$$

Możemy zatem podsumować stwierdzając, że

$$G(t, t') = \Theta(t-t') \frac{e^{-\gamma(t-t')} \sin[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}(t-t')]}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}} \tag{7.35a}$$

i pisząc ogólne rozwiązanie jako

$$x(t) = Ax_1(t)+Bx_2(t)+\int_{t_0}^{t} \frac{e^{-\gamma(t-t')} \sin[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}(t-t')]F(t')dt'}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}, \tag{7.35b}$$

gdzie t_0 jest czasem, w którym zastosowane są warunki początkowe (tzn. $F(t')$ może być przyjęte za równe zeru dla czasów wcześniejszych od t_0). Zauważcie, że człon zawierający całkę znika dla $t = t_0$ tak samo, jak jego pierwsza pochodna względem t. Zatem A i B mogą być określone z warunków początkowych $x(t_0) = x_0, \dot{x}(t_0) = x_0$ zupełnie tak samo, jak miałoby to miejsce, gdyby nie było niejednorodnego członu. Na początku bieżącego paragrafu uprzedziliśmy ten wynik oznaczając jądro całkowe przez $G(t, t')$.

Wreszcie czytelnikowi pozostawiamy do pokazania, że

$$\left[\frac{d^2}{dt^2}+2\gamma\frac{d}{dt}+\omega_0^2\right]G(t, t') = \delta(t-t'), \tag{7.36}$$

jak można się spodziewać.

W charakterze przykładu przypuśćmy, że człon wymuszający ma postać

$$F(t) = F_0 e^{-\alpha t},$$

zaczynając od $t = 0$. Zakładamy, że w $t = 0$ układ znajduje się w spoczynku w położeniu równowagi tak, iż $A = B = 0$ w równaniu (7.35b), zatem

$$x(t) = F_0 e^{-\gamma t} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}} \sin[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}(t-t')] e^{(\gamma-\alpha)t'} dt'.$$

Wszystkie całki są bardzo proste i otrzymujemy

$$x(t) = \frac{F_0}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}} \frac{\sin[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}t-\delta]}{\sqrt{\omega_0^2+\alpha^2-2\alpha\gamma}} e^{-\gamma t} + \frac{F_0}{\omega_0^2+\alpha^2-2\alpha\gamma} e^{-\alpha t},$$

gdzie $\operatorname{tg}\delta = \sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}/(\alpha-\gamma)$ i δ jest w pierwszej lub drugiej ćwiartce. Zauważcie, że warunki początkowe $x(0) = 0$, $\dot{x}(0) = 0$ są spełnione. Łatwo także sprawdzić, że $x(t)$ znalezione tym sposobem rzeczywiście spełnia równanie (7.25).

Jeżeli z tłumieniem przejdziemy do zera znajdujemy, że

$$x(t) = \frac{F_0}{\omega_0} \frac{\sin(\omega_0 t-\delta)}{\sqrt{\omega_0^2+\alpha^2}} + \frac{F_0}{\omega_0^2+\alpha^2} e^{-\alpha t}.$$

Po upływie długiego czasu, gdy siła $F(t)$ staje się bardzo mała, uzyskujemy czysty ruch harmoniczny. Zatem w granicy długiego czasu i braku tłumienia otrzymujemy po prostu

$$x(t) = \frac{F_0}{\omega_0} \frac{\sin(\omega_0 t-\delta)}{\sqrt{\omega_0^2+\alpha^2}}.$$

Na podstawie tego wyniku możemy obliczyć końcową energię układu. Układ miał początkowo energię zero, końcowa energia jest więc równa energii wprowadzonej do układu. Mamy

$$E = \frac{1}{2}\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\omega_0^2 x^2$$

dla cząstki o jednostkowej masie, zatem

$$E = \frac{F_0^2}{2(\omega_0^2+\alpha^2)}.$$

Zgodnie z paragrafem 5.7

$$E = \frac{1}{2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_0 t}F(t)\right|^2 = \frac{1}{2}F_0^2\left|\int_0^{\infty} e^{-i\omega_0 t}e^{-\alpha t}dt\right|^2 = \frac{F_0^2}{2(\omega_0^2+\alpha^2)},$$

co jest zgodne z naszym wynikiem.

W równaniu (7.35a) uderzający jest fakt ścisłego podobieństwa $G(t, t')$ do rozwiązania równania jednorodnego

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\gamma\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0. \tag{7.37}$$

W rzeczywistości rozważane jako funkcja t, $G(t, t')$ dla $t > t'$ jest kombinacją liniową dwóch liniowo niezależnych rozwiązań równania (7.37) danych równaniem (7.30). (Współczynniki tej kombinacji liniowej zależą oczywiście od t'.) W tym przypadku

$$G(t, t') = A(t')e^{-\gamma t}\sin[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t] + B(t')e^{-\gamma t}\cos[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t],$$

gdzie

$$A(t') = \frac{e^{\gamma t'}\cos[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t']}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}, \qquad B(t') = -\frac{e^{\gamma t'}\sin[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t']}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}$$

Dlaczego tak jest, łatwo widzieć z równania (7.36).

Wszędzie z wyjątkiem $t = t'$, $G(t, t')$ musi spełniać równ. (7.37), ponieważ funkcja δ znika wszędzie z wyjątkiem przypadku $t = t'$. Zatem dla $t > t'$, $G(t, t')$ jest pewną liniową kombinacją dwu rozwiązań równania (7.37) i podobnie dla $t < t'$.

Aby rozważyć problem w mniej wyspecjalizowanym przypadku, rozważmy najbardziej ogólny liniowy operator różniczkowy drugiego rzędu

$$L \equiv f_0(t)\frac{d^2}{dt^2} + f_1(t)\frac{d}{dt} + f_2(t).$$

Niech $x_1(t)$ i $x_2(t)$ będą dwoma liniowo niezależnymi rozwiązaniami równania

$$Lx(t) = 0.$$

Chcemy rozwiązać równanie

$$LG(t, t') = f_0(t)\frac{d^2G(t, t')}{dt^2} + f_1(t)\frac{dG(t, t')}{dt} + f_2(t)G(t, t') = \delta(t-t'). \tag{7.38}$$

Dla $t > t'$ piszemy

$$G(t, t') = a_1 x_1(t) + a_2 x_2(t), \tag{7.39a}$$

a dla $t < t'$

$$G(t, t') = b_1 x_1(t) + b_2 x_2(t). \tag{7.39b}$$

Spróbujmy teraz wyznaczyć a_1, a_2, b_1 i b_2. $G(t, t')$ musi być ciągłe w $t = t'$, gdyby tak nie było, to dG/dt zawierałoby funkcję δ, a wobec tego d^2G/dt^2 zawierałoby pochodną funkcji δ. Jednakże po prawej stronie równania (7.38) stoi po prostu funkcja δ, wnioskujemy więc, że $G(t, t')$ jest ciągłe w $t = t'$. Jednakże dG/dt nie będzie ciągłe w $t = t'$ i z równania (7.38) możemy określić wartość wyrażenia

$$\left[\frac{dG(t, t')}{dt}\right]_{t=t'+\varepsilon} - \left[\frac{dG(t, t')}{dt}\right]_{t=t'-\varepsilon}$$

całkując obustronnie równanie (7.38) od $t = t'-\varepsilon$ do $t = t'+\varepsilon$. Po prawej stronie równania funkcja δ daje 1, a więc

$$\int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} f_0(t) \frac{d^2G(t, t')}{dt^2} dt + \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} f_1(t) \frac{dG(t, t')}{dt} dt + \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} f_2(t) G(t, t') dt = 1.$$

Załóżmy, że f_0, f_1 i f_2 są ciągłe w całym obszarze określoności funkcji Greena. Wtedy, ponieważ ε jest bardzo małe, funkcje te będą się w obszarze całkowania zmieniały w zaniedbywalny sposób i możemy je zatem zastąpić przez ich wartości w $t = t'$,

$$f_0(t') \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} \frac{d^2G(t, t')}{dt^2} dt + f_1(t') \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} \frac{dG(t, t')}{dt} dt + f_2(t') \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} G(t, t') dt = 1.$$

Ponieważ G jest ciągłe w $t = t'$ i ponieważ obszar całkowania można uczynić dowolnie małym, ostatni człon po lewej stronie tego równania znika. Wykonując pozostałe dwie całki otrzymujemy

$$f_0(t')\left\{\left[\frac{dG(t, t')}{dt}\right]_{t=t'+\varepsilon} - \left[\frac{dG(t, t')}{dt}\right]_{t=t'-\varepsilon}\right\} + f_1(t')[G(t'+\varepsilon, t') - G(t'-\varepsilon, t')] = 1.$$

Ponieważ $G(t, t')$ jest ciągłe w $t = t'$, drugi człon po lewej stronie znika i pozostaje

$$\left[\frac{dG(t, t')}{dt}\right]_{t=t'+\varepsilon} - \left[\frac{dG(t, t')}{dt}\right]_{t=t'-\varepsilon} = \frac{1}{f_0(t')}. \tag{7.40}$$

Korzystając z tej relacji i z faktu, że $G(t, t')$ jest ciągłe w $t = t'$, możemy uzyskać pożyteczne informacje o współczynnikach a_1, a_2, b_1 i b_2 z równań (7.39a) i (7.39b).

Z ciągłości w $t = t'$ otrzymujemy

$$a_1 x_1(t') + a_2 x_2(t') = b_1 x_1(t') + b_2 x_2(t'),$$

podczas gdy z równania (7.40) mamy

$$a_1 \dot{x}_1(t') + a_2 \dot{x}_2(t') - [b_1 \dot{x}_1(t') + b_2 \dot{x}_2(t')] = 1/f_0(t').$$

Kombinując te dwa równania ze sobą znajdujemy następujący układ równań na różnice $(a_1 - b_1)$ i $(a_2 - b_2)$:

$$(a_1 - b_1) x_1(t') + (a_2 - b_2) x_2(t') = 0,$$
$$(a_1 - b_1) \dot{x}_1(t') + (a_2 - b_2) \dot{x}_2(t') = 1/f_0(t').$$

Rozwiązania tych równań mają postać

$$a_1 - b_1 = -\frac{x_2(t')}{f_0(t')W(t')}, \quad a_2 - b_2 = \frac{x_1(t')}{f_0(t')W(t')},$$

gdzie $W(t')$ jest wrońskianem x_1 i x_2 zdefiniowanym przez

$$W(t') = x_1(t')\dot{x}_2(t') - \dot{x}_1(t')x_2(t') = \begin{vmatrix} x_1(t'), & x_2(t') \\ \dot{x}_1(t'), & \dot{x}_2(t') \end{vmatrix}.$$

W postaci wyznacznikowej wrońskian daje się uogólnić na przypadek równania różniczkowego dowolnego rzędu. Podstawiając powyższy rezultat do równań (7.39a, b) widzimy, że $G(t, t')$ może być zapisane jako

$$\begin{aligned} G(t, t') &= b_1 x_1(t) + b_2 x_2(t) - \frac{x_1(t)x_2(t') - x_2(t)x_1(t')}{f_0(t')W(t')}, \quad t > t', \\ G(t, t') &= b_1 x_1(t) + b_2 x_2(t), \quad t < t'. \end{aligned} \tag{7.41a}$$

Pokazanie, że $f_0(t')W(t')$ nigdy nie znika, pozostawione jest jako ćwiczenie dla czytelnika (zadanie 6). Dwie pozostałe stałe b_1 i b_2 mogą być teraz tak wybrane, aby spełnione były właściwe warunki brzegowe. Postać, którą funkcja Greena ostatecznie przyjmuje, zależy bardzo silnie od typu nałożonych warunków brzegowych. Jeżeli warunki brzegowe są typu jednopunktowych warunków charakterystycznych dla mechaniki klasycznej, wtedy w równaniu (7.41a) będziemy żądali, aby $b_1 = 0 = b_2$. Jeżeli to uczynimy, wtedy funkcja Greena dana będzie przez

$$G(t, t') = -\Theta(t - t')\frac{x_1(t)x_2(t') - x_2(t)x_1(t')}{f_0(t')W(t')}, \tag{7.41b}$$

a rozwiązanie wyrażone przez funkcję Greena ma postać

$$x(t) = Ax_1(t) + Bx_2(t) + \int_{t_0}^{t} G(t, t')F(t')dt'. \tag{7.41c}$$

Człon zawierający całkę znika w $t = t_0$, znika także jego pochodna względem t. Zatem, jeżeli zastosujemy jednopunktowe warunki brzegowe $x(t_0) = x_0$, $\dot{x}(t_0) = \dot{x}_0$, to stałe A i B w równaniu (7.41c) wyznaczone będą zupełnie tak samo, jak gdyby człon całkowy nie istniał.

Jeżeli jednak warunki brzegowe są typu warunków dwupunktowych, powiedzmy

$$x(t_0) = x_0, \quad x(t_1) = x_1,$$

wtedy piszemy

$$x(t) = Ax_1(t) + Bx_2(t) + \int_{t_0}^{t_1} G(t, t')F(t')dt'. \tag{7.42}$$

Wydawałoby się wtedy rozsądnym tak wybrać b_1 i b_2 w równaniu (7.41a), aby $G(t_0, t') = 0 = G(t_1, t')$ i wobec tego A i B z równ. (7.42) wyznaczone są przez warunek brzegowy w ten sposób, jak gdyby człon całkowy nie istniał.

Aby zilustrować ten przypadek i także przedstawić proste obliczenie funkcji Greena naszą nową metodą, rozważmy

$$L = \frac{d^2}{dt^2} + \omega_0^2.$$

Wiemy już, że dla jednopunktowych (charakterystycznych dla mechaniki klasycznej) warunków brzegowych funkcja Greena dana jest przez

$$G(t,t') = \Theta(t-t')\frac{\sin[\omega_0(t-t')]}{\omega_0},$$

co łatwo uzyskać kładąc w równaniu (7.35a) $\gamma = 0$. Użyjmy teraz innej metody i nałóżmy dwupunktowe warunki brzegowe. Możemy wybrać

$$x_1(t) = \sin\omega_0 t, \quad x_2(t) = \cos\omega_0 t$$

tak, że

$$W(t') = x_1(t)\dot{x}_2(t) - \dot{x}_1(t)x_2(t) = -\omega_0.$$

Ponieważ $f_0 = 1$, to z równania (7.41a) otrzymujemy

$$G(t,t') = b_1\sin\omega_0 t + b_2\cos\omega_0 t + \frac{\sin\omega_0(t-t')}{\omega_0}, \quad t > t', \tag{7.43a}$$

$$G(t,t') = b_1\sin\omega_0 t + b_2\cos\omega_0 t, \quad t < t'. \tag{7.43b}$$

Jako punkty końcowe wybierzmy dla wygody $t_0 = 0$ i $t_1 = 1$. Wtedy nakładając w równaniu (7.43b) warunki $G(t_0, t') \equiv G(0, t') = 0$ otrzymujemy $b_2 = 0$. Podobnie nakładając warunek $G(t_1, t') \equiv G(1, t') = 0$ w równaniu (7.43a) znajdujemy, że

$$b_1\sin\omega_0 + \frac{1}{\omega_0}\sin\omega_0(1-t') = 0$$

i zatem

$$b_1 = \frac{1}{\omega_0}\operatorname{ctg}\omega_0\sin\omega_0 t' - \frac{1}{\omega_0}\cos\omega_0 t'.$$

Podstawiając obliczone w ten sposób b_1 i b_2 do równań (7.43a) i (7.43b) mamy

$$G(t,t') = \frac{1}{\omega_0}[\operatorname{ctg}\omega_0\sin\omega_0 t - \cos\omega_0 t]\sin\omega_0 t', \quad t > t', \tag{7.44a}$$

$$G(t,t') = \frac{1}{\omega_0}[\operatorname{ctg}\omega_0\sin\omega_0 t' - \cos\omega_0 t']\sin\omega_0 t, \quad t < t'. \tag{7.44b}$$

Zauważcie jak bardzo różny jest ten rezultat od wyniku otrzymanego w przypadku jednopunktowych warunków brzegowych. Interesujące jest stwierdzenie, że jeżeli położymy $\omega_0 \to 0$, otrzymujemy funkcję $G_3(t, t')$ z równania (7.11'), jako funkcję Greena operatora d^2/dt^2 z dwupunktowymi warunkami brzegowymi.

Zauważcie, że gdy $\omega_0 = n\pi$ dla $n = 1, 2, 3, \ldots$, w równaniach (7.44a) i (7.44b) funkcja $G(t, t')$ staje się nieskończona i nasza metoda jest bezużyteczna. Dzieje się tak, ponieważ

$$L = \frac{d^2}{dt^2} + (n\pi)^2$$

ma funkcję własną z zerową wartością własną, mianowicie $\sin(n\pi t)$, która spełnia warunki brzegowe znikając zarówno w $t = 0$ jak i w $t = 1$. W tym przypadku rozkład na funkcje własne w równaniu (7.18') nie może być zastosowany z powodu zerowej wartości własnej w mianowniku wyrażenia na $G(t; t')$, a wtedy równanie

$$Lx = F$$

nie ma oczywiście jednoznacznych rozwiązań, gdyż do każdego rozwiązania możemy dodać dowolną wielokrotność $\sin(n\pi t)$ i otrzymamy w ten sposób inne równie dobre rozwiązanie.

Identyczną analizę można przeprowadzić dla ogólnego liniowego operatora różniczkowego n-tego rzędu, znów z zastrzeżeniem, że $f_0(t) \neq 0$ i przy wykluczeniu zerowych własności własnych.

Jak było wskazane na zakończenie paragrafu 7.1, użycie funkcji Greena nie ogranicza się wcale do rozwiązywania równań różniczkowych z członami niejednorodnymi niezależnymi od x. Jedno z najważniejszych ich zastosowań ma miejsce, gdy niejednorodny człon sam zależy od nieznanej funkcji $x(t)$. Na przykład równanie różniczkowe

$$Lx = f(t, x)$$

może być przepisane jako równanie całkowe o postaci

$$x(t) = \xi(t) + \int G(t, t')f[t', x(t')]dt',$$

gdzie $\xi(t)$ jest liniową kombinacją rozwiązań równania jednorodnego

$$Lx = 0,$$

która spełnia warunki brzegowe, a $G(t, t')$ jest funkcją Greena należącą do operatora L spełniającą swoje własne, odpowiednie warunki brzegowe. Przykładowo dla prostego oscylatora harmonicznego zaburzonego przez jakąś nieharmoniczną siłę postaci $\phi(t)x(t)$ lub $[x(t)]^2$ mamy

$$x(t) = x_0 \cos\omega_0 t + \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \sin\omega_0 t + \int_0^t \frac{1}{\omega_0} \sin\omega_0(t-t')f[t', x(t')]dt',$$

dla jednopunktowych warunków brzegowych $x(0) = x_0$, $\dot{x}(0) = \dot{x}_0$. Zaburzenie postaci $\phi(t)x(t)$ wskazuje, że stała siłowa oscylatora harmonicznego jest zmienna w czasie, i ma formę $k = k_0 + \phi(t)$. Podobnie, jeżeli siła nie jest doskonale harmoniczna, to w celu uzyskania dokładnego opisu siły może być konieczny człon typu $[x(t)]^2$; zdarza się to często w przypadku sił, które wiążą ciała stałe, gdzie małe człony proporcjonalne do kwadratu wychylenia odgrywają ważną rolę. W następnym rozdziale będziemy dyskutować metody, przy pomocy których można rozwiązać takie równania całkowe.

7.4. FUNKCJE GREENA W TRZECH WYMIARACH

Metoda uzyskiwania funkcji Greena w jednym wymiarze opisana przy końcu poprzedniego paragrafu nie nadaje się zwykle dla trójwymiarowych problemów. Ponieważ trzy wymiary odpowiadają rzeczywistemu światu, nie jest zadziwiające, że w tym przypadku problemy są trudniejsze. Jednakże w trzech wymiarach istnieje pewien szczególnie ważny operator, dla którego metoda transformat Fouriera opisana na początku ostatniego paragrafu jest skuteczna. Operatorem tym jest

$$H_0 = \nabla^2 + \lambda,$$

gdzie ∇^2 jest znanym operatorem Laplace'a, dyskutowanym w rozdziale 1. Zastosujemy metodę transformat Fouriera w celu rozwiązania równania

$$H_0\psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \tag{7.45}$$

przyjmując, że $\psi(\mathbf{r})$ i $F(\mathbf{r})$ mają transformaty fourierowskie. Niech

$$\hat{F}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \tag{7.46a}$$

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \tag{7.46b}$$

wtedy z równania (7.45)

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla^2\psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \lambda\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \hat{F}(\mathbf{k}). \tag{7.47}$$

Posłużymy się teraz twierdzeniem Greena, które mówi, że

$$\int_V (F\nabla^2 G - G\nabla^2 F) d^3\mathbf{r} = \int_S (F\nabla G - G\nabla F)\cdot \mathbf{n} dS,$$

gdzie S jest powierzchnią obejmującą objętość V, a $\mathbf{n}$ jest wektorem jednostkowym normalnym do S skierowanym na zewnątrz. Zatem wnioskujemy, że

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla^2\psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_V \psi(\mathbf{r}) \nabla^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_S [e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \nabla e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}]\cdot \mathbf{n} dS. \end{aligned} \tag{7.48}$$

Obszar całkowania jest całą trójwymiarową przestrzenią, a więc obliczając całkę powierzchniową przyjmujemy jako powierzchnię sferę o promieniu R i weźmy granicę dla $R \to \infty$. W tym przypadku $\mathbf{n}$ jest jednostkowym wektorem o kierunku radialnym. Człon powierzchniowy wynosi więc

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_S [e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \nabla e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}]\cdot \mathbf{n} dS = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \lim_{R\to\infty} R^2 \left\{ \int \left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{d\psi}{dr} - \psi \frac{d}{dr} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] d\Omega \right\}_{r=R}, \end{aligned} \tag{7.48'}$$

gdzie $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$. Jeżeli $\psi(\mathbf{r})$ dąży do zera wystarczająco szybko, gdy $|\mathbf{r}| \to \infty$ (z grubsza mówiąc, gdy ψ znika szybciej niż $1/r$), to wtedy człon powierzchniowy będzie znikał i równanie (7.48) redukuje się do

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_V e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \nabla^2\psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = -k^2\hat{\psi}(\mathbf{k}),$$

a równanie (7.47) przyjmuje postać

$$(-k^2 + \lambda)\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \hat{F}(\mathbf{k}). \tag{7.49}$$

Należy teraz odróżnić dwa przypadki: $\lambda \geqslant 0$ i $\lambda < 0$. Rozważmy najpierw ten drugi przypadek i napiszmy $\lambda = -\varkappa^2$. Wtedy $(-k^2-\varkappa^2)$ nigdy nie znika, a zatem

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = -\frac{\hat{F}(\mathbf{k})}{k^2+\varkappa^2} \tag{7.50}$$

i z twierdzenia o całkach Fouriera

$$\psi(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) - \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{\hat{F}(\mathbf{k})}{k^2+\varkappa^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k},$$

gdzie $\xi(\mathbf{r})$ reprezentuje dowolną liniową kombinację rozwiązań równania jednorodnego

$$H_0\phi(\mathbf{r}) = (\nabla^2-\varkappa^2)\phi(\mathbf{r}) = 0.$$

Używając równania (7.45a) otrzymujemy

$$\psi(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')F(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}', \tag{7.51a}$$

gdzie

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2+\varkappa^2} d^3\mathbf{k}. \tag{7.51b}$$

Korzystając z równania (6.51) mamy

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{7.52}$$

Dla zupełności rozwiązania potrzebujemy tylko wyznaczyć z równania (7.51a) funkcję $\xi(\mathbf{r})$. W większości problemów fizycznych chcemy, aby $\psi(\mathbf{r})$ pozostawało ograniczone, gdy $|\mathbf{r}|$ staje się bardzo duże. Zobaczmy, czy jesteśmy w stanie rozwiązać równanie

$$H_0\phi(\mathbf{r}) = (\nabla^2-\varkappa^2)\phi(\mathbf{r}) = 0 \tag{7.53}$$

poddane warunkowi mówiącemu, że $\phi(\mathbf{r})$ jest ograniczone dla $|\mathbf{r}| \to \infty$. Widać, że rozwiązaniem równania (7.53) jest po prostu

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{-\varkappa_1 x} e^{-\varkappa_2 y} e^{-\varkappa_3 z}, \qquad \varkappa^2 = \varkappa_1^2+\varkappa_2^2+\varkappa_3^2. \tag{7.54}$$

Wszystkie jednak te rozwiązania „wybuchają", gdy $|\mathbf{r}|$ staje się duże, z wyjątkiem tych kierunków, w których $\varkappa_1 x$, $\varkappa_2 y$ i $\varkappa_3 z$ są dodatnie. Zatem równanie jednorodne nie ma akceptowalnych rozwiązań i ostateczny rezultat możemy napisać w postaci

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} F(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'. \tag{7.55}$$

Jeżeli $F(\mathbf{r}')$ maleje dostatecznie szybko, gdy $|\mathbf{r}'| \to \infty$ (np. jeżeli $F(\mathbf{r}')$ znika, gdy $|\mathbf{r}'| > R$ dla pewnego R) widzimy wtedy, że dla $|\mathbf{r}| \to \infty$

$$\psi(\mathbf{r}) \to C\frac{e^{-\varkappa r}}{r}.$$

W tym przypadku dokonywane przez nas zaniedbanie członów powierzchniowych w równaniu (7.48) było usprawiedliwione, ponieważ $\psi(\mathbf{r})$ maleje wykładniczo dla dużych wartości $|\mathbf{r}|$.

Równanie (7.55) ma interesujące zastosowanie w teorii elektromagnetyzmu; elektromagnetyczny potencjał $\phi(\mathbf{r})$ wiąże się z rozkładem ładunku $\varrho(\mathbf{r})$ równaniem Poissona

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -4\pi\varrho(\mathbf{r}).$$

Równanie (7.55) w granicy $\varkappa = 0$ mówi nam, że

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}',$$

co prowadzi do znanego rozkładu na multipole dla $\phi(\mathbf{r})$. Dla dostatecznie dużych $|\mathbf{r}|$ funkcja $\phi(\mathbf{r}) \to Q/r$, gdzie

$$Q = \int \varrho(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

Jest to sensowny wynik, ponieważ z dużej odległości każdy rozkład ładunku powinien wyglądać jak ładunek punktowy.

Innym ważnym przypadkiem zastosowania równania (7.55) jest równanie Schrödingera

$$\left(\nabla^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}). \tag{7.56}$$

Dla stanów związanych w potencjale przyciągającym [$V(\mathbf{r}) \leqslant 0$], E jest ujemne. Pisząc zatem $(-2mE/\hbar^2) \equiv \varkappa^2$ otrzymujemy z równania (7.56) przy użyciu równ. (7.55)

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\mathrm{e}^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \tag{7.57}$$

Liniowe równanie różniczkowe na wartości własne zostało zatem przekształcone na liniowe równanie całkowe na wartości własne. Ze względu na skomplikowaną postać funkcji Greena wygodniej jest często pisać takie równania w „przestrzeni pędowej", tzn. napisać w miejsce powyższego całkowe równanie na transformatę Fouriera funkcji $\psi(\mathbf{r})$. Równanie takie dane jest bezpośrednio przez (7.50). Dla równania Schrödingera

$$F(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}),$$

a używając równ. (7.46a) i twierdzenia o splocie [patrz równ. (5.65)] otrzymujemy

$$\hat{F}(\mathbf{k}) = \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2}\int \hat{V}(\mathbf{k}-\mathbf{p})\hat{\psi}(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p},$$

a więc równanie (7.50) przyjmuje postać

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = -\frac{2m}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2}\int \frac{\hat{V}(\mathbf{k}-\mathbf{p})}{k^2+\varkappa^2}\hat{\psi}(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p}, \tag{7.57'}$$

co mogło oczywiście być także otrzymane przez wzięcie transformaty Fouriera obu stron równ. (7.57) i dwukrotne użycie twierdzenia o splocie.

Jako konkretny przykład przypuśćmy, że $V(\mathbf{r})$ dane jest przez potencjał Yukawy

$$V(\mathbf{r}) = -g^2\frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r}. \tag{7.58}$$

Bezpośrednie całkowanie pokazuje, że

$$\hat{V}(\mathbf{q}) = -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} g^2 \frac{1}{q^2+\mu^2}. \tag{7.58'}$$

W tym więc przypadku całkowe równanie Schrödingera ma postać

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{mg^2}{\pi^2\hbar^2} \int \frac{\hat{\psi}(\mathbf{p})}{(k^2+\varkappa^2)[(\mathbf{k}-\mathbf{p})^2+\mu^2]} d^3\mathbf{p}. \tag{7.59}$$

W tej postaci wygodniej jest uważać $\varkappa$ jako ustalone, a g^2 jako wartość własną do wyznaczenia; tzn. łatwiej jest spytać, jak silny potencjał będzie prowadził do danej energii wiązania $\hbar^2\varkappa^2/2m$, niż pytać, jaką energię wiązania wytworzy potencjał o danej sile g^2. Dla potencjału centralnego funkcje falowe mają kątową zależność harmonik sferycznych. Zatem

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \phi_l(k) Y_{lm}(\theta_k, \phi_k) \tag{7.60}$$

i łatwo otrzymać zbiór równań całkowych, po jednym dla każdego $\phi_l(k)$. Przykładowo, gdy $l = 0$, to Y_{lm} jest stałe. Jeżeli podstawimy równ. (7.60) do obu stron równ. (7.59), całkowanie po kątach jest natychmiastowe i jako równanie na naszą funkcję $\phi_0(k)$ otrzymujemy

$$\phi_0(k) = \frac{mg^2}{\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty \frac{1}{k(k^2+\varkappa^2)} \ln\left[\frac{(k+p)^2+\mu^2}{(k-p)^2+\mu^2}\right] \phi_0(p) p\, dp. \tag{7.61}$$

Jednowymiarowe równanie tego typu może być rozwiązane przy użyciu metod, które będą rozwinięte w dwóch następnych rozdziałach. Po prostu dla upewnienia się, że równanie to ma rzeczywiście cokolwiek wspólnego z równaniem Schrödingera, czytelnik, którego bawią żmudne rachunki, może podstawić do równania (7.61) wartości:

$$\phi_0(p) = \frac{C}{\left(p^2+\frac{1}{a_0^2}\right)^2}, \quad E_0 = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}, \quad k^2 = -\frac{2mE_0}{\hbar^2} = +\frac{1}{a_0^2} \tag{7.62}$$

(gdzie $a_0 = \hbar^2/mg^2$ jest promieniem Bohra atomu wodoru). Po wykonaniu całkowania i następnie położeniu $\mu \to 0$ czytelnik znajdzie, że $\phi_0(p)$ jest rzeczywiście rozwiązaniem równ. (7.61).

Wskazówka: należy scałkować raz przez części, aby pozbyć się członu logarytmicznego i następnie wykonać całkę konturową.

Tak powinno być, ponieważ $\phi_0(p)$ dane równaniem (7.62) jest proporcjonalne do transformaty Fouriera funkcji falowej stanu podstawowego atomu wodoru, a E_0 jest odpowiadającą tej funkcji energią stanu podstawowego. Zauważcie przy okazji, że równ. (7.61) mówi nam, iż dla potencjału Yukawy (i także dla potencjału kulombowskiego) $\phi_0(k) \sim 1/k^4$ dla bardzo dużych k, co może być widoczne z równania (7.61) drogą rozwinięcia członu logarytmicznego. Jest to prawdziwe dla każdego stanu z $l = 0$.

Nim czytelnik zaoponuje, że nie ma w tym wszystkim nic nowego, ponieważ każdy wie, iż istnieją ścisłe rozwiązania dla wszystkich stanów związanych atomu wodoru, zwrócimy uwagę, że potencjał kulombowski jest jednym z bardzo niewielu potencjałów, dla których można otrzymać rozwiązania w zwartej postaci. Dla wielu interesujących, występujących w fizyce potencjałów nie można takich rozwiązań otrzymać i trzeba stosować inne metody, na przykład takie, jakie są tutaj przedstawione.

Poradziwszy sobie z przypadkiem $\lambda < 0$, zwrócimy teraz uwagę na bardziej wyrafinowany przypadek $\lambda \geqslant 0$. Wielkość $(-k^2+\lambda)$ z równ. (7.49) przyjmuje wartość zero dla $k = \pm \sqrt{\lambda}$. Nie możemy więc umieścić tej wielkości w mianowniku w takiej postaci. Podamy najpierw sposób ominięcia tej trudności, a później przedyskutujemy jego poprawność. Pomysł polega na założeniu, że $\sqrt{\lambda}$ jest sumą dodatniej liczby rzeczywistej i liczby urojonej

$$\lambda = (q \pm i\varepsilon)^2, \quad \varepsilon > 0. \tag{7.63}$$

Użycie ε jest wyrazem nadziei, że gdy skończymy, możemy przejść z ε do zera i uzyskać poprawny wynik. Zatem równanie (7.49) daje

$$\hat{\psi}_{\pm}(\mathbf{k}) = -\frac{\hat{F}(\mathbf{k})}{k^2-(q\pm i\varepsilon)^2} \tag{7.64}$$

i postępując jak poprzednio otrzymujemy ostatecznie

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) + \int G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')F(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}', \tag{7.65}$$

gdzie

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2-(q\pm i\varepsilon)^2}d^3\mathbf{k}.$$

Ze względu na część urojoną, którą wprowadziliśmy, całka ta nie ma biegunów na drodze całkowania, możemy więc postępować jak w przypadku $\lambda < 0$. Wykonując całkowanie po kątach i rozciągając całkę po k do $-\infty$ tak, jak to zrobiliśmy przy wyprowadzaniu (7.52), uzyskujemy

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{8\pi^2 i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k-q\mp i\varepsilon)(k+q\mp i\varepsilon)} - \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k-q\mp i\varepsilon)(k+q\pm i\varepsilon)}\right]k\,dk.$$

Mamy tu do obliczenia dwie całki. Rozważmy najpierw

$$J_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} k\frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k-q\mp i\varepsilon)(k+q\mp i\varepsilon)}dk.$$

Używając argumentów, którymi posługiwaliśmy się poprzednio w podobnych okolicznościach, możemy obliczyć tę całkę przez całkowanie konturowe, zamykając kontur w górnej półpłaszczyźnie. Zupełnie jak w przypadku $\lambda < 0$, wkład od półokręgu znika i z teorii residuów mamy

$$J_{\pm} = 2\pi i\frac{(\pm q+i\varepsilon)e^{-i(\pm q+i\varepsilon)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{2(\pm q+i\varepsilon)} = \pi i e^{\pm iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{-\varepsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Podobnie

$$K_{\pm} = \int_{-\infty}^{\infty} k\frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k-q\mp i\varepsilon)(k+q\pm i\varepsilon)}dk = -\pi i e^{\pm iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{-\varepsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Stąd

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{-\varepsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{7.66}$$

Wracając do równania (7.65) znajdujemy, że

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{i(\pm q+i\varepsilon)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} F(\mathbf{r}')\,d^3\mathbf{r}'.$$

Zatem wybór ujemnej lub dodatniej części rzeczywistej w równaniu (7.63) ma zasadniczy wpływ na rozwiązanie. W jednym przypadku, gdy $|\mathbf{r}| \to \infty$,

$$\psi_+(\mathbf{r}) \to \xi(\mathbf{r}) + C\frac{e^{iqr}}{r},$$

podczas gdy w drugim

$$\psi_-(\mathbf{r}) \to \xi(\mathbf{r}) + C\frac{e^{-iqr}}{r}.$$

W obu przypadkach C może zależeć od θ i ϕ, ale nie od r. Zatem w przypadkach gdy warunek brzegowy może mieć postać zastrzeżenia co do zachowania się rozwiązań w dużych odległościach (tak jak w kwantomechanicznych problemach rozpraszania), wybór $\lambda = (q+i\varepsilon)^2$ lub $\lambda = (q-i\varepsilon)^2$ odpowiada nałożeniu konkretnego warunku brzegowego we wszystkich punktach jakiejś dwuwymiarowej powierzchni.

Musimy teraz zbadać możliwości, jakie istnieją dla $\xi(\mathbf{r})$, właściwego rozwiązania równania jednorodnego

$$(\nabla^2 + q^2)\phi(\mathbf{r}) = 0.$$

Równanie to ma rozwiązanie $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, gdzie $\mathbf{q}$ jest wektorem o długości q i dowolnym kierunku. Wobec tego kompletne rozwiązanie ma postać

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{i(\pm q+i\varepsilon)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} F(\mathbf{r}')\,d^3\mathbf{r}'. \tag{7.67}$$

Stała A i kierunek $\mathbf{q}$ wyznaczone są przez warunki początkowe.

Szczególnie ważnego przykładu dostarcza nam znów równanie Schrödingera, które piszemy w postaci

$$\left(\nabla^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}).$$

Jeżeli będziemy badać tak zwany *przypadek rozpraszania* ($E \geqslant 0$), wtedy będziemy mieli do czynienia dokładnie z tą sytuacją, którą wzięliśmy pod uwagę wyprowadzając (7.67). Natychmiast znajdujemy następujące *równanie całkowe na funkcję falową*

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{\pm iq_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\psi_{\pm}(\mathbf{r}')\,d^3\mathbf{r}', \tag{7.68}$$

gdzie $q_i = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Równanie to nosi nazwę równania Lippmana–Schwingera; jest ono punktem wyjścia dla większości współczesnych metod badania kwantowomechanicznego zjawiska rozpraszania. Opuściliśmy tu ε przewidując fakt, że granica $\varepsilon \to 0$ nie przedstawia żadnych trudności. Później powrócimy do tego punktu.

Obraz fizyczny przedstawia tutaj falę płaską biegnącą w kierunku $\mathbf{q}_i$ o energii $\hbar^2 q_i^2/2m$, padającą na centrum rozpraszające reprezentowane przez $V(\mathbf{r})$. Natężenie fali określone jest przez A, ale jest ono w zasadzie nieistotne dla fizyki zagadnienia. W dużych odległościach spodziewamy się zaobserwować nie tylko falę padającą, ale także wychodzącą

falę kulistą powstałą w wyniku rozpraszania. W tym przypadku warunek brzegowy wymaga, abyśmy mieli asymptotyczne zachowanie się typu

$$\psi_+(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} + C\frac{e^{iq_ir}}{r};$$

że jest to właściwe rozwiązanie, które zawiera wychodzące fale kuliste, można zobaczyć pamiętając, że zależne od czasu równanie Schrödingera ma postać

$$H\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}.$$

Jeżeli H nie zależy od czasu,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} = \psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t},$$

gdzie $\omega = E/\hbar$ i $\psi(\mathbf{r})$ spełnia niezależne od czasu równanie Schrödingera

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}).$$

Zatem asymptotyczne rozwiązanie równania zależnego od czasu jest następujące

$$\Psi_+(\mathbf{r},t) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + C\frac{e^{i(q_ir-\omega t)}}{r}, \tag{7.69}$$

gdzie $\omega = \hbar q_i^2/2m$. Aby przy wzroście t faza pozostawała stała, r musi wzrastać; wobec tego równanie (7.69) opisuje falę wychodzącą.

Na odwrót, asymptotyczna postać

$$\psi_-(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} + C\frac{e^{-iq_ir}}{r}$$

odpowiada wchodzącej fali kulistej. Ten warunek brzegowy jest również istotny w mechanice kwantowej, gdy dyskutuje się stany końcowe procesów rozpraszania. Będziemy dyskutować oba warunki razem, ponieważ nie wprowadza to żadnych dodatkowych trudności.

Interesujące jest przyjrzenie się trochę bliżej asymptotycznej postaci (7.68). Jeżeli napiszemy

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2} = r\left[1 - \frac{2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}\right]^{1/2}$$

i założymy, że r jest bardzo duże, wtedy rozwinięcie dwumianowe daje

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = r - \mathbf{n}\cdot\mathbf{r}' + \mathcal{O}(1/r),$$

gdzie $\mathcal{O}(1/r)$ reprezentuje człony, które znikają dla dużych r przynajmniej tak szybko jak $1/r$, a $\mathbf{n}$ jest jednostkowym wektorem o kierunku radialnym. Równanie (7.68) przyjmuje zatem dla dużych r postać

$$\psi_\pm(\mathbf{r}) \to \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{\pm iq_ir}}{r}\int e^{\mp iq_i\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\psi_\pm(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'.$$

Kładąc $\mathbf{q}_f = q_i\mathbf{n}$, mamy

$$\psi_\pm(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} + f_\pm^s(\mathbf{q}_f)\frac{e^{\pm iq_ir}}{r}\right], \tag{7.70}$$

gdzie

$$f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f) = -\frac{(2\pi)^{1/2}m}{A\hbar^2}\int e^{\mp i\mathbf{q}_f\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi_{\pm}(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' \tag{7.71}$$

$if_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f)$ nosi nazwę *amplitudy rozpraszania*. Wielkość ta mierzy stosunek strumienia cząstek rozproszonych do strumienia cząstek padających. Nie zależy ona w oczywisty sposób od A, ponieważ $\psi(\mathbf{r})$ będzie proporcjonalne do A. Ponieważ $\psi(\mathbf{r})$ i A mają ten sam wymiar, widzimy z równania (7.70), że $f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f)$ musi mieć wymiar długości. Wielkość $f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f)$ odgrywa w mechanice kwantowej bardzo ważną rolę, ponieważ w eksperymentach rozproszeniowych mierzy się właśnie kwadrat modułu tej wielkości. Wkrótce otrzymamy równanie całkowe dla tej ważnej wielkości. W obecnej chwili zauważymy jedynie, że ponieważ $f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f)$ jest, pomijając stałe wsp´łczynniki, po prostu transformatą Fouriera iloczynu $V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$, możemy posłużyć się twierdzeniem o splocie, aby otrzymać

$$f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f) = -\frac{(2\pi)^{1/2}m}{A\hbar^2}\int \hat{V}(\pm\mathbf{q}_f-\mathbf{p})\hat{\psi}(\mathbf{p})d^3\mathbf{p}. \tag{7.72}$$

Fakt, że $f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f)$ ma prosty związek z transformatą Fouriera $\psi(\mathbf{r})$, sugeruje, iż może być użyteczne uzyskanie równania całkowego na $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ tak samo, jak zrobiliśmy to w równaniu (7.57′) w przypadku stanu związanego ($\lambda < 0$). Jedyna różnica polega na tym, że teraz mamy człon niejednorodny. Z równania (7.68) widzimy, że musi on być transformatą Fouriera funkcji $[A/(2\pi)^{3/2}]e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}}$, co daje

$$\frac{A}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{r} = A\delta(\mathbf{q}_i-\mathbf{k}).$$

(To przedstawienie funkcji δ wprowadzone było w rozdziale 5, równ. (5.63).) Postępując teraz dokładnie tak jak w przypadku równania (7.57′) znajdujemy, że

$$\hat{\psi}_{\pm}(\mathbf{k}) = A\delta(\mathbf{q}_i-\mathbf{k}) - \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2}\int \frac{\hat{V}(\mathbf{k}-\mathbf{p})}{k^2-(q_i-\pm i\varepsilon)^2}\hat{\psi}_{\pm}(\mathbf{p})d^3\mathbf{p}. \tag{7.73}$$

Jest to postać równania Lippmanna-Schwingera w przestrzeni pędów. Równanie (7.72) sugeruje definicję nowej funkcji $f_{\pm}(\mathbf{q})$ w postaci

$$f_{\pm}(\mathbf{q}) = -\frac{(2\pi)^{1/2}m}{A\hbar^2}\int \hat{V}(\mathbf{q}-\mathbf{p})\hat{\psi}_{\pm}(\mathbf{p})d^3\mathbf{p}. \tag{7.74}$$

Mnożąc obie strony równania (7.73) przez

$$-\frac{(2\pi)^{1/2}m}{A\hbar^2}\hat{V}(\mathbf{q}-\mathbf{k})$$

i całkując po całej przestrzeni $\mathbf{k}$ otrzymujemy

$$f_{\pm}(\mathbf{q}) = -\frac{(2\pi)^{1/2}m}{\hbar^2}\hat{V}(\mathbf{q}-\mathbf{q}_i) - \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2}\int \hat{V}(\mathbf{q}-\mathbf{k})\frac{f_{\pm}(\mathbf{k})}{k^2-(q_i\pm i\varepsilon)^2}d^3\mathbf{k}. \tag{7.75}$$

Porównując (7.72) i (7.74) widzimy, że amplituda rozpraszania dana jest przez

$$f_{\pm}^{s}(\mathbf{q}_f) = f_{\pm}(\pm\mathbf{q}_f),$$

gdzie

$$\mathbf{q}_f = q_i\mathbf{n} = \sqrt{2mE/\hbar^2}\cdot\mathbf{n}.$$

Funkcja $f_{\pm}$ ma sens fizyczny tylko dla konkretnej wartości $\mathbf{q}$; gdy obliczamy $f_{\pm}$ dla tej szczególnej wartości, mówimy często, że obliczamy $f_{\pm}$ na „powłoce energetycznej".

Interesujące jest stwierdzenie, jaką postać ma równanie (7.75) dla potencjału Yukawy (7.58), którego transformata Fouriera dana jest przez (7.58'). Podstawiając (7.58') do (7.75) otrzymujemy

$$f_{\pm}(\mathbf{q}) = \frac{2mg^2}{\hbar^2}\frac{1}{(\mathbf{q}-\mathbf{q}_i)^2+\mu^2} + \frac{mg^2}{\pi^2\hbar^2}\int \frac{f_{\pm}(\mathbf{k})d^3\mathbf{k}}{[(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2+\mu^2][k^2-(q_i\pm i\varepsilon)^2]}. \tag{7.76}$$

Pierwszy człon tego równania na $f_{\pm}$ [ogólnie, pierwszy człon równania (7.75)] nosi nazwę *przybliżenia Borna* dla amplitudy rozpraszania, gdy jest obliczony dla $\mathbf{q} = \pm\mathbf{q}_f$. Nie jest nierozsądnie przypuścić, że gdy potencjał jest słaby (powiedzmy, że g^2 jest małe), mogłoby to być dobre przybliżenie dla amplitudy rozpraszania. Zobaczymy później, w jakim sensie możemy tak mówić. Jeżeli położymy $g^2 = e^2$, gdzie e jest ładunkiem elektronu oraz $\mu = 0$, wtedy przybliżenie Borna dla amplitudy rozpraszania na potencjale kulombowskim daje

$$f^s = \frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{(\mathbf{q}_f-\mathbf{q}_i)^2}.$$

Ponieważ $|\mathbf{q}_i| = |\mathbf{q}_f|$, więc możemy to zapisać jako

$$f^s = \frac{me^2}{\hbar^2 q_i^2}\frac{1}{1-\cos\theta},$$

gdzie θ jest *kątem rozpraszania*, tzn. kątem między kierunkiem padania fali płaskiej $\mathbf{q}_i$ a kierunkiem wylatującej cząstki $\mathbf{q}_f$. Pisząc $1-\cos\theta = 2\sin^2(\theta/2)$, mamy

$$f^s = \frac{me^2}{2\hbar^2 q_i^2}\frac{1}{\sin^2(\theta/2)}$$

i stąd

$$|f^s|^2 = \left(\frac{e^2}{2mv_i^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \tag{7.77}$$

ponieważ $\hbar^2 q_i^2/m = mv_i^2$, gdzie v_i jest prędkością padającej cząstki. Równanie (7.77) daje względne prawdopodobieństwo znalezienia cząstki rozproszonej pod kątem θ. Jest to słynny różniczkowy przekrój czynny Rutherforda, wyprowadzony przez niego po raz pierwszy z mechaniki klasycznej.

7.5. RADIALNE FUNKCJE GREENA

W ostatnim paragrafie pokazaliśmy, jak całkowe równanie Schrödingera w przedstawieniu pędowym mogło być zredukowane do równania całkowego jednej zmiennej przez faktoryzację znanej zależności kątowej rozwiązań, danej przez harmoniki sferyczne. Sugeruje to, że podobna redukcja mogłaby być przeprowadzona na samym początku, gdy startowaliśmy z różniczkowego równania Schrödingera w przestrzeni położeń. Można rzeczywiście to zrobić, i sposób, w jaki operuje się w tym przypadku funkcją Greena, demonstruje związek między dwoma ostatnimi paragrafami.

Zapisując równanie Schrödingera w postaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r})+V(r)\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r}),$$

gdzie $V(r)$ zależy tylko od długości $\mathbf{r}$, szukamy rozwiązań w postaci

$$\psi(\mathbf{r})=\phi_l(r)Y_{lm}(\theta,\phi).$$

W zgodzie z paragrafem 5.8, harmoniki sferyczne są funkcjami własnymi kątowej części operatora ∇^2 z wartościami własnymi $l(l+1)$. Zatem $\phi_l(r)$ spełnia równanie

$$\frac{d^2\phi_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\phi_l}{dr}+\frac{2mE}{\hbar^2}\phi_l(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\phi_l(r)=\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\phi_l(r). \tag{7.78}$$

Rozważmy równanie jednorodne

$$\frac{d^2\phi_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\phi_l}{dr}+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r)=0. \tag{7.79}$$

Jeżeli dokonamy zamiany zmiennych

$$x=[2mE/\hbar^2]^{1/2}r, \tag{7.80}$$

równanie na ϕ_l przyjmuje postać

$$\frac{d^2\phi_l}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d\phi_l}{dx}+\left[1-\frac{l(l+1)}{x^2}\right]\phi_l(x)=0. \tag{7.81}$$

Gdy x dąży do zera, rozwiązanie równania (7.81) może dążyć albo do x^l, albo do x^{-l-1}. Sprawdzenie tego powinno być kształcące dla czytelnika. Regularne rozwiązanie, które zachowuje się w pobliżu $x=0$ jak x^l, nazywa się *sferyczną funkcją Bessela* o wskaźniku l, a rozwiązanie, które „wybucha" jak x^{-l-1}, nazywa się *sferyczną funkcją Neumanna o wskaźniku l*.

Rozwiązania równań postaci (7.81) za pomocą szeregu potęgowego są dobrze znane. Nie pójdziemy jednak tą drogą; napiszemy zamiast tego dwa liniowo niezależne rozwiązania w postaci zespolonych przedstawień całkowych. W szczególności twierdzimy, że

$$j_l(x)=\frac{1}{2\pi}\frac{(-2)^l l!}{x^{l+1}}\oint_{C_j}\frac{e^{-ixz}}{(z+1)^{l+1}(z-1)^{l+1}}\,dz \tag{7.82}$$

jest rozwiązaniem równania (7.81), gdy C_j jest dowolnym konturem obejmującym bieguny w $z=\pm1$ w sposób pokazany na rys. 7.5. Drugie rozwiązanie dane jest przez całkowanie po innym konturze C_n pokazanym na rys. 7.6. Piszemy

$$n_l(x)=\frac{1}{2\pi i}\frac{(-2)^l l!}{x^{l+1}}\oint_{C_n}\frac{e^{-ixz}}{(z+1)^{l+1}(z-1)^{l+1}}\,dz. \tag{7.83}$$

Wybieramy ten sposób przedstawienia rozwiązań w celu zademonstrowania możliwości metod zmiennej zespolonej w dziedzinie równań różniczkowych. Wyprowadzenie tych całkowych rozwiązań, startując z rozwiązań typu szeregu potęgowego, odpowiadających dwom sposobom zachowania się w pobliżu początku układu, jest interesującym ćwiczeniem; w tym jednak miejscu zadowolimy się pokazaniem, że całkowe przedstawienia wypisane powyżej rzeczywiście spełniają równanie (7.81).

Aby to pokazać, obliczmy najpierw pierwsze dwie pochodne funkcji

$$f_l(x) = \frac{C_l}{x^{l+1}} \oint \frac{e^{-ixz}}{(z+1)^{l+1}(z-1)^{l+1}}\, dz,$$

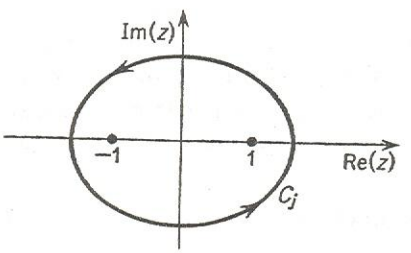
gdzie kontur jest dowolną krzywą obejmującą przynajmniej jeden z punktów $z = \pm 1$. W oczywisty sposób, jeżeli kontur nie obejmuje ani $z = +1$, ani $z = -1$, z twierdzenia Cauchy'ego wynika $f_l(x) \equiv 0$. Pokażemy teraz, że takie $f_l(x)$ spełnia równanie (7.81). Dla pierwszej pochodnej mamy, pomijając stałą C_l,

$$f_l'(x) = -\frac{(l+1)}{x^{l+2}} \oint \frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}}\, dz - \frac{i}{x^{l+1}} \oint \frac{ze^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}} dz.$$

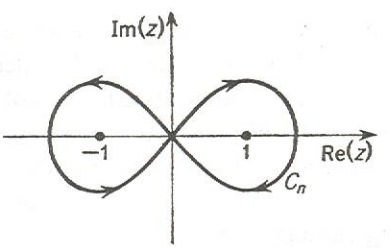
Podobnie

$$f_l''(x) = \frac{(l+1)(l+2)}{x^{l+3}} \oint \frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}} + \frac{2i(l+1)}{x^{l+2}} \oint \frac{ze^{-ixz}dz}{(z^2-1)^{l+1}} -$$

$$- \frac{1}{x^{l+1}} \oint \frac{z^2 e^{-ixz}dz}{(z^2-1)^{l+1}}.$$



Rys. 7.5 Kontur C_j używany dla obliczania sferycznej funkcji Bessela.



Rys. 7.6 Kontur C_n używany dla obliczania sferycznej funkcji Neumanna.

Tworzymy teraz wielkość

$$q_l(x) = f_l''(x) + \frac{2}{x} f_l'(x) + \left[1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right] f_l(x).$$

Aby udowodnić, że $f_l(x)$ spełnia równanie (7.81), wystarczy nam teraz pokazać, iż $q_l(x) = 0$. Używając wyrażeń na $f_l'(x)$ i $f_l''(x)$ otrzymujemy

$$q_l(x) = \frac{2il}{x^{l+2}} \oint \frac{ze^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}} dz - \frac{1}{x^{l+1}} \oint \frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^l} dz.$$

Ale

$$\frac{2lze^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}} = -\frac{d}{dz}\left[\frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^l}\right] - ix\frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^l},$$

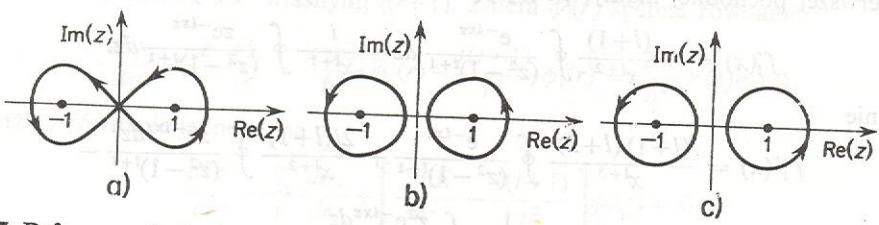
a więc

$$q_l(x) = -\frac{i}{x^{l+2}} \oint \frac{d}{dz}\left[\frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^l}\right] dz = 0,$$

ponieważ całka z pochodnej zupełnej po konturze zamkniętym znika.

Funkcja $f_l(x)$ jest zatem rozwiązaniem równania (7.81) dla dowolnego konturu zamkniętego obejmującego osobliwości. Kontury z rysunków 7.5 i 7.6 wybraliśmy w ten sposób, aby pozostawały w zgodzie ze zwykłymi definicjami. Jest to również powodem naszego

szczególnego wyboru stałych współczynników stojących przed całkami (7.82) i (7.83). Kształt konturu nie ma oczywiście znaczenia; twierdzenie Cauchy'ego mówi nam, że istotne są tylko osobliwości, które on obejmuje. Na przykład dla C_j wybraliśmy kontur kołowy pokazany na rys. 7.5, który obejmuje zarówno $z = 1$, jak i $z = -1$. Równie dobrze możemy jednak ścisnąć ten kontur tak, jak pokazuje rys. 7.7a, następnie rozdzielić go na dwie części, jak pokazuje rys. 7.7b, i wreszcie zdeformować ten kontur do dwu kołowych konturów pokazanych na rys. 7.7c, z których każdy przebiegany jest w kierunku



Rys. 7.7 Deformowanie konturu z rys. 7.5, które prowadzi do dwóch konturów używanych przy obliczaniu sferycznej funkcji Bessela

przeciwnym do ruchu wskazówek zegara: jeden wokół punktu $z = -1$ i drugi wokół $z = +1$. Podobnie kontur o kształcie ósemki definiujący $n_l(x)$ może być przekształcony na dwa kontury kołowe, jeden wokół $z = -1$ przebiegany przeciwnie do ruchu wskazówek zegara, a drugi wokół $z = +1$ przebiegany w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara. Zatem funkcja zdefiniowana przez

$$h_l^{(1)}(x) \equiv j_l(x) + in_l(x) \tag{7.84a}$$

ma przedstawienie

$$h_l^{(1)}(x) = \frac{1}{\pi}\frac{(-2)^l l!}{x^{l+1}} \oint_{C_1} \frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}}\,dz, \tag{7.84b}$$

gdzie C_1 jest konturem otaczającym tylko $z = -1$ skierowanym przeciwnie do ruchu wskazówek zegara [pamiętajcie, że zdefiniowaliśmy $n_l(x)$ z dodatkowym czynnikiem i^{-1} względem $j_l(x)$]. Podobnie

$$h_l^{(2)}(x) \equiv j_l(x) - in_l(x) \tag{7.85a}$$

ma przedstawienie

$$h_l^{(2)}(x) = \frac{1}{\pi}\frac{(-2)^l l!}{x^{l+1}} \oint_{C_2} \frac{e^{-ixz}}{(z^2-1)^{l+1}}\,dz, \tag{7.85b}$$

gdzie C_2 jest konturem obiegającym tylko $z = 1$ w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara. Funkcje $h_l^{(1)}(x)$ i $h_l^{(2)}(x)$ noszą nazwę *sferycznych funkcji Hankela* odpowiednio pierwszego i drugiego rodzaju. Gdybyśmy chcieli, równie dobrze moglibyśmy wybrać jako nasze podstawowe rozwiązania funkcje $h_l^{(1)}(x)$ i $h_l^{(2)}(x)$, zamiast $j_l(x)$ i $n_l(x)$.

Z przedstawień całkowych możemy teraz w bardzo prosty sposób otrzymać własności $j_l(x)$ i $n_l(x)$. Własności te doprowadzą nas z kolei bardzo szybko do poszukiwanej funkcji Greena dla równ. (7.81). Znajdźmy przede wszystkim jawne wzory na obie funkcje. Stosując regułę Leibnitza na pochodną iloczynu dwóch funkcji

$$\frac{d^n}{dx^n}[f(x)g(x)] = \sum_{m=0}^{n} \frac{n!}{m!(n-m)!}\left[\frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}}f(x)\right]\frac{d^m}{dx^m}g(x).$$

łącznie z twierdzeniem o residuach dla bieguna rzędu $l+1$ [równ. (6.17)] znajdujemy, że

$$j_l(x) = \frac{i(-2)^l l!}{l!x^{l+1}} \sum_{m=0}^{l} \frac{l!}{m!(l-m)!} \left\{ \left[\frac{d^{l-m}}{dz^{l-m}} e^{-ixz} \frac{d^m}{dz^m} \left(\frac{1}{z+1} \right)^{l+1} \right]_{z=1} + \right.$$

$$\left. + \left[\frac{d^{l-m}}{dz^{l-m}} e^{-ixz} \frac{d^m}{dz^m} \left(\frac{1}{z-1} \right)^{l+1} \right]_{z=-1} \right\}.$$

Wyrażenie na $n_l(x)$ różni się od powyższego tylko czynnikiem i^{-1} i obecnością znaku minus przed członem pochodzącym od bieguna $z = +1$, ponieważ biegun ten w przypadku $n_l(x)$ obiegany jest w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara. Różniczkowanie jest elementarne i mamy

$$j_l(x) = \frac{i(-2)^l}{x^{l+1}} \sum_{m=0}^{l} \frac{l!}{m!(l-m)!} (-ix)^{l-m}(-1)^m \frac{(l+m)!}{l!} \left[\frac{e^{-ix}}{2^{l+m+1}} + \frac{e^{ix}}{(-2)^{l+m+1}} \right] =$$

$$= \sum_{m=0}^{l} \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{1}{2^m} \frac{1}{x^{m+1}} i^{l-m+1} \left[\frac{(-1)^{-(l-m+1)} e^{ix} + e^{-ix}}{2} \right],$$

gdzie kilkakrotnie skorzystaliśmy z faktu, że $(-1)^m = (-1)^{-m}$. Pisząc $(-1) = e^{i\pi}$ oraz $i = e^{i\pi/2}$ otrzymamy ostatecznie

$$j_l(x) = \sum_{m=0}^{l} \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{1}{2^m} \frac{\cos\left(x - \frac{l-m+1}{2}\pi\right)}{x^{m+1}}. \tag{7.86a}$$

Zmieniając znak przy e^{-ix} w poprzednim wyrażeniu i dzieląc przez i, otrzymujemy

$$n_l(x) = \sum_{m=0}^{l} \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{1}{2^m} \frac{\sin\left(x - \frac{l-m+1}{2}\pi\right)}{x^{m+1}}. \tag{7.86b}$$

Zgodnie z naszymi definicjami sferycznych funkcji Hankela mamy natychmiast

$$h_l^{(1)}(x) = \sum_{m=0}^{l} \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{1}{2^m} \frac{\exp\left(i\left[x - \frac{l-m+1}{2}\pi\right]\right)}{x^{m+1}}, \tag{7.86c}$$

$$h_l^{(2)}(x) = \sum_{m=0}^{l} \frac{(l+m)!}{m!(l-m)!} \frac{1}{2^m} \frac{\exp\left(-i\left[x - \frac{l-m+1}{2}\pi\right]\right)}{x^{m+1}}. \tag{7.86d}$$

Po kilku prostych przekształceniach mamy zatem jawne wyrażenia dla wszystkich sferycznych funkcji Bessela i sferycznych funkcji Hankela. Zbadajmy teraz ich zachowanie asymptotyczne. Przede wszystkim jasne jest, że gdy x dąży do nieskończoności, dominującym członem w każdej sumie będzie $m = 0$, a więc

$$j_l(x) \underset{x\to\infty}{\to} \frac{\cos\left(x - \frac{l+1}{2}\pi\right)}{x}, \tag{7.87a}$$

$$n_l(x) \underset{x\to\infty}{\to} \frac{\sin\left(x-\frac{l+1}{2}\pi\right)}{x}, \tag{7.87b}$$

$$h_l^{(1)}(x) \underset{x\to\infty}{\to} \frac{\exp\left(i\left[x-\frac{l+1}{2}\pi\right]\right)}{x}, \tag{7.87c}$$

$$h_l^{(2)}(x) \underset{x\to\infty}{\to} \frac{\exp\left(-i\left[x-\frac{l+1}{2}\pi\right]\right)}{x}. \tag{7.87d}$$

Gdy $x \to 0$, w sumie na $n_l(x)$ dominuje człon $m = l$ i znajdujemy, że

$$n_l(x) \underset{x\to 0}{\to} \frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{\sin(x-\pi/2)}{x^{l+1}}.$$

Zatem

$$n_l(x) \underset{x\to 0}{\to} -\frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{x^{l+1}}, \tag{7.88a}$$

ponieważ $\sin(x-\pi/2) = -\cos x$, co dąży do -1, gdy x dąży do zera.

Na pierwszy rzut oka wydawałoby się teraz rozsądne zrobić to samo dla $j_l(x)$. Jeżeli tak postąpimy, to szybko dojdziemy do

$$j_l(x) \underset{x\to 0}{\to} \frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{\cos(x-\pi/2)}{x^{l+1}},$$

ale $\cos(x-\pi/2) = \sin x$ i ponieważ $\sin x$ zmienia się jak x, gdy x dąży do zera, stwierdzamy, że $j_l(x)$ wydaje się zmieniać jak x^{-l}. Nim wyciągniemy wniosek, że takie jest zachowanie graniczne, musimy zbadać człon $m = l-1$ w sumie dla $j_l(x)$. Dla bardzo małych x człon ten zmienia się jak

$$\frac{(2l-1)!}{(l-1)!2^{l-1}} \frac{\cos(x-\pi)}{x^l} = -\frac{(2l-1)!}{(l-1)!2^{l-1}} \frac{1}{x^l},$$

jednakże

$$\frac{(2l-1)!}{(l-1)!2^{l-1}} = \frac{(2l)!}{l!2^l},$$

a więc ten człon $m = l-1$ dokładnie redukuje dominujący wkład od członu $m = l$. Nie jest naprawdę zadziwiające, że tak powinno być, ponieważ widzieliśmy wcześniej, iż dwa rozwiązania równania (7.81) zmieniają się albo jak x^{-l-1}, albo x^l. Stwierdziliśmy, że $n_l(x)$ zmienia się jak x^{-l-1}, podejrzewamy więc, że jeżeli wszystko jest w porządku, $j_l(x)$ powinno zmieniać się jak x^l dla małych x. Zatem wyrażenie (7.86a) dla $j_l(x)$ jest raczej mylące, jeżeli chodzi o zachowanie dla małych x. Nie oznacza to, że równanie (7.86a) jest błędne, ale jedynie, że gdy x staje się małe, wiele członów dających wkłady do $j_l(x)$ musi się redukować (redukcja nasila się gwałtownie ze wzrostem l), co w rezultacie prowadzi do pożądanego zachowania się jak x^l dla małych x.

Aby przekonać się, że $j_l(x)$ rzeczywiście zmienia się jak x^l dla małych x, wróćmy do przedstawienia całkowego (7.82) i dokonajmy zamiany zmiennych $\xi = xz$; wtedy

$$j_l(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{(-2)^l l!}{x^{l+2}} \oint_{C_j} \frac{e^{-i\xi}}{(\xi^2/x^2 - 1)^{l+1}} d\xi,$$

gdzie C_j jest dowolnym konturem skierowanym przeciwnie do ruchu wskazówek zegara obejmującym osobliwości $\xi = \pm x$. Przepiszmy to równanie w postaci

$$j_l(x) = \frac{1}{2\pi} (-2)^l l! x^l \oint_{C_j} \frac{e^{-i\xi}}{\xi^{2l+2}} \left[1 - \frac{x^2}{\xi^2}\right]^{-l-1} d\xi.$$

Ale dla każdego domkniętego obszaru na zewnątrz okręgu o promieniu $|\xi| = x$ wielkości w nawiasie kwadratowym odpowiada następujący jednostajnie zbieżny szereg potęgowy

$$\left[1 - \frac{x^2}{\xi^2}\right]^{-l-1} = 1 + (l+1)\frac{x^2}{\xi^2} + \frac{1}{2}(l+1)(l+2)\frac{x^4}{\xi^4} + \ldots = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(l+m)!}{m!l!} \frac{x^{2m}}{\xi^{2m}}.$$

Ponieważ wolno nam to zrobić, wybierzmy jako C_j okrąg leżący na zewnątrz dysku $\xi = x$. Ze względu na jednostajną zbieżność możemy zamienić kolejność sumowania i całkowania, wtedy otrzymamy

$$j_l(x) = \frac{1}{2\pi} (-2)^l l! x^l \left[\oint_{C_j} \frac{e^{-i\xi}}{\xi^{2l+2}} d\xi + (l+1)x^2 \oint_{C_j} \frac{e^{-i\xi}}{\xi^{2l+4}} d\xi + \ldots \right] =$$

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

przez proste zastosowanie rachunku residuów; zatem

$$j_l(x) = \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \left[x^l - \frac{x^{l+2}}{2(2l+3)} + \ldots \right]. \tag{7.88b}$$

Człon wiodący jest proporcjonalny do x^l, jak to przewidywaliśmy. Zainteresowanemu czytelnikowi pozostawiamy pokazanie, że jeżeli zachowuje się wszystkie człony rozwinięcia $[1 - x^2/\xi^2]^{-l-1}$, to

$$j_l(x) = 2^l x^l \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(l+m)! x^{2m}}{m!(2l+2m+1)!} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(x/2)^{2m+l}}{m!\Gamma(l+m+3/2)}, \tag{7.88b'}$$

gdzie skorzystaliśmy z równania (6.54) jako definicji $\Gamma(x)$. Z równania (6.54) wynika prosto [patrz np. wyprowadzenie równ. (6.56)], że

$$\Gamma(n+3/2) = \sqrt{\pi} \frac{(2n+1)!}{2^{2n+1} n!},$$

który to rezultat został użyty przy wyprowadzeniu równania (7.88b').

Jeżeli czytelnik wróci do równania (6.69), to zauważy wyraźne podobieństwo między powyższym wyrażeniem na $j_l(x)$ i danym tam wyrażeniem na $J_n(x)$. Dla całkowitych wartości m i n wiemy, że $(n+m)! = \Gamma(n+m+1)$ i gdy dokonamy tego podstawienia,

oczywiste jest, że równanie (6.69) uogólnia się na niecałkowite wartości n. Używając wtedy równania (7.88b′) po kilku przekształceniach możemy pokazać, że

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, J_{l+1/2}(x).$$

To dlatego funkcje $j_l(x)$ nazywane są sferycznymi funkcjami Bessela; są one ściśle związane z *funkcjami Bessela o połówkowym wskaźniku.*

Dysponując ścisłymi wyrażeniami dla rozwiązań równania (7.81) i całą informacją o ich asymptotycznym zachowaniu się, jesteśmy wreszcie gotowi wyznaczyć funkcję Greena równ. (7.79). Weźmy $j_l(x)$ i $n_l(x)$ jako dwa liniowo niczależne rozwiązania równ. (7.81). Odpowiednimi rozwiązaniami równania (7.79) są $j_l(kr)$ i $n_l(kr)$, gdzie zakładamy najpierw, że $E \geqslant 0$, i definiujemy zgodnie z (7.80)

$$k \equiv \sqrt{2mE/\hbar^2}.$$

Zatem zgodnie z (7.41) funkcja Greena równania (7.79) dana jest przez

$$g_l(r, r') = b_1 j_l(kr) + b_2 n_l(kr) - \frac{1}{W(r')}\,[j_l(kr) n_l(kr') - j_l(kr') n_l(kr)], \tag{7.89a}$$

jeżeli $r > r'$ i

$$g_l(r, r') = b_1 j_l(kr) + b_2 n_l(kr), \tag{7.89b}$$

jeżeli $r < r'$. $W(r')$ jest wrońskianem danym równaniem

$$W(r') = j_l(kr') \frac{d}{dr'} n_l(kr') - n_l(kr') \frac{d}{dr'} j_l(kr').$$

Stosując oznaczenia z paragrafu 7.3 [równ. (7.38)], mamy $f_0(r) = 1$, $f_1(r) = 2/r$, $f_2(r) = k^2 - l(l+1)/r^2$. Widzieliśmy w paragrafie 7.3, że W spełnia równanie

$$\frac{dW}{dr'} = -\frac{f_1(r')}{f_0(r')} W.$$

Podstawiając jawną postać f_0 i f_1 znajdujemy, że

$$\frac{dW}{dr'} = -\frac{2}{r'} W,$$

skąd wnioskujemy, iż $W(r') = C(1/r'^2)$.

Musimy teraz określić C, które zależy od konkretnej normalizacji funkcji. Ponieważ znamy asymptotyczną postać j_l i n_l w dużych odległościach, możemy użyć tych wiadomości dla określenia $W(r')$ dla dużych r' i stąd C. Posługując się równaniem (7.87a) i (7.87b) mamy

$$W(r') \underset{r' \to \infty}{\to} \frac{1}{kr'^2},$$

skąd mamy, że $C = 1/k$. Oczywiście uzyskalibyśmy identyczny wynik stosując wyrażenia dla małych r'. Zatem całkiem ogólnie

$$W(r') = 1/kr'^2$$

i równania (7.89a) i (7.89b) przyjmują postać

$$g_l(r, r') = b_1 j_l(kr) + b_2 n_l(kr) - kr'^2 [j_l(kr) n_l(kr') - j_l(kr') n_l(kr)] \tag{7.90a}$$

dla $r > r'$ i

$$g_l(r, r') = b_1 j_l(kr) + b_2 n_l(kr) \tag{7.90b}$$

dla $r < r'$. Nie chcemy oczywiście, aby rozwiązania równania Schrödingera były osobliwe w początku układu, a więc dla $r < r'$ $g_l(r, r')$ nie może mieć osobliwości w $r = 0$. Jednakże $n_l(kr)$ ma w $r = 0$ osobliwość typu $(1/r)^{l+1}$, musimy więc w rozwiązaniu wyłączyć człon z n_l. Kładziemy zatem $b_2 = 0$. Dla dużych r możliwym warunkiem brzegowym jest żądanie, aby rozwiązanie miało postać e^{ikr}/r, jak to zrobiliśmy w ostatnim paragrafie. Ale jest to asymptotyczna postać funkcji $h_l^{(1)}$, wybieramy więc b_1 w ten sposób, aby zapewnić takie zachowanie się funkcji (7.90b) dla $r > r'$. Jeżeli weźmiemy

$$b_1 = -ikr'^2 h_l^{(1)}(kr'),$$

wtedy dla $r > r'$ używając równ. (7.90a) z $b_2 = 0$ i równ. (7.84a) otrzymujemy

$$g_l(r, r') = -ikr'^2 h_l^{(1)}(kr) j_l(kr').$$

Dla $r < r'$ powyższa wartość b_1 prowadzi do wyniku

$$g_l(r, r') = -ikr'^2 j_l(kr) h_l^{(1)}(kr').$$

Wzór ten dopełnia charakterystki funkcji g_l. Zauważcie, że $g_l(r, r')$ jest ciągłe w $r = r'$, chociaż oczywiście pochodna tej funkcji nie jest w tym punkcie ciągła. Często wprowadza się oznaczenie $r_>$ ≡ większa z liczb (r, r') i $r_<$ ≡ mniejsza z liczb (r, r'). Używając tej konwencji, mamy następujące proste wyrażenie na g_l

$$g_l(r, r') = -ikr'^2 j_l(kr_<) h_l^{(1)}(kr_>). \tag{7.91}$$

Jeżeli napiszemy teraz równanie Schrödingera w postaci

$$\frac{d^2\phi_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\phi_l}{dr} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)\phi_l(r),$$

to na podstawie naszych poprzednich rozważań możemy je natychmiast przekształcić w równanie całkowe

$$\phi_l(r) = Aj_l(kr) + \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty g_l(r, r')V(r')\phi_l(r')\,dr' \tag{7.92}$$

lub też w bardziej jawnej postaci

$$\phi_l(r) = Aj_l(kr) - \frac{2mki}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')\phi_l(r')r'^2\,dr'. \tag{7.93}$$

Dodaliśmy dowolną wielokrotność $j_l(kr)$ tego z rozwiązań równania jednorodnego, które jest regularne w początku układu.

W naszych badaniach równania Schrödingera rozważaliśmy tylko przypadek $E \geqslant 0$, ale łatwo to można naprawić definiując

$$\varkappa^2 \equiv -2mE/\hbar^2$$

i pisząc równanie Schrödingera jako

$$\frac{d^2\phi_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\phi_l}{dr} + \left[-\varkappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)\phi_l(r).$$

Jeżeli teraz wybierzemy pierwiastek kwadratowy z $-\varkappa^2$ z dodatnią częścią urojoną, wtedy rozwiązaniem równania zerowego rzędu są funkcje $j_l(i\varkappa r)$ i $n_l(i\varkappa r)$. W tym przypadku

$h_l^{(1)}(i\varkappa r)$ zachowuje się w dużych odległościach dokładnie w taki sposób, jaki byśmy sobie życzyli w problemie stanu związanego, mianowicie zanika wykładniczo. Wszystkie inne rozwiązania rosną wykładniczo w dużych odległościach, nasze równanie całkowe przyjmuje więc postać

$$\phi_l(r) = \frac{2m\varkappa}{\hbar^2} \int_0^\infty j_l(i\varkappa r_<) h_l^{(1)}(i\varkappa r_>) V(r') \phi_l(r') r'^2 dr'. \tag{7.94}$$

Nie ma członu jednorodnego, bo równanie

$$\frac{d^2\phi_l}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\phi_l}{dr} + \left[-\varkappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi_l(r) = 0$$

nie ma rozwiązania, które spełnia warunki brzegowe regularności w $r = 0$ i wykładniczego zaniku w dużych odległościach.

Interesujące jest porównanie tych jednowymiarowych równań całkowych, np. równ. (7.94) z trójwymiarowymi wynikami ostatniego paragrafu. W przypadku stanu związanego w paragrafie 7.4 równ. (7.57) znaleźliśmy, że

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \tag{7.57}$$

Ponieważ funkcja Greena zależy tylko od $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, możemy rozważyć ją jako funkcję r, r' i x, gdzie x jest cosinusem kąta między $\mathbf{r}$ i $\mathbf{r}'$. Naturalną rzeczą jest rozwinięcie tej funkcji na szereg wielomianów Legendre'a w x. W tym celu definiujemy

$$g_l(r, r') \equiv \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} P_l(x) dx, \tag{7.95}$$

wtedy

$$\frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) g_l(r, r') P_l(x), \tag{7.96}$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu [równ. (5.37) oraz twierdzenie 5.3], że

$$\int_{-1}^{1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}.$$

Podstawiamy teraz równanie (7.96) do równania (7.57), aby otrzymać

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) g_l(r, r') P_l(x) V(r') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'.$$

Używamy następnie twierdzenia o dodawaniu harmonik sferycznych [równ. (5.83)], które mówi nam, że jeżeli x jest cosinusem kąta między $\mathbf{r}$ i $\mathbf{r}'$ i jeżeli kierunek $\mathbf{r}$ określony jest przez kąty θ i ϕ, a kierunek $\mathbf{r}'$ przez kąty θ' i ϕ', to

$$P_l(x) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi'),$$

zatem

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} g_l(r, r') Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') V(r') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \tag{7.97}$$

Szukamy teraz rozwiązań w postaci

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Podstawiając to wyrażenie do równania (7.97) i korzystając z zupełności i ortonormalności harmonik sferycznych otrzymujemy

$$\phi_l(r) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty g_l(r, r')V(r')\phi_l(r')r'^2\,dr',$$

ponieważ $V(r')$ zależy tylko od długości $\mathbf{r}'$.

Można pokazać, że $g_l(r, r')$ zdefiniowane równ. (7.95) równa się $-\varkappa j_l(i\varkappa r_<)h_l^{(1)}(i\varkappa r_>)$, a więc wyniki tych dwóch metod dokładnie się zgadzają. Rezultat ten opiera się na relacji

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = ik\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)P_l(x) \tag{7.98}$$

i równaniu (7.95). Związek powyższy jest bardzo użyteczny w fizyce matematycznej, ale niezależny jego dowód nie byłby tu specjalnie kształcący. Można byłoby oczywiście potraktować rozważania tego paragrafu jako wyprowadzenie równ. (7.98). Zadowolimy się tutaj pokazaniem, że $g_l(r, r')$ zdefiniowane równ. (7.95) jest dla $l = 0$ rzeczywiście równe $-\varkappa j_l(i\varkappa r_<)h_l^{(1)}(i\varkappa r_>)$. W tym celu musimy obliczyć

$$g_0(r, r') = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}P_0(x)dx.$$

Piszemy

$$u = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = (r^2+r'^2-2rr'\cos\theta)^{1/2} = (r^2+r'^2-2rr'x)^{1/2},$$

zatem

$$du = -\frac{rr'dx}{u}, \quad dx = -\frac{u\,du}{rr'}.$$

Stosując tę zamianę zmiennych znajdujemy, że

$$g_0(r, r') = \frac{1}{2rr'}\int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}^{|\mathbf{r}+\mathbf{r}'|}e^{-\varkappa u}du = -\frac{1}{2rr'\varkappa}[e^{-\varkappa|\mathbf{r}+\mathbf{r}'|}-e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}].$$

Przy użyciu zmiennych $r_>$ i $r_<$ wyrażenie to ma postać

$$g_0(r, r') = -\frac{1}{2\varkappa}\frac{e^{-\varkappa(r_>+r_<)}-e^{-\varkappa(r_>-r_<)}}{r_>r_<} = \frac{e^{-\varkappa r_>}}{\varkappa r_>}\left[\frac{e^{\varkappa r_<}-e^{-\varkappa r_<}}{\varkappa r_<}\right] =$$

$$= \varkappa\left[\frac{e^{-\varkappa r_>}}{\varkappa r_>}\right]\left[\frac{\sinh(\varkappa r_<)}{\varkappa r_<}\right],$$

ale z równań (7.86a) i (7.86c) mamy

$$j_0(i\varkappa r_<) = \frac{\sin(i\varkappa r_<)}{i\varkappa r_<} \equiv \frac{\sinh(\varkappa r_<)}{\varkappa r_<} \quad \text{oraz} \quad h_0^{(1)}(i\varkappa r_>) = -\frac{e^{-\varkappa r_>}}{\varkappa r_>},$$

więc

$$g_0(r, r') = -\varkappa j_0(i\varkappa r_<)h_0^{(1)}(i\varkappa r_>).$$

Między metodami paragrafów 7.3 i 7.4 istnieje zatem przyjemny związek, gdy tylko potencjał w równaniu Schrödingera jest sferycznie symetryczny. Zależnie od zagadnienia podejście trójwymiarowe albo jednowymiarowe może być bardziej użyteczne. Oba te podejścia były szeroko używane w kwantowomechanicznych badaniach procesów rozpraszania.

W tym miejscu warto być może ponownie podkreślić wagę warunków brzegowych przy określaniu formy funkcji Greena. W paragrafie niniejszym zredukowaliśmy ∇^2 do jednowymiarowego operatora przez oddzielenie zależności kątowej i w ten sposób pokazaliśmy, jak w bezpośredni sposób zastosować warunki brzegowe odpowiednie dla zagadnienia rozpraszania. „Przepis $i\varepsilon$" użyty w paragrafie 7.4 jest bardzo wygodnym skrótowym sposobem pozwalającym osiągnąć ten sam cel. Jego wielka praktyczna użyteczność bardziej niż usprawiedliwia użycie go, ale dobrze jest pamiętać, że w pewnym sensie jest to „trik". W przypadku ogólnego trójwymiarowego operatora jest często niemożliwe znalezienie takiego przepisu i jesteśmy wtedy w kłopotach, jeżeli nie potrafimy sprowadzić rozważanego operatora do praktycznej jednowymiarowej postaci, gdzie można użyć metod paragrafu 7.3.

W tym kontekście należy jednak zwrócić uwagę, że gdy tylko można uzyskać obiekt spełniający równanie

$$\mathcal{O}G(x, x') = \delta(x-x')$$

wtedy, jeżeli także mamy rozwiązanie równania $\mathcal{O}\psi = 0$, ogólne rozwiązanie równania

$$\mathcal{O}\psi(x) = F(x)$$

może być zapisane jako

$$\psi(x) = \xi(x) + \int G(x, x')F(x')dx'.$$

Istnieje jednak ważna różnica między tymi formalnymi rozwiązaniami a bardzo podobnymi rozwiązaniami wypisanymi w poprzednim paragrafie. Tam wyobraziliśmy sobie, że współczynniki przy rozwiązaniach równania jednorodnego $\mathcal{O}\psi = 0$ występujące w $\xi(x)$ były niezależne od $F(x)$, członu niejednorodnego. Ściśle mówiąc to właśnie rozumieliśmy przez funkcję Greena; była to funkcja, która umożliwiała nam rozwiązanie danego równania operatorowego w taki sposób, że współczynniki występujące w $\xi(x)$ mogły być wyznaczone bez rozważania członu niejednorodnego tego równania. Jednakże, gdy wszystko co wiemy o $G(x, x')$ to to, że spełnia ono równanie $\mathcal{O}G(x, x') = \delta(x-x')$, wtedy w ogólności współczynniki w $\xi(x)$ będą zależeć od F. Nie ma w tym nic dziwnego, ponieważ do dowolnego rozwiązania równania $\mathcal{O}G(x, x') = \delta(x-x')$ możemy dodać dowolną liniową kombinację rozwiązań równania $\mathcal{O}\psi(x) = 0$, a więc równanie $\mathcal{O}G(x, x') = \delta(x-x')$ nie określa jednoznacznie funkcji $G(x, x')$; należy jeszcze scharakteryzować określone warunki brzegowe nałożone na $G(x, x')$.

Przypuśćmy przykładowo, że z jakiegoś powodu jedyną znaną nam funkcją spełniającą

$$(\nabla^2+k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

była funkcja

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{7.99a}$$

Moglibyśmy wtedy z pewnością napisać równanie Schrödingera

$$(\nabla^2+k^2)\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x)\psi(x),$$

jako

$$\psi(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r})-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int G_-(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'. \tag{7.99b}$$

Jeżeli jednak chcemy, aby funkcja $\psi(\mathbf{r})$ zachowywała się dla dużych $|\mathbf{r}|$ jak

$$\psi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+f(\theta,\phi)\frac{e^{+ikr}}{r},$$

to znaczy jeżeli chcemy, aby potencjał wytwarzał tylko wychodzące fale kuliste, wtedy funkcja $\xi(\mathbf{r})$ potrzebna do spełnienia warunków brzegowych nie byłaby po prostu funkcją $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ (wtedy mielibyśmy właśnie wchodzące fale kuliste), ale raczej $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ plus skomplikowana liniowa kombinacja rozwiązań równania jednorodnego

$$(\nabla^2+k^2)\phi(\mathbf{r}) = 0,$$

której współczynniki zależałyby od $V(\mathbf{r})$. W tym celu wygodnie byłoby wziąć rozwiązania w postaci

$$\phi_{lm}(\mathbf{r}) = j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\phi),$$

gdzie odrzucamy rozwiązania zależące od $n_l(kr)$, ponieważ są one osobliwe w początku układu. (Zauważcie, że $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ jest szczególną liniową kombinacją tych $\phi_{lm}(\mathbf{r})$. Jakie są współczynniki tej liniowej kombinacji? Patrz zadanie 7.14.) Czytelnik powinien pokazać, że jeżeli weźmiemy (zadanie 7.15)

$$\xi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-\frac{4imk}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\phi)\int Y_{lm}^*(\theta',\phi')j_l(kr')V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}',$$

to równanie (7.99b) sprowadza się do znanego rezultatu

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'.$$

Jest to po prostu równanie (7.68) z właściwym znakiem w wykładniku zapewniającym *wychodzące fale sferyczne*. Moglibyśmy oczywiście uważać także powyższą sytuację jako dodanie właściwej kombinacji liniowej rozwiązań do „funkcji Greena dla wchodzących fal kulistych" z równania (7.99a) w celu przekształcenia jej w szukaną „funkcję Greena dla wychodzących fal kulistych".

Widzimy zatem, że nawet gdy startujemy od funkcji Greena spełniającej bardzo niewygodne warunki brzegowe, możliwe jest skorzystanie ze swobody wyboru $\xi(\mathbf{r})$ (lub równoważnej swobody dodania rozwiązań równania jednorodnego do $G(x, x')$) w celu pokonania tej trudności. Powinno być jednak jasne, że w trzech wymiarach procedura ta, ogólnie rzecz biorąc, napotyka poważne praktyczne trudności. Na szczęście wiele najważniejszych operatorów występujących w fizyce ma wystarczająco prostą postać na to, aby można było stosunkowo łatwo uzyskać dla nich funkcje Greena, które spełniają fizycznie użyteczne warunki brzegowe. Jednakże zdarza się także często, że nawet dla pros-

tych operatorów warunki brzegowe w trzech (a nawet w dwóch) wymiarach są tak skomplikowane, że wyznaczenie funkcji Greena staje się praktycznie niemożliwe. Następny paragraf poświęcony jest takiemu problemowi.

7.6. ZASTOSOWANIE DO ZAGADNIEŃ DYFRAKCJI

W wielu problemach fizycznych interesujących z praktycznego punktu widzenia warunki brzegowe są matematycznie zdecydowanie skomplikowane, nawet gdy fizyczna sytuacja jest stosunkowo prosta; oznacza to, że odpowiednie równanie operatorowe staje się trudne do rozwiązania raczej ze względu na postać warunków brzegowych niż z powodu skomplikowanego charakteru samego operatora. Jest to typowa sytuacja w elektromagnetyzmie, gdzie obecność przewodzących powierzchni — często niekoniecznie powierzchni „doskonale przewodzących" — powoduje, że rozwiązanie realistycznych problemów staje się niezwykle trudne, nawet gdy zostaną wybrane najwygodniejsze konfiguracje geometryczne. Jednakże ze względu na stosunkowo prostą postać operatora możliwe jest często rozwiązanie równania na funkcję Greena

$$LG(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \delta^3(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}), \tag{7.100}$$

z nałożonym jakimś prostym warunkiem brzegowym. Tak właśnie jest w elektromagnetyzmie, gdzie $L = \nabla^2+k^2$; jeżeli wtedy zapytamy o rozwiązanie typu wychodzących fal kulistych, otrzymujemy funkcję Greena (7.66).

Naturalne jest w tej sytuacji pytanie: czy rozwiązanie równania (7.100) może pomóc nam w uzyskaniu rozwiązania równania

$$L\psi = \phi, \tag{7.101}$$

gdzie ψ musi spełniać dużo bardziej skomplikowane warunki brzegowe niż te, które były nałożone na $G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ w równ. (7.100)?

Aby odpowiedzieć na to pytanie, zróbmy najpierw założenie, że L ma postać

$$\nabla\cdot[f(\mathbf{r})\nabla]+g(\mathbf{r}), \tag{7.102}$$

co jest dostatecznie ogólnym założeniem w wielu zastosowaniach fizycznych. Jeżeli teraz ψ jest dowolnym rozwiązaniem równ. (7.101) i $G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ spełnia równ. (7.100), to

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = \int_V \phi(\mathbf{r})G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})d^3\mathbf{r}+\int_V [\psi(\mathbf{r})LG(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})-G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})L\psi(\mathbf{r})]d^3\mathbf{r}, \tag{7.103}$$

gdzie V jest objętością, w której ma obowiązywać szukane rozwiązanie. Używając konkretnej postaci L [równ. (7.102)], możemy przepisać (7.103) jako

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = \int_V \phi(\mathbf{r})G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})d^3\mathbf{r}+\int_V [\psi(\mathbf{r})\nabla\cdot f(\mathbf{r})\nabla G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})-G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})\nabla f(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r})]d^3\mathbf{r}.$$

Z własności operatora nabla znajdujemy, że

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = \int_V \phi(\mathbf{r})G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})d^3\mathbf{r}+\int_V \nabla[\psi(\mathbf{r})f(\mathbf{r})\nabla G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})-G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})f(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r})]d^3\mathbf{r}.$$

Na podstawie twierdzenia Gaussa ostatnie wyrażenie może być napisane jako całka po powierzchni S obejmującej V. Oznaczając zewnętrzną normalną do powierzchni S przez $\mathbf{n}$ mamy

$$\psi(\rho) = \int_V \phi(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}, \rho) d^3\mathbf{r} + \int_S f(\mathbf{r})[\psi(\mathbf{r}) \nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho) \nabla \psi(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{n} dS. \quad (7.104)$$

Ponieważ założyliśmy, że $\phi(\mathbf{r})$, $f(\mathbf{r})$ i $G(\mathbf{r}, \rho)$ są znane, wszystko co jest potrzebne do obliczenia całek to wartości funkcji ψ i jej pochodnej normalnej na powierzchni S.

Należy jednak podkreślić, że sytuacja jest w rzeczywistości bardziej skomplikowana, niż to sugeruje równ. (7.104), ponieważ funkcja $\psi(\mathbf{r})$ i jej pochodna normalna nie są obie dowolne na powierzchni S. Jako warunek brzegowy moglibyśmy określić $\psi(\mathbf{r})$ na S lub $\nabla\psi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}$ na S, lub nawet kombinację $\psi(\mathbf{r})$ i $\nabla\psi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}$, ale nie obie te wielkości z osobna. Jest to sytuacja znana z jednowymiarowych problemów, gdzie określamy funkcję w punktach końcowych, nie zaś zarówno wartości funkcji, jak i jej pierwszej pochodnej w obu punktach końcowych.

W wielu przypadkach trudność tę można pokonać korzystając ze swobody wyboru $G(\mathbf{r}, \rho)$, która bierze się stąd, że do dowolnego rozwiązania równ. (7.100) możemy dodać dowolną wielokrotność jakiegokolwiek rozwiązania równania $L\xi(\mathbf{r}) = 0$. Jeżeli na przykład jesteśmy w stanie znaleźć $G(\mathbf{r}, \rho)$, które spełnia (7.100) i także znika, gdy $\mathbf{r}$ leży na powierzchni S, wtedy równ. (7.104) przyjmuje postać

$$\psi(\rho) = \int_V \phi(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}, \rho) d^3\mathbf{r} + \int_S f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \nabla G(\mathbf{r}, \rho) \cdot \mathbf{n} dS.$$

Jeżeli zatem warunek brzegowy wiąże się z określeniem $\psi(\mathbf{r})$ na S, to problem jest formalnie rozwiązany. Jest to bardzo powszechna sytuacja w elektrostatyce [$f(\mathbf{r}) \equiv 1$, $g(\mathbf{r}) \equiv 0$ w równ. (7.102)], gdzie znane są liczne szczególne metody rozwiązywania równania (7.100) poddanego żądaniu znikania $G(\mathbf{r}, \rho)$ na powierzchni S. Dyskusję niektórych z tych metod czytelnik może znaleźć w doskonałej książce Jacksona „Elektrodynamika klasyczna". Zauważcie, że równ. (7.100) jest po prostu, z wyjątkiem czynników 4π, równaniem Poissona na potencjał pochodzący od punktowego ładunku umieszczonego w ρ. Powyższa metoda w zastosowaniu do elektrostatyki sprowadza się zatem do zastąpienia równania Poissona dla dowolnego rozkładu ładunku i jakichś skomplikowanych ograniczeń na potencjał na pewnych powierzchniach przez równanie Poissona dla ładunku punktowego i prosty warunek brzegowy. (Zwróćcie uwagę, że jeżeli S ma skomplikowany kształt, warunek brzegowy nawet postaci „$G(\mathbf{r}, \rho)$ znika dla $\mathbf{r}$ na S" może nie być w rzeczywistości taki „prosty".)

Mogą jednakże zaistnieć sytuacje, w których nawet wyszczególnienie warunków brzegowych staje się trudne. Niemniej na podstawie rozważań fizycznych bywa możliwe zorientowanie się, czego należy się spodziewać od funkcji $\psi(\mathbf{r})$ i jej pochodnej normalnej na granicy jakiegoś obszaru.

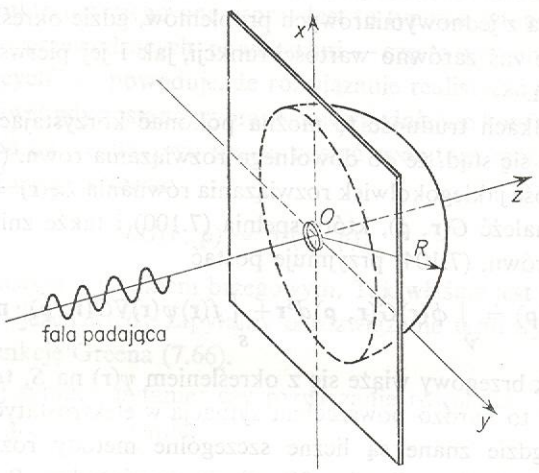
Pięknym przykładem takiej sytuacji i jednym z najważniejszych zastosowań równ. (7.104) jest problem ugięcia fal na jakiejś przeszkodzie. Ze ściśle matematycznego punktu widzenia teoria dyfrakcji jest jednym z najbardziej skomplikowanych zagadnień fizyki klasycznej. W tym przypadku wymagane jest rozwiązanie równań Maxwella w obecności kłopotliwych granic, takich jak ekran z otworem i tylko w bardzo szczególnych okolicznościach można uzyskać ścisłe rozwiązania. Zachowując jednakże niefrasob-

liwy nastrój tego rozdziału spróbujmy rozważyć powyższy problem posługując się równaniem (7.104) razem z pewnymi fizycznymi koncepcjami.

Wyobraźmy sobie falę płaską $e^{ik_i \cdot r}$ padającą od lewej strony na płaską powierzchnię, która posiada otwór taki jak na rys. 7.8. Środek tego otworu znajduje się w środku układu współrzędnych. Ekran leży w płaszczyźnie xy. Wszędzie w przestrzeni, z wyjątkiem powierzchni ekranu, funkcja opisująca falę musi spełniać równanie falowe

$$\nabla^2\psi + k_i^2\psi = 0.$$

Interesuje nas rozwiązanie po prawej stronie ekranu, weźmy więc jako naszą objętość półkulę o dużym promieniu centrowaną w środku układu współrzędnych, której płaski spód leży infinitezymalnie blisko ekranu.



Rys. 7.8 Schematyczne przedstawienie problemu dyfrakcyjnego.

Co możemy teraz powiedzieć o naturze rozwiązań na granicy tego obszaru? Będziemy z pewnością oczekiwać, że w dużych odległościach od rozpraszającego centrum (otworu w ekranie) rozwiązanie będzie miało charakter wychodzącej fali kulistej. Zatem w pobliżu zakrzywionej części półkolistej powierzchni fala powinna mieć postać

$$\psi(\mathbf{r}) \sim f(\theta, \phi)\frac{e^{ik_i r}}{r}. \tag{7.105}$$

Wobec tego funkcja Greena odpowiednia dla równania falowego w tym obszarze ma postać

$$G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik_i|\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}|}}{|\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}|}, \tag{7.106}$$

co daje, w zgodzie z poprzednimi argumentami, wychodzące fale kuliste w równ. (7.104). A co z płaskim spodem półkuli? Tutaj zrobimy rozsądne fizyczne założenie, że na drugiej stronie „nieprzezroczystego" ekranu (po stronie przeciwnej do tej, na którą pada fala) rozwiązanie powinno być identycznie równe zeru. W otworze, jako pierwsze przybliżenie, weźmiemy samą falę padającą

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_i \cdot r}.$$

Używamy teraz tych fizycznych założeń w celu wypisania równania (7.104) w postaci odpowiedniej dla omawianego przypadku. Mamy

$$\psi(\rho) = \int_{\text{otw.}} [e^{ik_i\cdot r}\nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla e^{ik_i\cdot r}]\cdot \mathbf{n}dS +$$

$$+ \int f(\theta, \phi)\left[\frac{e^{ik_i r}}{r}\frac{\partial}{\partial r}G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ik_i r}}{r}\right]_{r=R} R^2 d\Omega. \tag{7.107}$$

W pierwszej całce $\mathbf{n}$ jest jednostkowym wektorem skierowanym przeciwnie do osi z (zewnętrzna normalna) i całka rozciąga się na cały otwór. W drugiej całce mamy tylko całkowanie kątowe po zakrzywionej części półkuli. Pochodne w drugiej całce są pochodnymi radialnymi, ponieważ zewnętrzna normalna ma na sferycznej powierzchni kierunek radialny. R jest promieniem półkuli i może być przyjęte dowolnie duże. Chcemy pokazać, że ten drugi człon znika, gdy $R \to \infty$. Nie wystarcza stwierdzenie, że rozwiązanie maleje jak $1/r$, ponieważ w elemencie objętościowym znajduje się czynnik r^2. Jednakże używając wartości $G(\mathbf{r}, \rho)$ danej równaniem (7.106) łatwo pokazać, że druga całka (7.107) maleje jak $1/R$. Człon ten zatem znika, jeżeli weźmiemy dostatecznie duży promień półkuli i

$$\psi(\rho) = \int_{\text{otw.}} e^{ik_i\cdot r}\nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla e^{ik_i\cdot r}]\cdot \mathbf{n}dS. \tag{7.108}$$

Dla ułatwienia sobie pracy przyjmijmy, że $\mathbf{k}_i$ ma kierunek z, co oznacza, że fala padająca jest prostopadła do ekranu. Teraz $\mathbf{n}$ jest skierowane przeciwnie do osi z i $\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} = 0$, ponieważ powierzchnia, po której całkujemy, leży w płaszczyźnie xy. Równ. (7.107) sprowadza się zatem do

$$\psi(\rho) = \int_{\text{otw.}} \left[ik_i G(\mathbf{r}, \rho) - \frac{\partial}{\partial z}G(\mathbf{r}, \rho)\right] dS. \tag{7.109}$$

Nawet w tej postaci całkowanie jest bardzo trudne, dalej więc ułatwimy sobie życie rozważając $|\rho|$ duże w porównaniu z typowymi rozmiarami otworu. Możemy wtedy użyć asymptotycznej postaci $G(\mathbf{r}, \rho)$ dyskutowanej w paragrafie 7.4

$$-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik_i|\mathbf{r}-\rho|}}{|\mathbf{r}-\rho|} \underset{|\rho|\to\infty}{\to} -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik_i\rho}}{\rho}e^{-ik_f\cdot r}, \tag{7.110}$$

gdzie $\mathbf{k}_f$ jest wektorem o długości k_i i kierunku danym przez kąty (θ, ϕ), te same, które określają orientację ρ. Korzystając z faktu, że

$$(k_f)_z = |k_f|\cos\theta = k_i\cos\theta$$

i wstawiając (7.110) do (7.109) otrzymujemy

$$\psi(\rho) = -\frac{ik_i}{4\pi}\frac{e^{ik_i\rho}}{\rho}(1+\cos\theta)\int_{\text{otw.}} e^{-ik_f\cdot r}dS. \tag{7.111}$$

Jest to ogólne wyrażenie opisujące falę ugiętą na otworze w obszarze, którego odległość od początku układu jest dużo większa od rozmiarów otworu. Dokładne rozwiązanie zależy oczywiście od szczegółów geometrii. Jednakże szereg ważnych rezultatów wynika natychmiast z ogólnego równania (7.111).

Po pierwsze można pokazać, że jeżeli długość promieniowania jest mała w porównaniu z rozmiarami otworu, w kierunku do przodu występuje bardzo silne natężenie promieniowania. W tym kierunku $\theta = 0$ i $\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r} = 0$, ponieważ $\mathbf{k}_f$ jest prostopadłe do ekranu, na którym $\theta = \pi/2$; zatem

$$[\psi(\boldsymbol{\rho})]_{\text{do przodu}} = -\frac{ik_i A}{2\pi}\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}, \tag{7.112}$$

gdzie A jest powierzchnią otworu. Ponieważ $k_i = 2\pi/\lambda$, widzimy, że

$$[\psi(\boldsymbol{\rho})]_{\text{do przodu}} = \psi(\varrho, \theta = 0, \phi) = -i\frac{A}{\lambda}\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}.$$

Jeżeli oznaczymy przez I_0 liczbę fotonów padających na centymetr kwadratowy ekranu na sekundę, wtedy liczba fotonów na sekundę w odległości $|\boldsymbol{\rho}| = R$ przychodzących w kącie bryłowym $d\Omega$ wokół pewnego kierunku (θ, ϕ) dana jest przez

$$I(\theta, \phi) = I_0|\psi(R, \theta, \phi)|^2 R^2 d\Omega.$$

Dla $\theta = 0$ wynosi to

$$I(0, \phi) = (I_0 A)(A/\lambda^2)d\Omega,$$

co jest bardzo duże, jeżeli $\lambda^2 \ll A$. Zauważcie, że $I_0 A$ jest po prostu liczbą fotonów padających w ciągu sekundy na otwór. Jeżeli λ jest dużo mniejsze niż typowe rozmiary otworu, możliwe jest obliczenie całkowitego natężenia ugiętego promieniowania przez scałkowanie $I(\theta, \phi)$ po wszystkich kątach, posługując się równ. (7.111) dla $\psi(R, \theta, \phi)$. W takim przypadku całkowanie daje dokładnie $I_0 A$, tzn. w granicy małych długości fal liczba ugiętych fotonów przybywających na sekundę na całą półkulę jest dokładnie równa liczbie fotonów padających na sekundę na otwór.

Z podanych poniżej przykładów będzie jasne, że $\psi(\varrho, \pi/2, \phi)$ — rozwiązanie na powierzchni ekranu — i jego pochodna normalna są bardzo małe co do bezwzględnej wartości w porównaniu z $|\psi(\varrho, 0, \phi)|$. Zatem warunek brzegowy na ekranie, choć nie jest spełniony dokładnie, jest w tym przypadku spełniony w przybliżeniu.

Sprawdźmy teraz, jak wygląda $\psi(\boldsymbol{\rho})$ dla kilku otworów o prostych kształtach. Najprostszym przypadkiem jest prostokąt o bokach a i b ze środkiem w początku układu, wtedy

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{ik_i}{4\pi}(1+\cos\theta)\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}\int_{-a/2}^{a/2} e^{ik_x x}dx \int_{-b/2}^{b/2} e^{ik_y y}dy =$$

$$= -\frac{ik_i}{\pi}(1+\cos\theta)\frac{\sin(k_x a/2)\sin(k_y b/2)}{k_x k_y}\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}.$$

W kierunku do przodu ($\theta = 0$) ma to postać równ. (7.112), ponieważ

$$k_x = k_i \sin\theta\cos\phi$$

i

$$k_y = k_i \sin\theta\sin\phi.$$

Interesujące jest także rozważenie $\psi(\boldsymbol{\rho})$ na powierzchni ekranu (dla $\theta = \pi/2$). Znajdujemy, że

$$\psi(\varrho, \theta = \pi/2, \phi) = -\frac{i}{\pi k_i}\frac{\sin[(k_i a/2)\cos\phi]\sin[(k_i b/2)\sin\phi]}{\sin\phi\cos\phi}\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}.$$

Jeżeli λ jest małe, k_i jest duże, a więc $\psi(\varrho, \theta = \pi/2, \phi)$ jest małe na ekranie, jak to powiedzieliśmy powyżej. Pochodna normalna do ekranu jest także bardzo mała, gdy $\theta = \pi/2$. Zatem warunek brzegowy na ekranie jest w przybliżeniu spełniony, przynajmniej dla dużych ϱ.

Szczególnie wygodną sytuację stanowi otwór kołowy. Oznaczając punkt na powierzchni otworu przez $(r, \theta_r = \pi/2, \phi_r)$ i $\mathbf{k}_f$ przez (k_i, θ, ϕ) mamy

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{ik_i}{4\pi}\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}(1+\cos\theta)\int_0^R r\,dr\int_0^{2\pi} d\phi_r e^{-ik_i r\sin\theta\cos(\phi_r-\phi)},$$

gdzie R jest promieniem otworu. Skorzystaliśmy tu z faktu, że jeżeli α jest kątem między dwoma wektorami, których kierunki określone są przez (θ, ϕ) i (θ_r, ϕ_r), to

$$\cos\alpha = \cos\theta\cos\theta_r + \sin\theta\sin\theta_r\cos(\phi_r-\phi).$$

Ze względu na symetrię obrotową wokół osi z końcowy wynik nie może zależeć od ϕ, zmieniając zatem zmienne $x = k_i r\sin\theta$, otrzymujemy

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{i}{2k_i}\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}\frac{(1+\cos\theta)}{\sin^2\theta}\int_0^{k_iR\sin\theta} x\,dx\left[\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-ix\cos\beta}d\beta\right].$$

Człon w nawiasie łatwo można przekształcić do całkowego przedstawienia funkcji Bessela o zerowym wskaźniku (paragraf 6.9). Zatem

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{i}{2k_i}\frac{(1+\cos\theta)}{\sin^2\theta}\int_0^{k_iR\sin\theta} xJ_0(x)dx\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}.$$

Posługując się równaniem (6.69), które daje nieskończony szereg dla funkcji Bessela o wskaźniku całkowitym, czytelnik może pokazać, że

$$xJ_0(x) = \frac{d}{dx}[xJ_1(x)],$$

a więc ostatecznie

$$\psi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{iR}{2}\frac{(1+\cos\theta)}{\sin\theta}J_1(k_iR\sin\theta)\frac{e^{ik_i\rho}}{\varrho}. \tag{7.113}$$

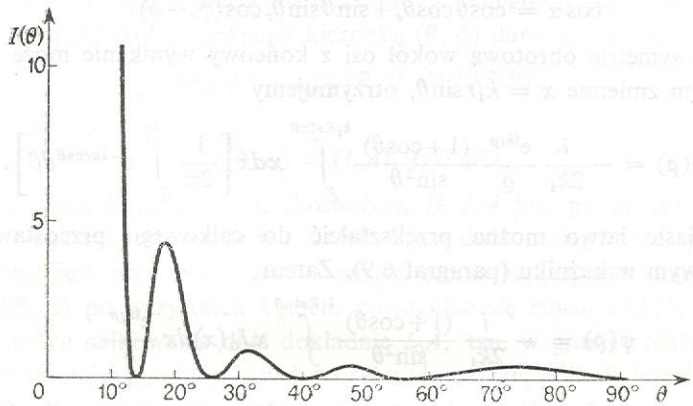
Wynik ten zgadza się z ogólnym rezultatem (7.112), gdy $\theta = 0$, bo jak można stwierdzić z równ. (6.69), $J_1(x) \to x/2$, gdy $x \to 0$. Ponieważ $J_1(x) \sim 1/\sqrt{x}$ dla dużych x, widzimy, że gdy $\theta = \pi/2$, funkcja $\phi(\boldsymbol{\rho})$ i jej pochodna normalna są na ekranie bardzo małe, jeżeli długość fali jest mała w porównaniu z R. Ponownie warunki brzegowe na ekranie są w przybliżeniu spełnione. Funkcje Bessela oscylują, a więc jeżeli postawimy ekran poza kołowym otworem w odległości, która jest duża w porównaniu z rozmiarami otworu, promieniowanie padające na ten ekran wytworzy koliste pierścienie, zaczynając od intensywnie jasnego centralnego kręgu, następnie będzie ciemny pierścień odpowiadający przejściu funkcji Bessela przez pierwsze zero itd. Rys. 7.9 pokazuje wielkość

$$|\psi(\varrho, \theta, \phi)|^2\varrho^2,$$

która jest proporcjonalna do natężenia. Wielkość ta również nie zależy od ϕ ze względu na symetrię wokół osi z. Rozkład natężeń przedstawiony na rys. 7.9 potwierdzony został eksperymentalnie.

Nasuwa się interesujące pytanie: jaki otrzymalibyśmy wynik, gdybyśmy zamiast promieniowania padającego na ekran z otworem, rzucili promieniowanie na mały ekran dokładnie o rozmiarach otworu? Ekran tego typu nosi nazwę ekranu dopełniającego do poprzednio rozpatrywanego; ekran plus jego dopełnienie tworzą kompletnie nieprzezroczystą barierę. W celu rozwiązania tego problemu używamy konfiguracji pokazanej na rys. 7.8, z tym że „ekran" jest teraz przezroczysty, a „otwór" nieprzezroczysty. Aby warunki brzegowe w płaszczyźnie xy były zgodne z naszymi poprzednimi rozważaniami, weźmy ψ_c po prostu w postaci $e^{ik_i\cdot r}$ w części przezroczystej i równe identycznie zeru poza częścią nieprzezroczystą. Na zakrzywionej powierzchni półkuli spodziewamy się w dużych odległościach znaleźć rozproszoną falę kulistą nałożoną na padającą falę płaską

$$\psi_c(\mathbf{r}) \sim e^{ik_i r} + F(\theta, \phi) e^{ik_i\cdot r}/r.$$



Rys. 7.9 Natężenie ugiętego promieniowania w dowolnych jednostkach jako funkcja kąta. Krzywa osiąga $\theta = 0$ dopiero dla $I = 256$. Krzywa powyższa odpowiada kołowemu otworowi z $kR = 16$ w równ. (7.113). Praktycznie całe natężenie skupione jest w pierwszym maksimum.

Z równania (7.104) mamy dla „dopełniającego rozwiązania"

$$\psi_c(\rho) = \int_{xy-\text{otw.}} [e^{ik_i\cdot r}\nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla e^{ik_i r}]\cdot \mathbf{n}\, dS +$$

$$+ \int_{\text{półkula}} [e^{ik_i\cdot r}\nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla e^{ik_i\cdot r}]\cdot \mathbf{n}\, dS +$$

$$+ \int_{\text{półkula}} F(\theta, \phi)\left[\frac{e^{ik_i r}}{r} - \nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla\frac{e^{ik_i r}}{r}\right]\cdot \mathbf{n}\, dS, \qquad (7.114)$$

gdzie użyliśmy naszych założeń odnośnie warunków brzegowych spełnianych przez ψ. W równ. (7.114) literki $xy-$otw. oznaczają, że całka przebiega po całej powierzchni xy minus otwór. Widzieliśmy już uprzednio, że ostatni człon równ. (7.114) znika, gdy promień półkuli staje się bardzo duży, zatem

$$\psi_c(\rho) = \int_{xy-\text{otw.}} [e^{ik_i\cdot r}\nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla e^{ik_i\cdot r}]\cdot \mathbf{n}\, dS +$$

$$+ \int_{\text{półkula}} [e^{ik_i\cdot r}\nabla G(\mathbf{r}, \rho) - G(\mathbf{r}, \rho)\nabla e^{ik_i\cdot r}]\cdot \mathbf{n}\, dS. \qquad (7.115)$$

Jeżeli porównamy ten wynik z równ. (7.108) na $\psi(\rho)$, widzimy, że suma $\psi(\rho)+\psi_c(\rho)$ spełnia prosty związek

$$\psi(\rho)+\psi_c(\rho) = \int_S [e^{ik_i\cdot r}\nabla G(r,\rho) - G(r,\rho)\nabla e^{ik_i r}]\cdot n\,dS, \tag{7.116}$$

gdzie S oznacza, jak poprzednio, całą zamkniętą powierzchnię. Używając teraz twierdzenia Greena i pamiętając, że $e^{ik_i\cdot r}$ jest rozwiązaniem równania falowego, widzimy iż

$$\psi(\rho)+\psi_c(\rho) = e^{ik_i\cdot\rho}. \tag{7.117}$$

Ten piękny prosty wynik znany jest w optyce jako *zasada Babineta* lub zasada dopełniających się ekranów.

Jeżeli użyjemy równ. (7.111) dla $\psi(\rho)$ w odległościach, które są duże w porównaniu z rozmiarami ekranu, to

$$\psi_c(\rho) = e^{ik_i\cdot\rho} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ik_i\cdot\rho}}{\varrho}, \tag{7.118a}$$

gdzie

$$f(\theta,\phi) = \frac{ik_i}{4\pi}(1+\cos\theta)\int_{\text{otw.}} e^{-ik_f\cdot r}\,dS. \tag{7.118b}$$

Równania (7.118a) i (7.118b) mają tę samą postać co wyniki, które otrzymaliśmy przy naszych badaniach równania Lippmanna–Schwingera. W tym ostatnim przypadku amplituda rozpraszania $f(\theta,\phi)$ dana była poprzez potencjał i funkcję falową. Tutaj otrzymaliśmy $f(\theta,\phi)$ wyrażone za pomocą warunków brzegowych.

Zgodnie z równ. (7.113) rozpraszanie fali płaskiej przez kołową nieprzezroczystą przeszkodę opisane jest przez funkcję

$$f(\theta,\phi) = \frac{iR}{2}\frac{(1+\cos\theta)}{\sin\theta}J_1(k_iR\sin\theta), \tag{7.119}$$

gdzie R jest promieniem przeszkody i $k_i = 2\pi/\lambda$ jak przedtem. Dokonano kilku interesujących prób zrozumienia kwantowomechanicznego rozpraszania krótkofalowego (o dużej energii) cząstek (np. cząstek α) na jądrach przez analogię z ugięciem fal na przeszkodzie. Dla rozsądnych wartości promieni jąder amplitudy rozpraszania dane równaniem (7.119) pasują do danych doświadczalnych całkiem dobrze. Wykazują one silne maksimum w kierunku do przodu i zachowują się oscylująco przy odchodzeniu od tego maksimum w sposób bardzo podobny do pokazanego na rys. 7.8. Stanowi to przyjemną ilustrację falowej natury cząstek.

7.7. FUNKCJE GREENA ZALEŻNE OD CZASU: PIERWSZY RZĄD

W kilku ostatnich paragrafach skupiliśmy naszą uwagę na zastosowaniach metody funkcji Greena do rozwiązywania pewnych cząstkowych równań różniczkowych, w których czas nie odgrywał zasadniczej roli. W tym paragrafie zaczynamy rozważać zagadnienia, w których ewolucja układu w czasie (jak również w przestrzeni) jest istotna.

Rozważcie takie równanie

$$H\psi + \frac{\partial\psi}{\partial\tau} = 0, \tag{7.120}$$

gdzie τ jest zmienną czasową, a H jest operatorem niezależnym od czasu, o którym zakłada się, że posiada zupełny układ funkcji własnych. Istnieją liniowe równania tego typu i ich zastosowanie rozciąga się na wszystkie działy fizyki. Znanym przykładem jest równanie przewodnictwa cieplnego

$$\nabla^2 T = \frac{c}{k}\frac{\partial T}{\partial t},$$

gdzie T jest temperaturą, c ciepłem właściwym na jednostkę objętości, a k jest przewodnictwem cieplnym. Jeżeli oznaczymy $H = \nabla^2$ i $\tau = kt/c$, wtedy równanie to ma dokładnie taką samą postać jak (7.120). Zależne od czasu równanie Schrödingera ma również tę postać, mianowicie

$$\mathscr{H}\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t},$$

gdzie $\mathscr{H}$ jest całkowitym hamiltonianem układu opisanego funkcją falową ψ. Na przykład dla cząstki swobodnej

$$\mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2.$$

Równanie Schrödingera ma więc postać

$$-\nabla^2\psi = \frac{2im}{\hbar}\frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Jeżeli zatem położymy $H = -\nabla^2$ i $\tau = (i\hbar/2m)t$, równanie to ma dokładnie tę samą postać co równanie przewodnictwa cieplnego. Innym przykładem tego typu jest równanie dyfuzji

$$\nabla^2 \varrho = \frac{1}{a^2}\frac{\partial \varrho}{\partial t},$$

gdzie ϱ jest gęstością dyfundującej substancji, natomiast a jest stałą dyfuzji. W tym przypadku położenie $H = -\nabla^2$ i $\tau = a^2 t$ przeprowadza znów powyższe równanie do zasadniczej postaci (7.120).

Ponieważ założyliśmy, że H ma zupełny układ ortonormalnych funkcji własnych

$$H\phi_m = \lambda_m \phi_m,$$

możemy rozwinąć rozwiązanie równ. (7.120) na te funkcje

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sum_m A_m(\tau)\phi_m(\mathbf{r}).$$

Ponieważ $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ zależy od τ, będą więc od τ zależały także funkcje $A_m(\tau)$. Zatem

$$H\psi = H\Big[\sum_m A_m(\tau)\phi_m(\mathbf{r})\Big] = \sum_m A_m(\tau) H\phi_m(\mathbf{r}) = \sum_m \lambda_m A_m(\tau)\phi_m(\mathbf{r}),$$

mamy też

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \sum_m \frac{\partial A_m(\tau)}{\partial \tau}\phi_m(\mathbf{r}).$$

Równanie (7.120) przyjmuje wobec tego postać

$$\sum_m \left[\lambda_m A_m(\tau) + \frac{dA_m(\tau)}{d\tau}\right]\phi_m(\mathbf{r}) = 0.$$

Ponieważ $\phi_m(\mathbf{r})$ tworzą układ zupełny i są ortonormalne, to wnioskujemy natychmiast, że

$$\frac{dA_m(\tau)}{d\tau} + \lambda_m A_m(\tau) = 0$$

dla wszystkich m. Rozwiązanie dla $A_m(\tau)$ dane jest po prostu przez

$$A_m(\tau) = A_m(0)\mathrm{e}^{-\lambda_m \tau}$$

i zatem otrzymujemy

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sum_m A_m(0)\phi_m(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-\lambda_m \tau}.$$

Aby teraz rozwiązanie różniczkowego równania cząstkowego, które jest pierwszego rzędu w pochodnej czasowej, było kompletne, musimy wyspecjalizować warunki brzegowe dla $\tau = 0$. Zakładając, że mamy $\psi(\mathbf{r}, 0)$ (na przykład w wypadku równania przewodnictwa cieplnego, gdy znany jest początkowy rozkład temperatur $T(\mathbf{r}, 0)$), możemy napisać

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_m A_m(0)\phi_m(\mathbf{r}).$$

Korzystając z faktu, że $\phi_m(\mathbf{r})$ tworzą zupełny ortonormalny zbiór funkcji, mamy

$$A_n(0) = \int \phi_n^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, 0)d^3\mathbf{r}.$$

Zatem

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sum_m \mathrm{e}^{-\lambda_m \tau}\phi_m(\mathbf{r}) \int \phi_m^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}'$$

lub

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}', \tag{7.121a}$$

gdzie

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \sum_m \phi_m(\mathbf{r})\phi_m^*(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-\lambda_m \tau}. \tag{7.121b}$$

Zauważcie, że

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \sum_m \phi_m(\mathbf{r})\phi_m^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{7.122}$$

co musi oczywiście mieć miejsce ze względu na równanie (7.121a). Mamy również

$$\left(H + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = 0, \tag{7.123}$$

zatem $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ dane równaniem (7.121a) jest rzeczywiście szukanym rozwiązaniem, które spełnia nałożone warunki brzegowe.

Dopisaliśmy naszej funkcji $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)$ wskaźnik 1 w celu oznaczenia, że powstaje ona z równania pierwszego rzędu w czasie. Będziemy nieściśle określać G_1 jako funkcję Greena, chociaż nie spełnia ona

$$\left(H + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau). \tag{7.124}$$

Zobaczymy jednak wkrótce, że G_1 jest ściśle związane z funkcją, która jest funkcją Greena w zwykłym sensie.

G_1 nie spełnia (7.124), ale raczej (7.123) i funkcja G_1 jest sama rozwiązaniem równ. (7.120). Gdy $\psi(\mathbf{r}, 0) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$, to równanie (7.121a) daje natychmiast

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \tau)$$

dla $\tau \geqslant 0$. G_1 jest zatem rozwiązaniem (7.120) dla bardzo specjalnego warunku początkowego, tzw. warunku początkowego ze „źródłem punktowym". Fakt ten prowadzi do pewnej prostej interpretacji funkcji Greena, którą będziemy wkrótce dyskutować.

Nie trzeba dodawać, że nasz wybór początkowego czasu był zupełnie dowolny. Równie dobrze moglibyśmy wybrać jako czas początkowy τ' i wtedy mielibyśmy

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')\psi(\mathbf{r}', \tau')\, d^3\mathbf{r}', \tag{7.125a}$$

gdzie

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \sum_m \phi_m(\mathbf{r})\phi_m^*(\mathbf{r}')e^{-\lambda_m(\tau-\tau')}. \tag{7.125b}$$

Innymi słowami $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$ propaguje funkcję ψ w czasie od τ' do $\tau > \tau'$; z tego powodu G_1 nazywane jest często propagatorem. Ten sposób mówienia sugeruje, że jeżeli propagujemy ψ od τ_0 do τ_1 i następnie od τ_1 do τ_2, powinniśmy otrzymać ten sam rezultat co w przypadku propagowania bezpośrednio od τ_0 do τ_2. Matematycznie rzecz ujmując piszemy

$$\psi(\mathbf{r}, \tau_1) = \int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau_1, \tau_0)\psi(\mathbf{r}'', \tau_0)d^3\mathbf{r}'',$$

$$\psi(\mathbf{r}, \tau_2) = \int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau_2, \tau_1)\psi(\mathbf{r}', \tau_1)d^3\mathbf{r}' =$$

$$= \int\int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau_2, \tau_1)G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', \tau_1, \tau_0)\psi(\mathbf{r}'', \tau_0)d^3\mathbf{r}'d^3\mathbf{r}''.$$

Posługując się równaniem (7.125b) znajdujemy, że

$$\int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau_2, \tau_1)G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', \tau_1, \tau_0)d^3\mathbf{r}' =$$

$$= \int \sum_m \phi_m(\mathbf{r})\phi_m^*(\mathbf{r}')e^{-\lambda_m(\tau_2-\tau_1)} \sum_n \phi_n(\mathbf{r}')\phi_n^*(\mathbf{r}'')e^{-\lambda_n(\tau_1-\tau_0)}d^3\mathbf{r}'.$$

Ponieważ

$$\int \phi_m^*(\mathbf{r}')\phi_n(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' = \delta_{mn},$$

to natychmiast uzyskujemy

$$\int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau_2, \tau_1)G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', \tau_1, \tau_0)d^3\mathbf{r}' =$$

$$= \sum_m \phi_m(\mathbf{r})\phi_m^*(\mathbf{r}'')e^{-\lambda_m(\tau_2-\tau_1)}e^{-\lambda_m(\tau_1-\tau_0)} = \sum_m \phi_m(\mathbf{r})\phi_m^*(\mathbf{r}'')e^{-\lambda_m(\tau_2-\tau_0)} = G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau_2, \tau_0),$$

zatem tak jak się spodziewaliśmy

$$\psi(\mathbf{r}, \tau_2) = \int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau_2, \tau_0)\psi(\mathbf{r}'', \tau_0)d^3\mathbf{r}''.$$

Ta koncepcja składania propagacji jest w fizyce bardzo ważnym pojęciem; poniżej powtarzamy wynik:

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau_2, \tau_0) = \int G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau_2, \tau_1)G_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', \tau_1, \tau_0)d^3\mathbf{r}'.$$

Wyznaczmy teraz funkcję Greena równania typu dyfuzji lub przewodnictwa cieplnego. Dla wygody rozważania prowadzić będziemy w jednym wymiarze, w przedziale $-L/2 \leqslant x \leqslant L/2$, i nałożymy periodyczne warunki brzegowe $\psi(L/2, \tau) = \psi(-L/2, \tau)$. Jak było wyżej wspomniane, operator H równa się w tym przypadku po prostu $-d^2/dx^2$, chcemy więc rozwiązać równanie

$$-\frac{d^2\phi_m}{dx^2} = \lambda_m \phi_m(x).$$

Rozwiązaniem tego równania jest

$$\phi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\sqrt{\lambda_m}x},$$

gdzie musimy mieć $\lambda_m = (2\pi m/L)^2$, aby spełnione były warunki brzegowe, a m jest dowolną liczbą całkowitą. Jeżeli zatem wprowadzimy oznaczenie $k_m = 2\pi m/L$, otrzymujemy dla funkcji Greena $G_1(x, x', \tau)$ przy użyciu równ. (7.121b)

$$G_1(x, x', \tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} e^{ik_m(x-x')} e^{-k_m^2\tau}. \tag{7.126}$$

Przypuśćmy teraz, że chcemy otrzymać funkcję Greena na nieskończonej prostej. Zastosujmy tę samą procedurę przejścia do granicy, której używaliśmy przechodząc od szeregów Fouriera do całek Fouriera w paragrafie 5.7. Podczas gdy w równ. (7.126) L staje się większe i większe, to k_m zmienia się bardzo niewiele, gdy przechodzimy w sumie od jednej wartości m do następnej. Faktycznie k_m zmienia się o $2\pi/L$ za każdym razem, gdy m wzrasta o jeden. Połóżmy zatem $2\pi/L = \Delta k_m$ i napiszmy

$$G_1(x, x', \tau) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Delta k_m e^{ik_m(x-x')} e^{-k_m^2\tau}.$$

W tej postaci widzimy, że nasze wyrażenie wygląda dokładnie tak samo jak wyrażenie dyskutowane przy rozważaniu całek Riemanna jakiejś funkcji; rozbijamy rozważany przedział całkowania na małe podprzedziały Δ_i i obliczamy wartość funkcji w jakimś punkcie x w każdym przedziale, wtedy

$$\sum_i \Delta_i f(x_i) \to \int f(x)\,dx.$$

W tym samym duchu, gdy $L \to \infty$ dla G_1 mamy wyrażenie

$$G_1(x, x', \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} e^{-k^2\tau} dk. \tag{7.127}$$

Nietrudno obliczyć tę całkę. Zauważmy, że

$$ik(x-x') - k^2\tau = -\tau\left[k - \frac{i(x-x')}{2\tau}\right]^2 - \frac{(x-x')^2}{4\tau},$$

a więc

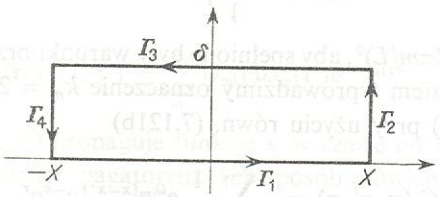
$$G_1(x, x', \tau) = \frac{1}{2\pi} e^{-(x-x')^2/4\tau} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tau(k-i\delta)^2} dk,$$

gdzie $\delta = (x-x')/2\tau$. W celu obliczenia tej całki przyjmujemy, że wyrażenie podcałkowe jest funkcją zmiennej zespolonej z i badamy całkę konturową wzdłuż krzywej C pokazanej na rys. 7.10; zatem

$$I = \int_C e^{-\tau(z-i\delta)^2} dz = 0,$$

ponieważ wewnątrz konturu nie ma osobliwości. Na Γ_1, $z = x$, a na Γ_3, $z = x+i\delta$; wobec tego

$$I = 0 = \int_{-X}^{X} e^{-\tau(x-i\delta)^2} dx + \int_{\Gamma_2} e^{-\tau(z-i\delta)^2} dz + \int_{X}^{-X} e^{-\tau x^2} dx + \int_{\Gamma_4} e^{-\tau(z-i\delta)^2} dz.$$



Rys. 7.10 Krzywa C używana przy obliczaniu funkcji $G_1(x, x', \tau)$. X powinno być rozpatrywane jako dowolnie duże.

Teraz na Γ_2 $z = X+iy$, gdzie X może stać się dowolnie duże, zatem

$$\int_{\Gamma_2} e^{-\tau(z-i\delta)^2} dz = i \int_0^{\delta} e^{-\tau[X+i(y-\delta)]^2} dy = ie^{-\tau X^2} \int_0^{\delta} e^{\tau(y-\delta)^2} e^{-2iX\tau(y-\delta)} dy.$$

Jest jasne, że całka po y da wartość skończoną, ponieważ całkujemy funkcję ograniczoną na skończonym odcinku. Zatem, gdy $X \to \infty$, to całka po Γ_2 znika ze względu na czynnik $e^{-X^2\tau}$. Ten sam argument eliminuje całkę po Γ_4. Wobec tego

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tau(x-i\delta)^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tau x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\tau}},$$

gdzie tę ostatnią całkę można obliczyć metodami całek rzeczywistych. (Patrz także równ. 6.56.) (Należy zwrócić uwagę, że choć milcząco założyliśmy, iż w tych rachunkach τ jest rzeczywiste, łatwo pokazać [patrz zadanie 31 (*l*) z rozdziału 6], że rezultat ten jest prawdziwy także dla τ czysto urojonego.) Mamy ostatecznie

$$G_1(x, x', \tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-(x-x')^2/4\tau}. \tag{7.128}$$

Zauważcie, że $G_1(x, x', \tau)$ jest symetryczną funkcją x i x'. Gdy τ dąży do zera, to

$$\lim_{\tau \to 0} G_1(x, x' \tau) = \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-(x-x')^2/4\tau};$$

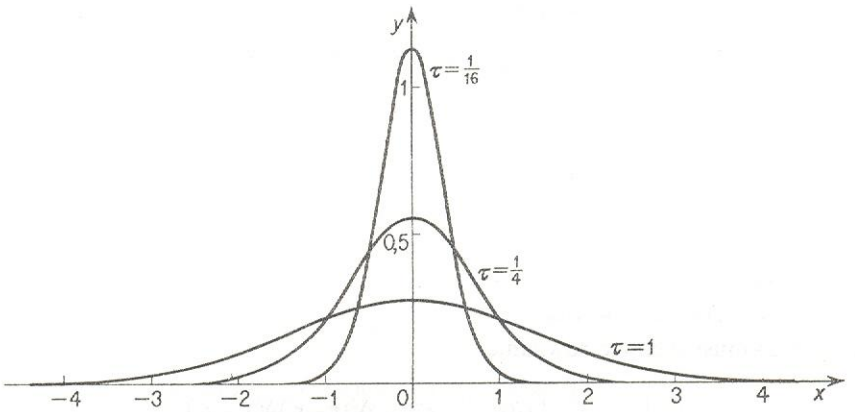
co jest po prostu jednym z przedstawień funkcji δ dyskutowanym w paragrafie 5.3, a więc

$$\lim_{\tau \to 0} G_1(x, x', \tau) = \delta(x-x')$$

w zgodzie z ogólnym rezultatem (7.122). Gdy czas τ rośnie od zera, to $G_1(x, x', \tau)$ wygląda jak znany rozkład Gaussa centrowany w $x = x'$, o szerokości połówkowej równej $\sqrt{2\tau}$.

Dla małych τ rozkład Gaussa jest wysoki i wąski, gdy τ wzrasta rozkład Gaussa ulega poszerzeniu i jego wysokość zmniejsza się, jak pokazano na rys. 7.11. Jednakże powierzchnia pod tymi rozkładami pozostaje stała, gdyż

$$\int_{-\infty}^{\infty} G_1(x,x')dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x')^2/4\tau} dx = 1,$$



Rys. 7.11 Funkcja Greena $G(x, x', \tau)$ jako funkcja x (centrowana dla wygody w $x' = 0$) dla kilku wartości τ.

niezależnie od τ i x'. W przypadku równania dyfuzji oznacza to, że całkowita ilość dyfundującego gazu (całka z gęstości po całej przestrzeni) jest stała, ponieważ

$$\psi(x, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G_1(x,x',\tau)\psi(x',0)dx'$$

pociąga za sobą

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,\tau)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x',0)dx', \tag{7.129}$$

na podstawie powyżej przedstawionego rezultatu. W równaniu dyfuzji $\psi(x, \tau)$ jest gęstością dyfundującego gazu, a więc

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, \tau)dx$$

jest całkowitą ilością tego gazu. Równanie (7.129) stwierdza, że ilość ta jest stała w czasie.

Za pomocą funkcji Greena możemy wyrazić rozwiązanie równania dyfuzji lub przewodnictwa cieplnego w późniejszej chwili przez warunki początkowe

$$\psi(x,\tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x')^2/4\tau}\psi(x',0)dx'. \tag{7.130}$$

Równanie to ma prostą interpretację fizyczną, mianowicie w chwili $\tau = 0$ każdy element przestrzeni zawiera ilość dyfundującego gazu (lub ciepła) równą $\psi(x', 0)dx'$. Efekt tego źródła w jakiejś późniejszej chwili w punkcie x otrzymuje się mnożąc tę wielkość przez funkcję Greena, która opisuje, jak rozważana substancja (lub ciepło) dyfunduje od punktu

x'. Gęstość (lub temperatura) w chwili τ w punkcie x uzyskana jest przez liniową kombinację efektów wywołanych w x przez wszystkie źródła znajdujące się w różnych punktach x', tzn. przez całkowanie po źródłach.

Przypuśćmy teraz, że chcemy rozwiązać równanie postaci

$$H\psi + \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = F(\mathbf{r},\tau). \tag{7.131}$$

Chcielibyśmy znaleźć taką funkcję Greena, że

$$\psi(\mathbf{r},\tau) = \psi_0(\mathbf{r},\tau) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')F(\mathbf{r},\tau')d^3\mathbf{r}'\,d\tau', \tag{7.132}$$

gdzie $\psi_0(\mathbf{r}, \tau)$ jest rozwiązaniem równania jednorodnego. W przypadku równania przewodnictwa cieplnego lub równania dyfuzji moglibyśmy mieć źródło ciepła lub dyfundującej substancji, które ulegają ciągłej zmianie w czasie opisanej przez funkcję $F(\mathbf{r}, \tau)$. W równaniu Schrödingera $F(\mathbf{r}, \tau)$ mogłoby reprezentować jakieś zaburzenie, takie jak fala elektromagnetyczna padająca na układ kwantowy.

Jaki zachodzi związek między funkcją $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$ dyskutowaną powyżej a funkcją Greena typu wymaganego w równaniu (7.132)? Przede wszystkim funkcja $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$ z równ. (7.132) musi spełniać równanie

$$\left(H + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau-\tau'), \tag{7.133}$$

podczas gdy G_1 spełnia

$$\left(H + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') = 0. \tag{7.133'}$$

G_1 ma pewną interesującą własność, na którą powyżej zwróciliśmy uwagę:

$$\lim_{\tau \to \tau'} G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{7.134}$$

zgodnie z równ. (7.122). Relacja ta sugeruje, że jeżeli wprowadzimy w G_1 nieciągłość w punkcie $\tau = \tau'$, to może będziemy w stanie spełnić równ. (7.133). Ponieważ G musi spełniać (7.133') wszędzie z wyjątkiem $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ i $\tau = \tau'$, wydaje się rozsądne spróbować modyfikacji

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')\Theta(\tau-\tau'). \tag{7.135}$$

Oznacza to dla $\tau > \tau'$, że $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$ jest po prostu równe $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$, ale dla $\tau < \tau'$ otrzymujemy $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = 0$. Obliczamy teraz

$$\left(H + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') =$$

$$= H[G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')\Theta(\tau-\tau')] + \frac{\partial}{\partial \tau}[G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')\Theta(\tau-\tau')] =$$

$$= \Theta(\tau-\tau')HG_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') + \Theta(\tau-\tau')\frac{\partial}{\partial \tau}G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') +$$

$$+ G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')\frac{\partial}{\partial \tau}\Theta(\tau-\tau') =$$

$$= \Theta(\tau-\tau')\left[H + \frac{\partial}{\partial \tau}\right]G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') + G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')\delta(\tau-\tau'),$$

ponieważ z równ. (7.22)

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\,\Theta(\tau-\tau') = \delta(\tau-\tau').$$

Posługując się równaniem (7.133′) mamy wtedy

$$\left(H+\frac{\partial}{\partial\tau}\right)G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') = G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')\delta(\tau-\tau').$$

Ponieważ jednak $\delta(\tau-\tau')$ jest zerem z wyjątkiem punktu $\tau=\tau'$, interesuje nas tylko $G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')$ w $\tau=\tau'$, co na podstawie (7.134) jest po prostu równe $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Mamy zatem żądany wynik

$$\left(H+\frac{\partial}{\partial\tau}\right)G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau-\tau').$$

Przy użyciu równ. (7.135) widzimy, że rozwiązanie równ. (7.131) dane jest przez

$$\psi(\mathbf{r},\tau)=\psi_0(\mathbf{r},\tau)+\int d^3\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{\tau} d\tau' G_1(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')F(\mathbf{r}',\tau'). \tag{7.136}$$

Funkcja G_1 jest, jak widzimy, prawie dokładnie funkcją Greena w naszym oryginalnym znaczeniu tego słowa. Ponieważ $F(\mathbf{r},\tau)$ reprezentuje efekt znanego źródła ciepła lub dyfundującej substancji, gdy tylko wyznaczymy G_1, pozostają nam do obliczenia jedynie całki.

Inna sytuacja ma miejsce w mechanice kwantowej, gdzie zależne od czasu równanie Schrödingera ma postać

$$\left(H+\frac{\partial}{\partial\tau}\right)\Psi(\mathbf{r},\tau) = -\frac{2m}{\hbar^2}U(\mathbf{r},\tau)\Psi(\mathbf{r},\tau).$$

W najprostszym przypadku H mogłoby być dane przez $-\nabla^2$, a $\tau = i\hbar t/2m$. Zatem z równania (7.136) otrzymujemy zależne od czasu całkowe równanie Schrödingera

$$\Psi(\mathbf{r},\tau)=\Psi_0(\mathbf{r},\tau)-\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\mathbf{r}'\int_{-i\infty}^{\tau} d\tau' G(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau,\tau')U(\mathbf{r}',\tau')\Psi(\mathbf{r}',\tau'), \tag{7.137}$$

gdzie całkowanie przebiega wzdłuż osi urojonej, ponieważ $\tau = i\hbar t/2m$ jest czysto urojone.

Kiedy $U(\mathbf{r},\tau)$ reprezentuje zaburzenie takie, jak oscylujące pole elektromagnetyczne, (7.137) prowadzi do teorii prawdopodobieństw przejść i „Złotej Reguły Fermiego".

Możemy także użyć równania (7.137), aby uzyskać inny punkt widzenia na rozważania poprzednich paragrafów. Przypuśćmy, że $U(\mathbf{r},\tau)$ jest statycznym niezależnym od czasu potencjałem. Spodziewalibyśmy się wtedy, że równanie (7.137) zredukuje się do równania Lippmanna–Schwingera (7.138). Jednak zamiast zastąpić po prostu $U(\mathbf{r},\tau)$ przez $V(\mathbf{r})$, wyobraźmy sobie, że w bardzo odległej przeszłości $U(\mathbf{r},\tau)$ było „wyłączone" i że zostało powoli „włączone". Możemy to wyrazić pisząc

$$U(\mathbf{r},\tau) = V(\mathbf{r})e^{\varepsilon' t} = V(\mathbf{r})e^{-i\varepsilon\tau}. \tag{7.138}$$

Czyniąc rzeczywistą wielkość $\varepsilon' = \hbar\varepsilon/2m$ dostatecznie małą, możemy dowolnie dobrze przybliżyć statyczny potencjał. Jasne jest, że nie będzie to miało wpływu na żaden

fizycznie realistyczny problem rozpraszania. Jeżeli weźmiemy $H = -\nabla^2$, jak uczyniliśmy poprzednio dyskutując rozpraszanie, wtedy przez bezpośrednią analogię z (7.127)

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk_x dk_y dk_z \times$$
$$\times \exp\{i[k_x(x-x')+k_y(y-y')+k_z(z-z')]\} \times$$
$$\times \exp[-(k_x^2+k_y^2+k_z^2)(\tau-\tau')],$$

gdzie wyobrażamy sobie, że umieściliśmy nasz układ w ogromnym prostokątnym pudle i później pozwalamy jego ścianom stać się dowolnie dużymi. W notacji wektorowej wynik ten ma postać

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-k^2(\tau-\tau')} d^3\mathbf{k}. \tag{7.139}$$

Podstawiając równanie (7.139) i równ. (7.138) na $U(\mathbf{r}, \tau)$ do równ. (7.137) otrzymujemy

$$\Psi(\mathbf{r}, \tau) = \Psi_0(\mathbf{r}, \tau) - (2m/\hbar^2(2\pi)^3) \int d^3\mathbf{r}' \int d^3\mathbf{k} \int_{-i\infty}^{\tau} d\tau' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \times$$
$$\times e^{-k^2(\tau-\tau')} V(\mathbf{r}') e^{-i\varepsilon\tau'} \Psi(\mathbf{r}', \tau'), \tag{7.140}$$

przy czym

$$\Psi_0(\mathbf{r}, \tau) = Ce^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} e^{-k_i^2\tau},$$

gdzie k_i jest liczbą falową fali padającej. Szukamy rozwiązań postaci

$$\Psi(\mathbf{r}, \tau) = \psi(\mathbf{r}) e^{-k_i^2\tau}.$$

Równ. (7.140) przyjmuje wtedy postać

$$\psi(\mathbf{r}) e^{-k_i^2\tau} = Ce^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} e^{-k_i^2\tau} -$$
$$-\frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \cdot e^{-k^2\tau} \int_{-i\infty}^{\tau} e^{(k^2-k_i^2-i\varepsilon)\tau'} d\tau'. \tag{7.141}$$

Mamy teraz

$$\int_{-i\infty}^{\tau} e^{(k^2-k_i^2-i\varepsilon)\tau'} d\tau' = \frac{e^{(k^2-k_i^2-i\varepsilon)\tau}}{(k^2-k_i^2-i\varepsilon)}. \tag{7.142}$$

Dolna granica całkowania daje znikający wkład, ponieważ zaburzenie było włączone adiabatycznie za pomocą członu $\exp(-i\varepsilon\tau)$. Podstawiając (7.142) do (7.141) i skracając przez wspólny czynnik $\exp(-k_i^2\tau)$ otrzymujemy

$$\psi(\mathbf{r}) = Ce^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(k^2-k_i^2-i\varepsilon)} e^{-i\varepsilon\tau} d^3\mathbf{k}. \tag{7.143}$$

Całka

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(k^2-k_i^2-i\varepsilon)} d^3\mathbf{k}$$

jest dokładnie funkcją Greena wychodzącej fali kulistej $G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ uzyskaną dla operatora $-\nabla^2-k_i^2$ w paragrafie 7.4 (równ. (7.66)), zatem

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp[i(k_i+i\varepsilon/2k_i)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Położymy teraz $\varepsilon \to 0$ i znajdziemy, że

$$\psi(\mathbf{r}) = Ce^{ik_i \cdot r} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}',$$

co zgadza się z równaniem Lippmanna–Schwingera dla ψ_+ wyprowadzonym wcześniej [równ. (7.68)]. Zatem w granicy statycznego potencjału formalizm zależny od czasu przechodzi do postaci, jakiej powinniśmy oczekiwać, przy czym przepis na omijanie osobliwości, którym się wcześniej posłużyliśmy, wynika automatycznie. Widzimy teraz, że można sobie wyobrazić ten przepis jako pochodzący z fizycznie uzasadnionego założenia, że w dostatecznie odległej przeszłości nie ma żadnego oddziaływania, cząstki są swobodne.

7.8. RÓWNANIE FALOWE

Jako ostatni przykład metody funkcji Greena zbadamy lorentzowsko niezmiennicze, zależne od czasu równanie falowe. Jest to podstawowe równanie elektrodynamiki i jego własności były wyczerpująco analizowane.

Jednorodne równanie falowe ma postać

$$\Box^2\psi \equiv \nabla^2\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0. \tag{7.144}$$

Dla ogólności napiszemy je następująco

$$H\psi + \frac{\partial^2\psi}{\partial\tau^2} = 0, \tag{7.145}$$

gdzie w tym przypadku $\tau = ct$ i $H = -\nabla^2$. Wyobraźmy sobie na chwilę, że H jest ogólnym liniowym operatorem posiadającym zupełny ortonormalny układ funkcji własnych ϕ_n, które spełniają związek

$$H\phi_n = \lambda_n\phi_n. \tag{7.146}$$

Szukamy rozwiązań równ. (7.145) w postaci

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sum_n A_n(\tau)\phi_n(\mathbf{r}). \tag{7.147}$$

Używając równań (7.146) i (7.147) znajdujemy

$$H\psi + \frac{\partial^2\psi}{\partial\tau^2} = \sum_n (A_n\lambda_n + \ddot{A}_n)\phi_n = 0. \tag{7.148}$$

Ponieważ funkcje własne H tworzą zupełny ortonormalny układ, wnioskujemy z równ. (7.148), że

$$\ddot{A}_n(\tau) + \lambda_n A_n(\tau) = 0,$$

skąd

$$A_n(\tau) = a_n e^{i\sqrt{\lambda_n}\tau} + b_n e^{-i\sqrt{\lambda_n}\tau}$$

i

$$\psi(\mathbf{r},\tau) = \sum_n (a_n e^{i\sqrt{\lambda_n}\tau} + b_n e^{-i\sqrt{\lambda_n}\tau})\phi_n(\mathbf{r}). \tag{7.149}$$

Stałe a_n i b_n muszą być określone z warunków brzegowych, o których zakładamy, że są znanego nam typu, tzn. $\psi(\mathbf{r}, 0)$ i $\dot{\psi}(\mathbf{r}, 0)$ są określone i wtedy

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n (a_n + b_n)\phi_n(\mathbf{r}),$$

$$\dot{\psi}(\mathbf{r}, 0) = i\sum_n \sqrt{\lambda_n}(a_n - b_n)\phi_n(\mathbf{r}).$$

Stąd znajdujemy, że

$$a_n + b_n = \int \phi_n^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}',$$

$$a_n - b_n = -\frac{i}{\sqrt{\lambda_n}}\int \phi_n^*(\mathbf{r}')\dot{\psi}(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}',$$

a więc

$$a_n = \frac{1}{2}\left[\int \phi_n^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}' + \frac{1}{i\sqrt{\lambda_n}}\int \phi_n^*(\mathbf{r}')\dot{\psi}(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}'\right],$$

$$b_n = \frac{1}{2}\left[\int \phi_n^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}' - \frac{1}{i\sqrt{\lambda_n}}\int \phi_n^*(\mathbf{r}')\dot{\psi}(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}'\right].$$

Wstawiając te wartości a_n i b_n do równ. (7.149) otrzymujemy

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \int \sum_n \cos(\sqrt{\lambda_n}\tau)\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}' +$$

$$+ \int \sum_n \sin(\sqrt{\lambda_n}\tau)\frac{1}{\sqrt{\lambda_n}}\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')\dot{\psi}(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}'.$$

Trzymając się notacji poprzedniego paragrafu napiszemy powyższy wzór w postaci

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \int G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)\psi(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}' + \int \tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)\dot{\psi}(\mathbf{r}', 0)d^3\mathbf{r}', \tag{7.150}$$

gdzie

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \sum_n \cos(\sqrt{\lambda_n}\tau)\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}'), \tag{7.151a}$$

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \sum_n \frac{\sin(\sqrt{\lambda_n}\tau)}{\sqrt{\lambda_n}}\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}'). \tag{7.151b}$$

Ponieważ równanie falowe jest drugiego rzędu w czasie, wymagane były dwa warunki brzegowe dla wyznaczenia stałych całkowania. Otrzymaliśmy stąd dwie funkcje Greena; jedną, która działa na $\psi(\mathbf{r}, 0)$, i drugą działającą na $\dot{\psi}(\mathbf{r}, 0)$. Dla równania pierwszego rzędu względem czasu, podobnie jak dla równania dyfuzji lub przewodnictwa cieplnego, potrzebny jest tylko jeden warunek brzegowy i zatem znaleźliśmy tylko jedną funkcję Greena działającą na $\psi(\mathbf{r}, 0)$. Dokładnie tak samo jak funkcja Greena otrzymana w poprzednim paragrafie spełniała równanie przewodnictwa cieplnego, obie nasze funkcje Greena G_2 i $\tilde{G}_2$ spełniają równanie falowe

$$\Box^2 G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = 0, \quad \Box^2 \tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = 0,$$

tzn. $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ spełnia równanie falowe. Zauważcie także, że

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \frac{d}{d\tau} \tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau),$$

a więc jeżeli potrafimy obliczyć funkcję $\tilde{G}_2$, to funkcja G_2 może być bezpośrednio z niej otrzymana. Warunki brzegowe są w oczywisty sposób spełnione przez rozwiązanie dane równ. (7.150), bo

$$G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \sum_n \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{7.152}$$

Mając w pamięci te ogólne wyniki, wróćmy do szczególnego przypadku równania falowego i zacznijmy od rozważenia obszaru o kształcie prostopadłościanu o krawędziach L_1, L_2 i L_3, odpowiednio w kierunkach x, y i z. Jeżeli mamy periodyczne warunki brzegowe, funkcje własne $H = -\nabla^2$ mogą być zapisane w postaci

$$\phi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_1 L_2 L_3}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z},$$

gdzie

$$k_x = \frac{2\pi n_1}{L_1}, \qquad k_y = \frac{2\pi n_2}{L_2}, \qquad k_z = \frac{2\pi n_3}{L_3}$$

i wartości własne dane są po prostu przez

$$\lambda_{n_1 n_2 n_3} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2.$$

Napiszmy teraz $\tilde{G}_2$ wyrażone przez te wielkości. Zgodnie z (7.151b)

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}' \tau) = \frac{1}{L_1 L_2 L_3} \sum_{n_1, n_2, n_3}^{\infty} \frac{\sin \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}\, \tau}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}} e^{ik_x(x-x')} e^{ik_y(y-y')} e^{ik_z(z-z')}.$$

Możemy teraz przejść do granicy, w której pudło staje się dowolnie duże, tak jak zrobiliśmy to poprzednio. Teraz

$$\frac{1}{L_1} \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \to \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x$$

i podobnie dla sum po n_2 i n_3. Stąd w granicy bardzo dużych wymiarów

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\sin k\tau}{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')},$$

gdzie $\mathbf{k} = k_x\mathbf{i} + k_y\mathbf{j} + k_z\mathbf{k}$ i $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$. Jasne jest, że korzystnie będzie obliczać tę całkę używając współrzędnych sferycznych. Kładąc $\mathbf{r}-\mathbf{r}' \equiv \boldsymbol{\rho}$, otrzymujemy

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} dk k^2 \sin k\tau \cdot \frac{1}{k} \int_0^{\pi} \sin\theta_k d\theta_k \int_0^{2\pi} d\phi_k e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}}.$$

Ponieważ całka nie zależy od kierunku $\boldsymbol{\rho}$, wybieramy dla wygody $\boldsymbol{\rho}$ w kierunku z. Wtedy $\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho} = k\rho\cos\theta_k$ i dokonując zamiany zmiennych $x = \cos\theta_k$, mamy

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dk k\sin k\tau\int_{-1}^{1}dx\int_0^{2\pi}d\phi_k e^{ik\varrho x}=$$

$$=\frac{1}{2\pi^2\varrho}\int_0^\infty \sin k\tau\sin k\varrho\,dk=\frac{1}{4\pi^2\varrho}\int_{-\infty}^{\infty}\sin k\tau\sin k\varrho\,dk=$$

$$=\frac{1}{8\pi^2\varrho}\int_{-\infty}^{\infty}[\cos k(\varrho-\tau)-\cos k(\varrho+\tau)]\,dk.$$

Ponieważ

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\cos xy\,dy$$

[wynika to natychmiast z równ. (5.63)], dostajemy ostatecznie

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',\tau)=\frac{1}{4\pi\varrho}[\delta(\varrho-\tau)-\delta(\varrho+\tau)].$$

Przy użyciu naszych pierwotnych zmiennych ma to postać

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)=\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}[\delta(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-ct)-\delta(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|+ct)]. \tag{7.153}$$

Jasne, że nasz wybór $t=0$ jako chwili początkowej był całkiem dowolny. Czytelnik może sprawdzić, że jeżeli wybieramy t' jako chwilę początkową, to

$$\psi(\mathbf{r},t)=\int G_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t')\psi(\mathbf{r}',t')d^3\mathbf{r}'+\int\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t')\dot{\psi}(\mathbf{r}',t')d^3\mathbf{r}', \tag{7.154}$$

gdzie

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t')=\sum_n\frac{\sin[\sqrt{\lambda_n}c(t-t')]}{\sqrt{\lambda_n}}\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}') \tag{7.155a}$$

i

$$G_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t')=\sum_n\cos[\sqrt{\lambda_n}c(t-t')]\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}')=\frac{1}{c}\frac{d}{dt}\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t'). \tag{7.155b}$$

W przypadku równania falowego $H=-\nabla^2$, funkcja $\tilde{G}_2$ dana jest przez

$$\tilde{G}_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t')=\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\{\delta[(\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-c(t-t')]-\delta[|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|+c(t-t')]\}. \tag{7.156}$$

Daje nam to rozwiązanie jednorodnego równania falowego, gdy tylko wyspecyfikowane są warunki brzegowe.

Jednakże tak samo, jak w przypadku równania pierwszego stopnia rozważanego w poprzednim paragrafie, równanie niejednorodne jest bardzo ważne. Na przykład w elektrodynamice klasycznej równanie (7.144) odpowiada sytuacji, w której nie ma żadnych źródeł ani prądów. W ogólności jednak interesują nas przypadki, w których występują prądy i ładunki. Typowym równaniem, jakie zatem chcielibyśmy móc rozwiązać, jest

$$\Box^2\psi\equiv\nabla^2\psi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\frac{4\pi}{c}j(\mathbf{r},t) \tag{7.157}$$

lub w ogólności

$$H\psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \tau^2} = J(\mathbf{r}, t). \tag{7.158}$$

Aby rozwiązać teraz (7.158), potrzebna nam jest funkcja Greena $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$, która spełnia relację

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau-\tau').$$

Ani G_2, ani $\tilde{G}_2$ nie mają tej własności; w rzeczywistości oznaczając przez $\mathcal{G}$ którąkolwiek z funkcji G_2 i $\tilde{G}_2$, mamy

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) \mathcal{G} = 0. \tag{7.159}$$

Pokierujmy się jednak naszym doświadczeniem z poprzedniego paragrafu i szukajmy G w postaci

$$G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')\Theta(\tau-\tau').$$

Mamy

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \Theta(\tau-\tau')H\mathcal{G} + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}[\mathcal{G}\Theta(\tau-\tau')] =$$

$$= \Theta(\tau-\tau')\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right)\mathcal{G} + 2\dot{\Theta}(\tau-\tau')\dot{\mathcal{G}} + \mathcal{G}\ddot{\Theta}(\tau-\tau'),$$

gdzie kropka oznacza różniczkowanie względem τ. Na podstawie równ. (7.159)

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) G_R = 2\dot{\Theta}(\tau-\tau')\dot{\mathcal{G}} + \mathcal{G}\ddot{\Theta}(\tau-\tau'),$$

ale

$$\dot{\Theta}(\tau-\tau') = \delta(\tau-\tau'),$$

a więc

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = 2\delta(\tau-\tau')\dot{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') + \dot{\delta}(\tau-\tau')\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau').$$

Opierając się na wynikach paragrafu 7.2

$$\delta(\tau-\tau')\dot{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = [\dot{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')]_{\tau'=\tau}\delta(\tau-\tau')$$

$$\dot{\delta}(\tau-\tau')\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -[\dot{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')]_{\tau'=\tau}\delta(\tau-\tau'),$$

zatem

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \delta(\tau-\tau')[\dot{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')]_{\tau'=\tau}. \tag{7.160}$$

Jeżeli $\mathcal{G} = G_2$, prawa strona równ. (7.160) znika na podstawie (7.155b), ale jeżeli $\mathcal{G} = \tilde{G}_2$, to zgodnie z równ. (7.155a) otrzymujemy

$$\left(H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \delta(\tau-\tau')\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

co ma żądaną postać. Wobec tego funkcja Greena dla równania jednorodnego ma postać

$$G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \Theta(\tau-\tau')\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') \tag{7.161}$$

i rozwiązanie równ. (7.158) może być zapisane jako

$$\psi_R(\mathbf{r}, \tau) = \psi_0(\mathbf{r}, \tau) + \int d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau',) J(\mathbf{r}', \tau'), \tag{7.162}$$

gdzie $\psi_0(\mathbf{r}, \tau)$ jest rozwiązaniem równania jednorodnego.

W szczególnym przypadku równania falowego $\tilde{G}_2$ dane jest równaniem (7.156), a ponieważ G_R znika dla $\tau < \tau'$, to możemy napisać

$$G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\delta\big(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-(\tau-\tau')\big)\Theta(\tau-\tau'),$$

gdyż dla $\tau > \tau'$ argument drugiej funkcji δ w równ. (7.156) jest zawsze niezerowy. Ze względu na to, że $\delta\big(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-(\tau-\tau')\big)$ ma zerowy argument tylko wtedy, gdy $\tau > \tau'$, to możemy przy G_R opuścić czynnik $\Theta(\tau-\tau')$ i ostatecznie

$$G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\delta\big(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-(\tau-\tau')\big). \tag{7.163}$$

A więc rozwiązanie równania falowego dane jest przez

$$\psi_R(\mathbf{r}, \tau) = \psi_0(\mathbf{r}, \tau) + \frac{1}{4\pi}\int d^3\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\delta\big(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-(\tau-\tau')\big)J(\mathbf{r}', \tau').$$

Całkowanie po τ' może być natychmiast wykonane dając

$$\psi_R(\mathbf{r}, \tau) = \psi_0(\mathbf{r}, \tau) + \frac{1}{4\pi}\int \frac{[J(\mathbf{r}', \tau')]_{\text{ret}}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}',$$

gdzie nawias $[\,]_{\text{ret}}$* oznacza, że czas τ' jest „retardowany" względem τ, czyli

$$\tau' = \tau - |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|.$$

Przy użyciu zmiennej czasowej t powyższe równanie ma postać

$$\psi_R(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{4\pi}\int \frac{[J(\mathbf{r}', t')]_{\text{ret}}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}', \tag{7.164}$$

gdzie w nawiasie

$$t' = t - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c}.$$

Jest to jeden z najpiękniejszych wyników elektromagnetyzmu. Mówi on nam, że obserwator znajdujący się w punkcie pola $\mathbf{r}$ odczuwa w danej chwili tylko to, co źródło umieszczone w $\mathbf{r}'$ robiło we wcześniejszym czasie t'; co więcej, ten wcześniejszy moment t' wyprzedza chwilę obecną t dokładnie o czas, jaki zajmuje fali przejście od punktu $\mathbf{r}'$, w którym położone jest źródło do punktu $\mathbf{r}$, mianowicie $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/c$. W ogólności skutek odczuwany w jakimś punkcie czasoprzestrzeni pochodzi od wszystkich zaburzeń w całej przestrzeni, które poprzedzały rozważany skutek o dokładnie taki przeciąg czasu, jaki jest konieczny, aby zaburzenia te dotarły od punktów, w których powstały, do punktu, w którym

* retardo — opóźniać, łac.

są odczuwane. Funkcja ψ_R nazywana jest opóźnionym rozwiązaniem niejednorodnego równania falowego, a G_R nosi nazwę opóźnionej (retardowanej) funkcji Greena, na co wskazuje indeks R.

Nie jest to absolutnie jedyna funkcja Greena, którą moglibyśmy zdefiniować. Przykładowo, moglibyśmy napisać

$$G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\Theta(\tau'-\tau)\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau').$$

Pozostawiamy czytelnikowi pokazanie, że jest to także funkcja Greena niejednorodnego równania falowego nazywana przedwczesną (adwansowaną) funkcją Greena i pokazanie, że rozwiązanie otrzymane z G_A odpowiada efektom zaburzeń propagujących się wstecz z przyszłości w przeszłość.

ZADANIA

1. Pokaż, że funkcje Greena z równań (7.9′) i (7.11′) spełniają relację

$$\frac{d^2G(x, x')}{dx^2} = \delta(x-x').$$

2. Pokaż, że

$$\frac{d\delta(x)}{dx} = -\delta(x)\frac{d}{dx},$$

gdzie oba elementy równania rozpatrywane są w działaniu na funkcję w wyrażeniu podcałkowym; to znaczy, że naprawdę rozumiemy przez powyższe równanie, iż zachodzi związek

$$\int_{-a}^{b} \frac{d\delta(x)}{dx} f(x)dx = -\int_{-a}^{b} \delta(x)\frac{df}{dx}dx$$

dla dowolnej funkcji $f(x)$ mającej ciągłą pochodną.

3. Pokaż, że jeżeli H jest rzeczywistym operatorem hermitowskim (tzn. $H = H^*$, $H = H^\dagger$), to funkcja Greena niejednorodnego równania

$$H\phi(x) = f(x)$$

jest symetryczna, tzn. $G(x, x') = G(x', x)$.

[*Wskazówka*: pokaż, że funkcje własne rzeczywistego operatora hermitowskiego mogą być zawsze tak wybrane, aby były rzeczywiste.]

4. Pokaż, że funkcja Greena z równ. (7.35) spełnia równ. (7.36).

5. W paragrafie 6.9 dyskutowaliśmy te rozwiązania równania Bessela

$$x^2\frac{d^2J_n}{dx^2} + x\frac{dJ_n}{dx} + (x^2-n^2)J_n = 0,$$

które były skończone w początku układu. W szczególności wybraliśmy taką normalizację, że dla małych x

$$J_n(x) \cong \frac{1}{n!}\left(\frac{x}{2}\right)^n.$$

Istnieje oczywiście drugi zbiór rozwiązań, oznaczanych zwykle przez $N_n(x)$, które są nieregularne w początku układu. Są one zwyczajowo tak normalizowane, że

$$N_0(x) \cong \frac{2}{\pi} \ln x, \quad N_n(x) \sim -\frac{1}{\pi}\left(\frac{2}{x}\right)^n (n-1)!$$

(Zauważ, że dla małych wartości x funkcje $N_n(x)$ spełniają rzeczywiście równanie Bessela.)

Rozważ niejednorodne równanie Bessela (dla $n \geqslant 1$)

$$x^2 \frac{d^2u}{dx^2} + x\frac{du}{dx} + (x^2 - n^2)u = f(x)$$

w przedziale $[0, 1]$ z warunkiem brzegowym $u(0) = 0 = u(1)$. Pokaż, że $u(x)$ dane jest przez

$$u(x) = \int_0^1 G(x, x') f(x') dx',$$

gdzie

$$G(x, x') = -\frac{\pi}{2x' J_n(1)} J_n(x_<)[J_n(x_>) N_n(1) - N_n(x_>) J_n(1)].$$

Jak zwykle $x_>$ jest większą z liczb x i x', a $x_<$ jest mniejszą z liczb x i x'.

6. Udowodnij, że wrońskian liniowego operatora różniczkowego drugiego rzędu nigdy nie znika. Zrób to dowodząc najpierw, że $W(x)$ nie może być identycznie równe zeru, gdyż w przeciwnym razie $u_1(x)$ i $u_2(x)$ byłyby liniowo zależne, co jest w sprzeczności z założeniem. Następnie różniczkując $W(x)$ i korzystając z faktu, że u_1 i u_2 są rozwiązaniami równania

$$f_0(x)\frac{d^2u}{dx^2} + f_1(x)\frac{du}{dx} + f_2(x)u = 0,$$

udowodnij, że

$$\frac{dW}{dx} = -\frac{f_1}{f_0} W.$$

Scałkuj tę relację i pokaż, że jeżeli $f_0(x)$ i $f_1(x)$ są ciągłe i jeżeli $f_0(x)$ nigdy nie znika, to $W(x)$ nigdy nie znika.

7. Udowodnij, że dla dowolnego liniowego operatora różniczkowego postaci

$$f_0(x)\frac{d^n}{dx^n} + f_1(x)\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} + \ldots + f_n(x)$$

mamy

$$\frac{dW}{dx} = -\frac{f_1}{f_0} W,$$

gdzie W zdefiniowane jest przez

$$W(x) = \begin{vmatrix} u_1(x) & u_2(x) & \ldots & u_n(x) \\ u_1^{(1)}(x) & u_2^{(1)}(x) & \ldots & u_n^{(1)}(x) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ u_1^{(n-1)}(x) & u_2^{(n-1)}(x) & \ldots & u_n^{(n-1)}(x) \end{vmatrix}$$

oraz $u_1(x), u_2(x), \ldots, u_n(x)$ są liniowo niezależnymi rozwiązaniami równań, a $u^{(m)}$ oznacza m-tą pochodną u. Zatem $W(x)$ dane jest przez

$$W(x) = C\exp\left[-\int \frac{f_1(x)}{f_0(x)}\,dx\right].$$

8. Pokaż, że funkcja Greena operatora różniczkowego

$$f_0(x)\frac{d^n}{dx^n}+f_1(x)\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}+\ \ldots\ +f_n(x)$$

dana jest przez

$$G(x, x') = \sum_{m=1}^{n} a_m(x')u_m(x)+\frac{N(x, x')}{f_0(x')W(x')}\Theta(x-x'),$$

gdzie $W(x')$ zdefiniowane jest tak jak w poprzednim zadaniu i

$$N(x, x') = \begin{vmatrix} u_1(x') & u_2(x') & \ldots & u_n(x') \\ u_1^{(1)}(x') & u_2^{(1)}(x') & \ldots & u_n^{(1)}(x') \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ u_1^{(n-2)}(x') & u_2^{(n-2)}(x') & \ldots & u_n^{(n-2)}(x') \\ u_1(x) & u_2(x) & \ldots & u_n(x) \end{vmatrix}$$

oraz $a_m(x')$ są określone przez warunek brzegowy, który funkcja Greena musi spełniać. Podobnie jak w zadaniu 7 funkcje $u_1, u_2, \ldots, u_n$ są n liniowo niezależnymi rozwiązaniami równania jednorodnego.

9. Posługując się wynikami poprzedniego zadania znajdź funkcję Greena ogólnego operatora różniczkowego trzeciego rzędu

$$\frac{d^3}{dx^3}+a_1\frac{d^2}{dx^2}+a_2\frac{d}{dx}+a_3$$

wyrażoną za pomocą pierwiastków r_1, r_2 i r_3 wielomianu charakterystycznego

$$z^3+a_1z^2+a_2z+a_3 = 0.$$

Załóż, że funkcja Greena i jej pierwsze pochodne znikają w $x = 0$.

10. Równanie Schrödingera w jednym wymiarze ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Używając metod dyskutowanych w paragrafie 7.4, wyprowadź równanie całkowe Lippmanna–Schwingera na funkcję $\psi(x)$:

a) w przypadku $E < 0$, b) w przypadku $E \geqslant 0$.

W przypadku (b) znajdziesz osobne równania na $\psi_+(x)$ i $\psi_-(x)$ odpowiadające różnym typom warunków brzegowych w nieskończoności. Przedyskutuj sens funkcji $\psi_+(x)$ i $\psi_-(x)$.

11. Rozwiąż zadanie 10 używając metod paragrafu 7.3. Jakie jest właściwe sformułowanie warunków brzegowych, które całkowicie określa funkcję Greena w tym przypadku?

12. a) dokonując zamiany zmiennych $\phi_l(x) = f_l(x)/\sqrt{x}$ w równ. (7.81) pokaż, że otrzymuje się następujące równanie na $f_l(x)$:

$$x^2f_l''(x)+xf_l'(x)+[x^2-(l+1/2)^2]f_l(x) = 0.$$

b) używając wyników paragrafu 6.9 pokaż, że

$$j_l(x) \sim \frac{1}{\sqrt{x}} J_{l+1/2}(x),$$

gdzie J oznacza funkcję Bessela [patrz dyskusja następująca po rówm. (7.88'b)].

13. a) Pokaż, że funkcja Greena

$$G(t, t') = \frac{1}{2\omega_0 i} e^{i\omega_0|t-t'|}$$

spełnia równanie

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_0^2\right) G(t, t') = \delta(t-t').$$

Ta funkcja Greena była użyta w zadaniu 7.10 do przekształcenia różniczkowego równania Schrödingera w całkowe równanie Lippmanna–Schwingera.

b) Pokaż, że ogólne rozwiązanie równania

$$\ddot{X}(t) + \omega_0^2 X(t) = F(t)$$

może być z pomocą powyżej omawianej funkcji Greena napisane jako

$$X(t) = A\cos\omega_0 t + B\sin\omega_0 t + \int_{-\infty}^{\infty} G(t, t') F(t') dt',$$

gdzie A i B muszą być określone z warunków brzegowych. Dla jednopunktowych warunków brzegowych mechaniki klasycznej będą one oczywiście zależały od F. Pokaż, że jeżeli zażądamy, aby $x(0) = x_0$ $\dot{x}(0) = 0$, wtedy równanie to redukuje się do znanej postaci

$$X(t) = x_0 \cos\omega_0 t + \frac{1}{\omega_0} \int_0^t \sin\omega_0(t-t') F(t') dt'.$$

Jasne, że dla jednopunktowych warunków brzegowych łatwiej jest zaczynać od funkcji Greena postaci $(1/\omega_0)\Theta(t-t')\sin\omega_0(t-t')$, ale nie jest to konieczne.

14. Pokaż na podstawie rówm. (7.98), że

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta),$$

gdzie θ jest kątem między $\mathbf{k}$ i $\mathbf{r}$.

[*Wskazówka*: Rozważ rówm. (7.98) w granicy $|\mathbf{r}'| \to \infty$.]

15. Korzystając z równań (7.98), (7.86), (7.84a) i (5.83) pokaż, że jeżeli wybierzemy

$$\xi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{4imk}{\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \int j_l(kr') Y_{lm}^*(\theta', \phi') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

to równanie

$$\psi(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

sprowadza się do

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'.$$

Zauważ, że $\xi(\mathbf{r})$ jest liniową superpozycją rozwiązań równania

$$(\nabla^2 + k^2)\phi = 0.$$

16. Przy wyprowadzaniu równania Lippmanna–Schwingera dla stanu związanego metodą transformat Fouriera wydaje się, że nie nałożyliśmy żadnych warunków brzegowych (nie jest potrzebny żaden „przepis *ie*") i mimo to otrzymaliśmy jednoznacznie określoną funkcję Greena. Pokaż, że naprawdę tak nie jest, tzn. że w rzeczywistości wprowadziliśmy warunki brzegowe. Jak to było zrobione? Powiąż swoją dyskusję z rozważaniami paragrafu 7.5.

17. Rozważ cienki pierścień o promieniu R. Początkowo, w czasie $t = 0$ na pierścieniu istnieje rozkład temperatury $T(\phi, 0)$, gdzie ϕ jest odpowiednią współrzędną kątową. Używając metody funkcji Greena znajdź temperaturę w jakimś późniejszym czasie. Wyjaśnij wszelkie decyzje, jakich dokonujesz odnośnie warunków brzegowych. Przyjmij, że w chwili początkowej pierścień jest ogrzany w małym obszarze wokół $\phi = \phi_0$ tak, że $T(\phi, 0) = T_0\delta(\phi - \phi_0)$ jest rozsądnym warunkiem brzegowym. Znajdź temperaturę dla późniejszych czasów $t > 0$. Jaka jest wartość jednorodnej temperatury, którą pierścień ostatecznie uzyska? Jaki wpływ na szybkość zbliżania się do równowagi ma wzrost promienia pierścienia?

18. a) Rozważ jednowymiarowy pręt o długości L. Niech jeden jego koniec, w $x = 0$, będzie utrzymywany w temperaturze zero, a drugi koniec, w $x = L$, niech będzie utrzymywany w temperaturze T_0. Jeżeli początkowy rozkład temperatury dany jest przez $T(x, 0)$, to pokaż, że temperatura w późniejszych chwilach dana jest wzorem

$$T(x, t) = T_0 x/L + \int_0^L G_1(x, x', t)\tilde{T}(x', 0)dx',$$

gdzie

$$\tilde{T}(x, 0) = T(x, 0) - T_0 x/L$$

i

$$G_1(x, x', t) = \frac{2}{L}\sum_{m=1}^{\infty} \sin\frac{m\pi x}{L} \sin\frac{m\pi x'}{L} e^{(-k/c)(m\pi/L)^2 t}.$$

[*Wskazówka*: Zauważ, że $\tilde{T}(x, t) = T(x, t) - T_0 x/L$ także spełnia równanie przewodnictwa cieplnego. Jakie warunki brzegowe spełnia $\tilde{T}(x, t)$?]

b) Używając wyniku z części (a) znajdź funkcję Greena, która umożliwi rozwiązanie równania

$$\nabla^2 T = \frac{c}{k}\frac{\partial T}{\partial t}$$

na nieskończonej półprostej $[0, \infty]$, gdy $T(x, 0)$ jest pewną daną funkcją.

19. a) Używając wyników poprzedniego zadania (lub jakiejkolwiek innej metody) wyraź za pomocą funkcji Greena rozwiązanie równania przewodnictwa cieplnego dla jednowymiarowego pręta, którego końce w $x = -L/2$ i $x = L/2$ utrzymywane są odpowiednio w temperaturach T_1 i T_2.

b) Znajdź wyrażenie dla funkcji Greena z części (a) w granicy $L \to \infty$, tzn. dla nieskończonej prostej. Porównaj to wyrażenie z wynikiem znalezionym w paragrafie 7.7 dla periodycznych warunków brzegowych.

20. Używając metody rozkładu na funkcje własne pokaż, że energia potencjalna dwuwymiarowego, wolnego od ładunków obszaru, ograniczonego przez okręgi o promieniach R_1 i R_2 dana jest przez

$$V(r,\theta) = \int_0^{2\pi} G_1(\theta,\theta',r)V(R_1,\theta')d\theta' + \int_0^{2\pi} G_2(\theta,\theta',r)V(R_2,\theta')d\theta',$$

gdzie $V(R_1,\theta)$ jest znaną wartością potencjału na pierwszej powierzchni w funkcji kąta, a $V(R_2,\theta)$ jest wartością potencjału na drugiej powierzchni. Znajdź rozkład G_1 i G_2 na funkcje własne korzystając z faktu, że $\partial^2/\partial\theta^2$ jest operatorem hermitowskim, jeżeli nałoży się periodyczne warunki brzegowe w przedziale $[0, 2\pi]$. Dlaczego w tym problemie wymagamy takich warunków brzegowych? Czy granica $V(R_1,\theta) = \text{const}$, $V(R_2,\theta) = \text{const}$ daje wynik, któregobyś oczekiwał? Pokaż, że $G_1(\theta,\theta',R_1) = \delta(\theta-\theta')$ i $G_2(\theta,\theta',R_2) = -\delta(\theta-\theta')$.

21. a) Wyznacz funkcję Greena $G_1(x,y,x',y',t)$ jednorodnego równania przewodnictwa cieplnego dla całej płaszczyzny xy, tzn. dwuwymiarową funkcję Greena dla nieskończonej przestrzeni.

b) Załóż, że w $t = 0$ wewnątrz kwadratu o boku $2a$ centrowanego w środku układu współrzędnych panuje stała temperatura T_0 i zero na zewnątrz. Wyznacz rozkład temperatury w całej płaszczyźnie dla wszystkich późniejszych czasów t wyrażony przy pomocy tzw. funkcji błędu oznaczanej $\operatorname{erf}(x)$ i definiowanej następująco:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du.$$

22. Pokaż, że dla dwuwymiarowego laplasjanu w całej dwuwymiarowej przestrzeni funkcja Greena wynosi

$$G(x,y,x',y') = +\frac{1}{2\pi} \log[(x-x')^2+(y-y')^2]^{1/2}.$$

[*Wskazówka*: Do funkcji Greena można zawsze dodać stałą i nadal będzie ona spełniała $\nabla^2 G = \delta(x-x')\delta(y-y')$.]

23. Pokaż, że jeżeli funkcja falowa ψ cząstki spełnia równanie Schrödingera

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

gdzie H jest samosprzężonym operatorem, i jeżeli

$$\int \psi^*(\mathbf{r},0)\psi(\mathbf{r},0)d^3r = 1 \tag{1}$$

w chwili $t = 0$, wtedy w każdej następnej chwili t mamy także

$$\int \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r = 1. \tag{2}$$

Ponieważ w mechanice kwantowej $|\psi|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa, a $|\psi|^2 d^3r$ daje prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w elemencie objętości d^3r i równania (1) i (2)

stwierdzają zachowanie całkowitego prawdopodobieństwa, to znaczy, że jeżeli całkowite prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdziekolwiek jest początkowo równe jedności [równ. (1)], pozostaje ono równe jedności we wszystkich następnych chwilach. Jasne, że interpretacja $|\psi|^2$ jako gęstości prawdopodobieństwa nie miałaby sensu, gdyby było inaczej. Zauważ, że taka interpretacja nie stosowałaby się do rozwiązań równania dyfuzji (lub przewodnictwa cieplnego).

24. Użyj twierdzenia Greena w celu otrzymania równ. (7.117) z równ. (7.116).

25. a) Pokaż, że funkcja

$$G'(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')\Theta(\tau'-\tau)$$

jest funkcją Greena równ. (7.131), gdzie G_1 spełnia równania (7.134) i (7.135).

b) Oznacza to, że możemy napisać zależne od czasu całkowe równanie Schrödingera jako

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r' \int_{\tau}^{i\infty} G'(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')U(\mathbf{r}', \tau')\psi(\mathbf{r}', \tau')d\tau'$$

w notacji równ. (7.137). Pokaż, że jeżeli U jest statycznym potencjałem, który jest „wyłączany" w dalekiej przyszłości, tzn.

$$U(\mathbf{r}, \tau) = V(\mathbf{r})e^{-\varepsilon' t} = V(\mathbf{r})e^{i\varepsilon\tau},$$

to w granicy $\varepsilon \to 0$ otrzymujemy równanie Lippmanna–Schwingera o rozwiązaniach odpowiadających warunkom brzegowym typu wchodzącej fali kulistej.

26. a) Zauważ, że równanie (7.125b) nie ma sensu, jeżeli $\tau' > \tau$ (zakładając, co będzie zwykle miało miejsce, że $\lambda_m \to +\infty$, gdy $m \to \infty$), a τ i τ' są rzeczywiste. Znajduje to odbicie w dyskusji następującej po równ. (7.128), gdzie milcząco zakładamy, że $\tau \to 0$ od strony liczb dodatnich (patrz paragraf 5.3). Zatem funkcja Greena

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\Theta(\tau'-\tau)G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$$

uzyskana w poprzednim zadaniu, chociaż formalnie wydaje się spełniać

$$\left(H + \frac{\partial}{\partial\tau}\right)G = \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(\tau-\tau'),$$

nie jest akceptowalną funkcją Greena. Pokaż, że jeżeli wyprowadza się funkcję Greena dla przypadku równania dyfuzji (lub przewodnictwa cieplnego) używając metody transformat Fouriera, to uzyskuje się tylko

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = \Theta(\tau-\tau')G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau'),$$

gdzie G_1 dane jest równaniem (7.139).

b) W przypadku równania Schrödingera dla cząstki swobodnej wykładnik w równ. (7.125b) jest oscylujący, ponieważ τ jest urojone. Pokaż, że metoda transformat Fouriera daje wtedy dwie funkcje Greena

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \Theta(t-t')G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$$

i

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -\Theta(t'-t)G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$$

w zależności od tego, czy używa się $+i\varepsilon$, czy $-i\varepsilon$ w celu uniknięcia osobliwości powstającej w tym przypadku przy stosowaniu metody transformat Fouriera. W powyższych równaniach na G_+ i G_-, funkcja G_1 jest dana równaniem (7.139) z $\tau = i\hbar t/2m$.

27. a) Pokaż, że funkcja

$$G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\Theta(\tau'-\tau)\tilde{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$$

jest rzeczywiście funkcją Greena operatora

$$\mathcal{O} = H + \frac{\partial^2}{\partial \tau^2},$$

jeżeli $\tilde{G}_2$ spełnia równ. (7.152) i (7.157).

b) Znajdź w przypadku równania falowego wyrażenie dla funkcji $G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$ analogiczne do wyrażenia dla G_R danego wzorem (7.163).

c) Znajdź rozwiązanie równania $\mathcal{O}\psi(\mathbf{r}, \tau) = J(\mathbf{r}', \tau)$ wyrażone przez funkcję G_A. Zinterpretuj rozwiązanie przez analogię do rozwiązania równ. (7.164).

d) Pokaż, że

$$G_A + G_R = \frac{1}{2\pi}\delta(s^2),$$

gdzie s^2 jest lorentzowsko niezmienniczym iloczynem skalarnym

$$s^2 \equiv (\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 - (\tau-\tau')^2 = (x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2 - c^2(t-t')^2.$$

28. Stosując metodę transformat Fouriera w czterech wymiarach znajdź funkcję Greena dla równania falowego. Pokaż, że uzyskuje się G_R [z równ. (7.163)] lub G_A (z poprzedniego zadania) w zależności od wyboru sposobu ominięcia osobliwości, która powstaje w metodzie transformat Fouriera [zobacz podobną dyskusję w paragrafie 7.4, równ. (7.63)' i następne].

29. Rozważ niejednorodne zależne od czasu równanie Kleina–Gordona

$$\left[-\nabla^2 + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \varkappa^2\right]\psi(\mathbf{r}, t) = \varrho(\mathbf{r}, t).$$

a) Pokaż, że stosując metodę transformat Fouriera uzyskuje się następujące całkowe wyrażenia na funkcje Greena G_R i G_A:

$$G_R(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \frac{c}{8\pi^2 R i}\frac{d}{dR}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(R/c)\sqrt{q^2-\varkappa^2c^2}}}{\sqrt{q^2-\varkappa^2c^2}} e^{-iq(t-t')}dq,$$

$$G_A(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = -\frac{c}{8\pi^2 R i}\frac{d}{dR}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i(R/c)\sqrt{q^2-\varkappa^2c^2}}}{\sqrt{q^2-\varkappa^2c^2}} e^{-iq(t-t')}dq,$$

gdzie $R = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. Te dwa wyrażenia odpowiadają dwom możliwym sposobom uniknięcia osobliwości, która pojawia się przy wykonywaniu całek Fouriera odpowiadających zmiennym przestrzennym. W pierwszej całce wyrażenie $\sqrt{q^2-\varkappa^2c^2}$ ma dodatnią część urojoną, gdy $|q| < \varkappa c$; w drugiej całce $\sqrt{q^2-\varkappa^2c^2}$ ma ujemną część urojoną, gdy $|q| < \varkappa c$.

b) Pokaż, że $G_R = 0$, gdy $R/c > (t-t')$ i że $G_A = 0$, gdy $R/c + (t-t') > 0$.

[*Wskazówka*: Jeżeli całka występująca w wyrażeniu na G_R rozważana jest jako całka w płaszczyźnie zespolonej, wtedy płaszczyzna ma cięcie od $-\varkappa c$ do $+\varkappa c$ i rozważana całka przebiega po górnej krawędzi cięcia. W przypadku G_A całka przebiega po dolnej krawędzi cięcia.]

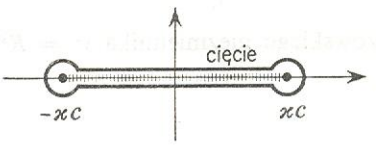
c) Pokaż, że gdy $R/c < (t-t')$, to całka występująca w G_R może być sprowadzona do całki po konturze pokazanym na rys. 7.12. Pokaż stąd, że

$$G_R = -\frac{c}{4\pi^2 R}\frac{d}{dR}\left[\int_{-\varkappa c}^{\varkappa c}\frac{1}{\sqrt{\varkappa^2 c^2 - q^2}}\cosh\left[\frac{R}{c}\sqrt{\varkappa^2 c^2 - q^2}\right]e^{-iq(t-t')}dq\Theta(T-R)\right]$$

i podobnie

$$G_A = -\frac{c}{4\pi^2 R}\frac{d}{dR}\left[\int_{-\varkappa c}^{\varkappa c}\frac{1}{\sqrt{\varkappa^2 c^2 - q^2}}\cosh\left[\frac{R}{c}\sqrt{\varkappa^2 c^2 - q^2}\right]e^{-iq(t-t')}dq\Theta(-T-R)\right],$$

gdzie $\Theta(x)$ równa się jeden, gdy $x > 0$ oraz zero, gdy $x < 0$. W powyższym równaniu $T = c(t-t')$.



Rys. 7.12

d) Dokonując zamiany zmiennych $q = \varkappa c\sin\theta$ i korzystając z symetrii pokaż, że

$$G_R = -\frac{c}{8\pi^2 R}\frac{d}{dR}\left[\int_{-\pi}^{\pi}\cosh(\varkappa R\cos\theta)e^{-i\varkappa T\sin\theta}d\theta\Theta(T-R)\right],$$

$$G_A = -\frac{c}{8\pi^2 R}\frac{d}{dR}\left[\int_{-\pi}^{\pi}\cosh(\varkappa R\cos\theta)e^{-i\varkappa T\sin\theta}d\theta\Theta(-T-R)\right].$$

[*Wskazówka*: Zauważ, że granice całkowania są $\pm\pi$, a nie $\pm\pi/2$.]

e) Pokaż, że wyrażenie na G_R może być napisane w postaci

$$G_R = -\frac{c}{8\pi^2 Ri}\frac{d}{dR}\left[\oint_C\frac{1}{z}\cosh\left[\frac{1}{2}\varkappa R\left(z+\frac{1}{z}\right)\right]e^{-\varkappa T(z-1/z)/2}dz\Theta(T-R)\right]$$

i G_A może być wyrażone podobnym wzorem. C jest tutaj konturem o kształcie jednostkowego okręgu, przebieganym w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara.

f) Dokonując dwa razy zamiany zmiennych (w dwu różnych całkach) pokaż, że otrzymuje się

$$G_R = -\frac{c}{8\pi^2 Ri}\frac{d}{dR}\left[\oint_C\frac{1}{\xi}\exp\left[-\frac{\varkappa}{2}\sqrt{T^2-R^2}\right]\left(\xi-\frac{1}{\xi}\right)d\xi\Theta(T-R)\right].$$

Posługując się całkowym przedstawieniem dla funkcji Bessela [równ. (6.65) i zdanie następujące po tym równaniu] pokaż, że powyższe wyrażenie redukuje się do

$$G_R = -\frac{c}{4\pi R}\frac{d}{dR}[J_0(\varkappa\sqrt{T^2-R^2})\Theta(T-R)].$$

Podobnie

$$G_A = -\frac{c}{4\pi R}\frac{d}{dR}[J_0(\varkappa\sqrt{T^2-R^2})\Theta(-T-R)].$$

[Skorzystaliśmy tu z faktu, że $J_0(x) = J_0(-x)$, który wynika natychmiast z równ. (6.66).]

g) Przeprowadź różniczkowanie korzystając z równ. (7.22), aby pokazać, że

$$G_R = \frac{c}{4\pi R}\delta(R-T) - \frac{\varkappa c}{4\pi\sqrt{T^2-R^2}} J_1(\varkappa\sqrt{T^2-R^2})\Theta(T-R),$$

$$G_A = \frac{c}{4\pi R}\delta(R+T) - \frac{\varkappa c}{4\pi\sqrt{T^2-R^2}} J_1(\varkappa\sqrt{T^2-R^2})\Theta(-T-R).$$

Zauważ, że gdy $\varkappa \to 0$, to G_R przechodzi w wyrażenie dane wzorem (7.163) oprócz czynnika c, co powinieneś być w stanie wyjaśnić. (Zauważ, że $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$.) Zauważ także, że $G_R + G_A$ może być napisane w postaci

$$G_R + G_A = \frac{c}{2\pi}\delta(T^2-R^2) - \frac{\varkappa c}{4\pi\sqrt{T^2-R^2}} J_1(\varkappa\sqrt{T^2-R^2})\Theta(T^2-R^2),$$

co jest funkcją tylko lorentzowskiego niezmiennika $s^2 = R^2 - T^2 = (x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2-c^2(t-t')^2$.

LITERATURA POMOCNICZA

H. S. Carslaw i J. C. Jaeger *Conduction of Heat in Solids*, drugie wydanie, Oxford University Press, New York 1959.

R. Courant i D. Hilbert *Methods of Mathematical Physics* t. 2. Interscience, New York 1962.

J. Dettman *Mathematical Methods in Physics and Engineering*. McGraw-Hill, New York 1962.

B. Friedman *Principles and Techniques of Applied Mathematics*. Wiley, New York 1956.

J. D. Jackson *Classical Electrodynamics*. Wiley, New York 1962.

C. Lanczos *Linear Differential Operations*. D. Van Nostrand, Princeton–New York 1961.

P. M. Morse i H. Feshbach *Methods of Theoretical Physics*, t. 1. McGraw-Hill, New York 1953.

A. Sommerfeld *Partial Differential Equations in Physics*. Academic Press, New York 1949.

WPROWADZENIE DO RÓWNAŃ CAŁKOWYCH

WSTĘP

W ostatnim rozdziale widzieliśmy, że pojęcie funkcji Greena prowadziło nas w naturalny sposób do sformułowania pewnych problemów za pomocą równań całkowych zamiast równań różniczkowych. W tym i następnym rozdziale będziemy studiować równania całkowe jako problem sam w sobie, niezależnie od konkretnego fizycznego pochodzenia tych równań. Stwierdzimy, że matematyka tych równań wymaga posługiwania się nieskończenie wymiarowymi przestrzeniami wektorowymi; w tym względzie skupimy naszą uwagę przede wszystkim, choć nie wyłącznie, na przestrzeni Hilberta. W świetle rozważań rozdziałów 3 i 4 nasuwa się interesujące pytanie: jaki istnieje związek między wynikami teorii posługujących się skończenie i nieskończenie wymiarowymi przestrzeniami wektorowymi? Zobaczymy, że związek ten jest bardzo ścisły i że w wielu bardzo ważnych przypadkach można rozwiązać zagadnienia nieskończenie wymiarowe metodami właściwymi dla skończonej liczby wymiarów. Jednakże istnieją również ważne i interesujące różnice mające wiele fizycznych konsekwencji.

Rozdział niniejszy poświęcony jest badaniu kilku specjalnych typów równań całkowych, które dają się dosyć łatwo rozwiązać. Skorzystamy tu także z okazji, aby wprowadzić, w bardziej precyzyjny sposób niż w rozdziale 5, pewne kluczowe koncepcje teorii nieskończenie wymiarowych przestrzeni wektorowych.

8.1. METODY ITERACYJNE — LINIOWE OPERATORY CAŁKOWE

W rozdziale 7 napotkaliśmy kilka rozmaitych równań całkowych w postaci

$$f(x) = g(x) + \int_a^b k(x, y) f(y) dy, \tag{8.1}$$

gdzie $g(x)$ i $k(x, y)$ są danymi funkcjami. Równania tej postaci znane są jako *równania całkowe drugiego rodzaju*. Jeżeli $g(x)$ nie jest identycznie równe zeru, mówimy, że równanie jest niejednorodne, a jeżeli $g(x)$ wszędzie znika, równanie jest nazywane *jednorodnym*. Jeżeli po lewej stronie równ. (8.1) zastąpimy funkcję $f(x)$ przez zero, powstające równanie jest *równaniem całkowym pierwszego rodzaju*. Przykładem takiego równania jest

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} f(y) dy,$$

gdzie $g(x)$ jest znaną funkcją, a $f(y)$ należy wyznaczyć. W tym szczególnym przypadku wiemy z teorii transformat Fouriera, że rozwiązanie dane jest przez

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iyx} g(x)\,dx,$$

ale w ogólności niewiele wiadomo o tych równaniach i nie będziemy ich w dalszym ciągu rozważać.

Ważnym przypadkiem szczególnym równ. (8.1) jest *równanie Volterra*, które ma ogólną postać

$$f(x) = g(x) + \int_a^x \tilde{k}(x, y) f(y)\,dy. \tag{8.2}$$

Równanie (8.1) sprowadza się do tej postaci, jeżeli funkcja $k(x, y)$ znika, gdy $y > x$. Uogólnienie równ. (8.2), które można napotkać na przykład w mechanice newtonowskiej, ma postać

$$f(x) = g(x) + \int_a^x h(x, y, f(y))\,dy. \tag{8.3}$$

Nieznana funkcja f może tu wystąpić liniowo, jak w równaniu (8.2) lub nieliniowo, zależnie od postaci $h(x, y, f(y))$. W tym rozdziale będziemy dyskutować głównie liniowe równania całkowe, chociaż w paragrafie 8.4 zastanowimy się krótko nad pewnymi prostymi operatorami nieliniowymi.

Zapiszmy teraz (8.1) w postaci

$$f = g + Kf, \tag{8.4}$$

gdzie K jest operatorem zdefiniowanym przez

$$Kf \equiv \int_a^b k(x, y) f(y)\,dy. \tag{8.5}$$

Operator K jest oczywiście liniowy, bo

$$K(f_1 + f_2) = \int_a^b k(x, y)[f_1(y) + f_2(y)]\,dy =$$

$$= \int_a^b k(x, y) f_1(y)\,dy + \int_a^b k(x, y) f_2(y)\,dy = Kf_1 + Kf_2.$$

Wobec tego możemy rozważyć f i g jako elementy z pewnej przestrzeni wektorowej, powiedzmy V oraz K jako operator liniowy odwzorowujący V w siebie. Operator K zdefiniowany przez (8.5) nazywany jest *operatorem całkowym*, a $k(x, y)$ nosi nazwę *jądra operatora*.

Równanie (8.4) może być teraz napisane następująco

$$(I - K)f = g, \tag{8.6}$$

gdzie I jest operatorem tożsamościowym. W tej postaci problem wygląda bardzo podobnie

do równań macierzowych dyskutowanych w rozdziałach 3 i 4. Jeżeli potrafimy obliczyć $(I-K)^{-1}$, to zadanie jest formalnie rozwiązane, ponieważ

$$f = (I-K)^{-1}g \tag{8.7}$$

(zakładając oczywiście, że operator odwrotny jest dobrze określony). Zauważcie, że chociaż w równ. (8.7) K może być operatorem całkowym, I nie jest operatorem całkowym, chyba że chcemy użyć funkcji δ

$$If = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y)f(y)\,dy.$$

Najbardziej pomyślną sytuacją byłoby, gdyby operator K był w jakimś sensie „małym" operatorem, tak że moglibyśmy spróbować napisać

$$(I-K)^{-1} = I+K+K^2+\ldots, \tag{8.8}$$

przez analogię z rozwinięciem $(1-x)^{-1}$ na szereg potęgowy dla małych x. Ponieważ już założyliśmy, że K działając na dowolny element przestrzeni V daje w wyniku inny element V, to K^n zdefiniowane jest po prostu przez kolejne stosowanie K, na przykład $K^2 = KK$, $K^3 = KK^2$ itd.; to ograniczenie na K nie jest trywialne, ponieważ zdarza się czasem, że rozsądnie wyglądające operatory w działaniu na V dają obiekty, które nie należą do V. Na przykład rozważcie przestrzeń $L_2[0, 1]$ funkcji jednej zmiennej, całkowalnych w kwadracie i zdefiniowanych na $[0, 1]$, i niech operator d/dx działa w tej przestrzeni, a więc $f(x) = \sqrt{x}$ należy do $L_2[0, 1]$, ale

$$\frac{d}{dx}[f(x)] = \frac{1}{2}x^{-1/2}$$

do niej nie należy. Zatem operator d/dx nie przekształca każdego elementu przestrzeni $L_2[0, 1]$ w inny element tej przestrzeni i nie jest dopuszczalnym operatorem w naszych rozważaniach. W rzeczywistości założenie, że zbiór operatorów zawsze transformuje elementy danej przestrzeni w elementy tej samej przestrzeni wektorowej ma pewne silne konsekwencje, które później wskażemy.

Przypuśćmy teraz, że prawa strona równ. (8.8) „zbiega się". (Wyrażenie „zbiega się" bierzemy w cudzysłów, bo na razie nie podaliśmy definicji zbieżności dla operatorów.) W takim przypadku operator, do którego zbiega się ten szereg, jest odwrotnością $(I-K)$, ponieważ mnożąc $I+K+K^2+K^3+\ldots$ z którejkolwiek strony przez $(I-K)$ otrzymujemy I. Możemy zatem przypuszczać, że szereg

$$f = g+Kg+K^2g+K^3g+\ldots, \tag{8.9}$$

gdy jest zbieżny, jest rozwiązaniem równania (8.4). Szereg (8.9) nazywany jest przez matematyków *szeregiem Neumanna*, a *szeregiem Borna* przez fizyków, ponieważ Max Born był pierwszym, który w mechanice kwantowej zastosował podstawową koncepcję iteracji (chociaż motywowana ona była innymi rozważaniami niż te przedstawione tutaj).

Zacznijmy teraz zastanawiać się nad okolicznościami, w których szereg (8.9) jest zbieżny. Jeżeli K jest operatorem całkowym typu zdefiniowanego przez (8.5), to równ. (8.9) można zapisać jako

$$f(x) = g(x)+\int_a^b k(x,x')g(x')dx'+\int_a^b dx'\int_a^b dx''k(x,x')k(x',x'')g(x'')+\ldots. \tag{8.10}$$

Zakładamy oczywiście, że $g(x) \not\equiv 0$, gdyż w przeciwnym przypadku szereg (8.9) lub (8.10) degeneruje się do wyniku $f(x) \equiv 0$, co jest zawsze możliwym (ale nieinteresującym) rozwiązaniem dla $g(x) \equiv 0$. Żądamy ponadto, aby $|k(x, y)|$ było ograniczone, gdy x i y leżą w $[a, b]$, tzn.

$$\max_{x,\, y \in [a,\, b]} |k(x, y)| = M, \tag{8.11}$$

gdzie M jest pewną skończoną liczbą. Zakładamy dalej, że całka

$$\int_a^b |g(x)|\, dx \tag{8.12}$$

istnieje i równa jest skończonej stałej C. Możemy wtedy napisać

$$f(x) = g_0(x) + g_1(x) + g_2(x) + g_3(x) + \ldots, \tag{8.13}$$

gdzie $g_0(x) \equiv g(x)$ i

$$g_n(x) = \int_a^b k(x, y) g_{n-1}(y)\, dy.$$

Chcemy następnie pokazać, że przy dokonanych założeniach odnośnie $k(x, y)$ i $g(x)$ mamy

$$|g_n(x)| \leqslant CM[M(b-a)]^{n-1} \tag{8.14}$$

dla $n \geqslant 1$, a dla $n = 1$

$$|g_1(x)| \leqslant \int_a^b |k(x, y) g(y)|\, dy \leqslant \int_a^b |k(x, y)| \cdot |g(y)|\, dy;$$

ale $|k(x, y)| \leqslant M$, a więc

$$|g_1(x)| \leqslant M \int_a^b |g(y)| dy = MC.$$

Wobec tego równ. (8.14) jest spełnione dla $n = 1$. Zakładamy teraz, że jest ono spełnione dla $n = m-1$ i dowodzimy następnie, że jest prawdziwe dla $n = m$. W ten sposób ogólny wynik będzie udowodniony przez indukcję. Dla $g_m(x)$ mamy

$$|g_m(x)| \leqslant \int_a^b |k(x, y)| \cdot |g_{m-1}(y)| dy \leqslant MC[M(b-a)]^{m-2} \int_a^b |k(x, y)| dy \leqslant MC[M(b-a)]^{m-1},$$

co jest szukanym wynikiem. Wobec tego m-ty człon sumy (8.13) jest zmajoryzowany przez $MC[M(b-a)]^{m-1}$, tzn. że dla wszystkich x jest mniejszy co do bezwzględnej wartości niż $MC[M(b-a)]^{m-1}$, zatem

$$|f(x) - \sum_{n=0}^{N} g_n(x)| \leqslant |g_{N+1}(x)| + |g_{N+2}(x)| + \ldots \leqslant MC \sum_{m=N}^{\infty} [M(b-a)]^m \leqslant$$

$$\leqslant MC[M(b-a)]^N \sum_{m=0}^{\infty} [M(b-a)]^m.$$

Jeżeli $M(b-a) < 1$, to ostatnia suma jest zbieżna, możemy więc napisać

$$|f(x) - \sum_{n=0}^{N} g_n(x)| \leqslant \frac{MC[M(b-a)]^N}{1 - M(b-a)}$$

dla wszystkich x. Ponieważ $M(b-a) < 1$, więc jeżeli wybierzemy wystarczająco duże N, prawa strona tego równania może być dowolnie mała. Zatem, gdy N dąży do nieskończoności, $\sum_{n=0}^{N} g_n(x)$ zbiega się jednostajnie do funkcji $f(x)$. Czytelnik może łatwo pokazać, że jeżeli $k(x, y)$ jest ciągłe w x dla wszystkich y i jeżeli $g(x)$ jest ciągłe, wtedy każde $g_n(x)$ będzie ciągłe i jednostajnie zbieżna suma będzie także ciągła. Ponieważ szereg $f = g+Kg+$ $+K^2g+\ldots$ jest jednostajnie zbieżny, możemy obliczyć $(I-K)f$ całkując człon za członem. Otrzymujemy

$$(I-K)f = g_0+g_1+g_2+g_3+ \ldots -K(g_0+g_1+g_2+ \ldots),$$

ale $Kg_n = g_{n+1}$, zatem

$$(I-K)f = g_0 \equiv g,$$

a więc szereg Neumanna rzeczywiście dostarcza rozwiązania problemu.

Podsumowując możemy stwierdzić, że jeżeli $M < (b-a)^{-1}$, wtedy szereg Neumanna (8.9) lub (8.10) zbiega się do rozwiązania równ. (8.1). Nie oznacza to wcale, że M musi być mniejsze niż $(b-a)^{-1}$, aby szereg Neumanna był zbieżny. Łatwo skonstruować jądra, dla których $M \geqslant (b-a)^{-1}$, ale mimo to szereg Neumanna jest zbieżny. Na przykład czytelnik powinien wyliczyć szereg Neumanna dla

$$k(x, y) = \xi(x)\eta(y),$$

gdzie

$$\int_a^b \xi(x)\eta(x)dx = 0.$$

Inną dużą klasę jąder, dla których ograniczenie $M < (b-a)^{-1}$ jest niepotrzebne, stanowi klasa jąder równań Volterra, tzn. równań postaci (8.2). W tym przypadku, jeżeli napiszemy

$$f(x) = \tilde{g}_0(x)+\tilde{g}_1(x)+\tilde{g}_2(x)+ \ldots,$$

gdzie znów $\tilde{g}_0(x) \equiv g(x)$ i

$$\tilde{g}_n(x) \equiv \int_a^x k(x, y)\tilde{g}_{n-1}(y)dy,$$

to możemy pokazać, że

$$|\tilde{g}(x)| \leqslant MC[M(x-a)]^{n-1}/(n-1)!$$

dla $n \geqslant 1$, o ile $a \leqslant x \leqslant b$. Tak jak poprzednio powyższe równanie jest prawdziwe dla $n = 1$. Zakładając, że jest ono prawdziwe dla $n = m-1$, otrzymujemy

$$|\tilde{g}_m(x)| \leqslant \int_a^x |k(x, y)| \cdot |\tilde{g}_{m-1}(y)|dy \leqslant MCM^{m-2} \int_a^x |k(x, y)|(y-a)^{m-2}dy/(m-2)!$$

Ponieważ $|k(x, y)| \leqslant M$, mamy

$$|\tilde{g}_m(x)| \leqslant MC[M(x-a)]^{m-1}/(m-1)!,$$

tak jak trzeba. Zatem, dla $x \in [a, b]$, n-ty człon szeregu Neumanna jest zmajoryzowany przez

$$MC[M(b-a)]^{n-1}/(n-1)!,$$

a więc szereg Neumanna jest zmajoryzowany przez szereg, który zbiega się dla wszystkich wartości $M(b-a)$. Wobec tego szereg Neumanna zawsze dostarcza rozwiązania równania typu Volterra.

8.2. NORMY OPERATORÓW

Być może przyszło czytelnikowi na myśl, że poważną wadą rozważań przedstawionych w poprzednim paragrafie jest warunek $M < (b-a)^{-1}$. Jeżeli w przypadku rozważanym w paragrafie 8.1 przedział całkowania jest nieskończony, to warunek ten sprowadza się do $M < 0$. Ale z definicji M jest dodatnie, żadne więc jądro nie może spełnić tego warunku. Jednakże oszacowanie funkcji drogą zastąpienia jej wszędzie przez jej wartość maksymalną jest dla nieskończonych przedziałów bardzo prymitywnym przybliżeniem. Chcielibyśmy być w stanie pokazać, że możemy zastąpić

$$\max|k(x, y)| < (b-a)^{-1}$$

przez mniej ograniczający warunek na $k(x, y)$. W tym celu musimy najpierw zbadać dość szczegółowo problem zdefiniowania wielkości operatora liniowego.

W przestrzeni Hilberta normę wektora definiujemy przez

$$||f|| \equiv (f, f)^{1/2},$$

gdzie (,) oznacza iloczyn skalarny w przestrzeni Hilberta, do której f należy (patrz definicja 4.1). Jednakże pojęcie normy wektora jest znacznie bardziej ogólne, gdyż istnienie normy związane jest tylko z definicją długości, a nie kąta. Istnieje wiele przestrzeni wektorowych, w których nie można zdefiniować iloczynu skalarnego, ale gdzie mimo to długość lub metryka może być zdefiniowana. Możemy uogólnić pojęcie normy na tę szerszą klasę przestrzeni w następujący sposób.

Definicja 8.1. Normą w przestrzeni wektorowej V jest relacja, która każdemu elementowi f z V przypisuje liczbę rzeczywistą oznaczoną przez $||f||$ taką, że

a) $||f+g|| \leqslant ||f||+||g||$, dla wszystkich $f, g \in V$,

b) $||f|| = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $f \equiv 0$,

c) $||af|| = |a| \cdot ||f||$ dla dowolnego skalara a należącego do pola, nad którym V jest zdefiniowane.

Przestrzeń wektorowa, w której można zdefiniować normę, nazywana jest *unormowaną przestrzenią wektorową*. Badaliśmy już dosyć szczegółowo jedną taką przestrzeń, a mianowicie przestrzeń Hilberta,w której normę wektora można wyprowadzić z istnienia iloczynu skalarnego. Ze względu na aksjomatyczne własności iloczynu skalarnego (definicja 4.1) norma zdefiniowana w ten sposób będzie miała wszystkie własności wymagane w definicji 8.1.

Z chwilą gdy w przestrzeni wektorowej została zdefiniowana norma, można rozważyć problemy związane ze zbieżnością ciągu wektorów.

Definicja 8.2. Ciąg wektorów $\{f_n\}$ w unormowanej przestrzeni wektorowej V nazywa się zbieżnym w sensie normy do $f \in V$, jeżeli $||f_n - f|| \to 0$, gdy $n \to \infty$.

Definicja ta uogólnia pojęcie średniej zbieżności, wprowadzone w paragrafie 5.2 dla przestrzeni Hilberta, na dowolną unormowaną przestrzeń.

Definicja 8.3. Ciąg wektorów $\{f_n\}$ w unormowanej przestrzeni wektorowej V nazywa się ciągiem Cauchy'ego, jeżeli dla dowolnego $\varepsilon > 0$ istnieje taka liczba całkowita N, że $||f_n - f_m|| < \varepsilon$, gdy tylko $m > N$ i $n > N$.

Najważniejszą własnością ciągu Cauchy'ego jest to, że nie musimy mówić o funkcji granicznej. Pamiętając o tym wprowadzimy ostatnią definicję.

Definicja 8.4. Unormowana przestrzeń wektorowa nazywa się zupełną, jeżeli każdy ciąg Cauchy'ego w tej przestrzeni dąży do wektora należącego do tej przestrzeni.

Dobrze znaną przestrzenią wektorową, która jest unormowana, ale nie jest zupełna, jest przestrzeń wektorowa liczb wymiernych ze zwykłą euklidesową normą (wartością bezwzględną). Na przykład ciąg $\{s_n\}$, gdzie

$$s_n = \sum_{m=1}^{n} \frac{1}{m^2},$$

jest ciągiem Cauchy'ego liczb ułamkowych, którego granicą jest $\pi^2/6$, czyli liczba niewymierna.

Zupełne unormowane przestrzenie wektorowe nazywają się *przestrzeniami Banacha*, od nazwiska polskiego matematyka, który odegrał kluczową rolę w rozwinięciu teorii tych przestrzeni. Znaną przestrzenią Banacha jest przestrzeń funkcji ciągłych na odcinku $[a, b]$, którą oznaczymy przez $C[a, b]$. Normą tej przestrzeni jest

$$||f(x)|| = \max_{x\in[a,b]} |f(x)|.$$

Na podstawie nierówności trójkąta dla liczb rzeczywistych

$$|f(x)+g(x)| \leqslant |f(x)|+|g(x)|$$

dla każdego x, zatem w szczególności

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x)+g(x)| \leqslant \max_{x\in[a,b]} |f(x)| + \max_{x\in[a,b]} |g(x)|$$

lub

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

Pozostałe dwa warunki definicji 8.1 spełnione są trywialnie. Przestrzeń $C[a, b]$ jest oczywiście przestrzenią wektorową, ponieważ suma dwóch funkcji ciągłych jest funkcją ciągłą. Wreszcie, i co najważniejsze, z tak zdefiniowaną normą $C[a, b]$ jest przestrzenią zupełną, ponieważ granica jednostajnie zbieżnego ciągu funkcji ciągłych jest funkcją ciągłą (patrz zadanie 8.1), co oznacza, że przestrzeń $C[a, b]$ jest przestrzenią Banacha.

Inną ważną rodziną przestrzeni Banacha są tzw. przestrzenie L_p zdefiniowane jako przestrzenie wektorowe funkcji $f(x)$ spełniających

$$\int_D |f(x)|^p dx < \infty,$$

gdzie D jest jakimś podzbiorem (niekoniecznie skończonym) osi liczb rzeczywistych. Norma w tej przestrzeni dana jest przez (patrz zadania 8.2 i 8.3)

$$||f|| = \left[\int_D |f(x)|^p dx\right]^{1/p}$$

i można pokazać (uogólnione twierdzenie Riesza–Fishera), że przestrzeń L_p jest z tą normą zupełna i jest zatem przestrzenią Banacha. W szczególności widzimy, że przestrzeń

L_2 funkcji całkowalnych w kwadracie, którą rozważaliśmy w rozdziale 5, jest zarówno przestrzenią Banacha, jak i przestrzenią Hilberta. W rzeczywistości każda przestrzeń Hilberta jest przestrzenią Banacha, ponieważ jest ona przestrzenią zupełną z iloczynem skalarnym, której norma jest automatycznie określona przez ten iloczyn skalarny.

Teraz, gdy ustaliliśmy strukturę przestrzeni Banacha, należy zastanowić się, jakiej zmianie ulega przestrzeń pod wpływem liniowych transformacji. W tym rozdziale będziemy dyskutować *ograniczone transformacje liniowe*.

Definicja 8.5. Transformacja K w unormowanej liniowej przestrzeni wektorowej V nazywa się ograniczoną transformacją liniową, jeżeli

a) $K(f+g) = Kf+Kg$ dla wszystkich $f, g \in V$,

b) $K(af) = aKf$ dla wszystkich $f \in V$ i dla wszystkich skalarów z pola, nad którym zdefiniowana jest przestrzeń V,

c) istnieje taka stała M, że $||Kf|| \leqslant M||f||$ dla wszystkich $f \in V$.

Definicja 8.6. Niech V będzie unormowaną przestrzenią wektorową, a K ograniczoną transformacją przestrzeni w V, to wtedy najmniejsze M spełniające $||Kf|| \leqslant M||f||$ dla wszystkich $f \in V$ nazywa się normą K i będziemy je zapisywać w postaci $||K||$. Zauważcie, że używamy tego samego oznaczenia dla normy operatora co dla normy funkcji. W celu uniknięcia nieporozumień wektory będziemy zawsze pisać małymi literami, a operatory dużymi.

Nietrudno stwierdzić, że $||K||$ zdefiniowane w ten sposób jest rzeczywiście normą, na przykład

$$||(K_1+K_2)f|| = ||K_1f+K_2f|| \leqslant ||K_1f||+||K_2f||,$$

ponieważ K_1f i K_2f są elementami V. Stosując definicję 8.6 mamy dla wszystkich f

$$||(K_1+K_2)f|| \leqslant ||K_1||\,||f||+||K_2||\,||f|| \leqslant [||K_1||+||K_2||]\,||f||,$$

ale $||K_1+K_2||$ jest najmniejszym M spełniającym $||(K_1+K_2)f|| \leqslant M||f||$ dla wszystkich f; wynika stąd natychmiast, że

$$||K_1+K_2|| \leqslant ||K_1||+||K_2||.$$

Inne własności normy operatora w podobny sposób wynikają z metrycznej struktury przestrzeni V, w której działają dyskutowane operatory. Prowadzi to do wniosku, że zbiór wszystkich liniowych transformacji przestrzeni Banacha jest unormowaną liniową przestrzenią wektorową i jest w rzeczywistości przestrzenią Banacha, ponieważ można pokazać, że przestrzeń ta jest zupełna. A co teraz z normą iloczynu dwóch ograniczonych liniowych transformacji przestrzeni V?

$$||(K_1K_2)f|| = ||K_1(K_2f)|| \leqslant ||K_1||\,||K_2f|| \leqslant ||K_1||\,||K_2||\,||f||$$

dla wszystkich f, tak że $||K_1K_2|| \leqslant ||K_1||\,||K_2||$. W szczególności pociąga to za sobą relację

$$||K^n|| \leqslant ||K||^n. \tag{8.15}$$

Założenie, że K jest ograniczoną transformacją, ma pewną szczególnie użyteczną konsekwencję. Rozważmy ciąg wektorów f_n w V, który zbiega się w sensie normy do pewnego elementu $f \in V$, to znaczy

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

gdy $n \to \infty$. Naturalną jest rzeczą zapytać, czy odpowiedni ciąg $\{Kf_n\}$ zbiega się do Kf, czy nie. Aby pokazać, że tak jest, rozważmy wyrażenie

$$||Kf_n - Kf|| = ||K(f_n - f)|| \leqslant ||K||\,||f_n - f||;$$

ponieważ $||K||$ jest skończone i $f_n \to f$ w sensie normy, wynika z tego, że $Kf_n \to Kf$ w sensie normy. Nazywa to się własnością ciągłości ograniczonych transformacji liniowych.

Wprowadzenie normy operatora dostarcza nam szczególnie użytecznego sposobu dyskutowania zbieżności ciągów operatorów.

Definicja 8.7. Mówimy, że ciąg operatorów K_n jest zbieżny w sensie normy do operatora K, jeżeli $||K_n - K|| \to 0$, gdy $n \to \infty$.

Istnieją oczywiście inne sposoby zdefiniowania zbieżności ciągu operatorów. Na przykład moglibyśmy powiedzieć, że $\{K_n\}$ jest zbieżne do K, jeżeli dla wszystkich $f \in B$

$$||K_n f - Kf|| \to 0. \tag{8.16}$$

Jest to z pewnością dopuszczalny sposób zdefiniowania zbieżności operatorów, ale taka zbieżność nie jest równoważna zbieżności w sensie normy.

W celu zilustrowania różnicy między tymi dwoma typami zbieżności w przestrzeni Hilberta, a także w celu wprowadzenia szczególnie użytecznego typu operatora, rozważymy tak zwane operatory rzutowe P_n, które są zdefiniowane dla dowolnego ortonormalnego zbioru wektorów $\{\phi_i\}$ przez

$$P_n f \equiv \sum_{i=1}^{n} (\phi_i, f)\phi_i. \tag{8.17}$$

Mówimy, że P_n jest operatorem rzutowym na podprzestrzeń H rozpiętą przez pierwszych n elementów zbioru $\{\phi_i\}$. Z definicji (8.17) jest jasne, że P_n jest operatorem hermitowskim, ponieważ

$$(f, P_n g) = (P_n f, g) \tag{8.18}$$

dla wszystkich $f, g \in H$. Operatory P_n są również idempotentne

$$P_n^2 = P_n. \tag{8.19}$$

(Ta ostatnia własność jest oczywista z geometrycznego punktu widzenia, ponieważ po jednokrotnym rzutowaniu funkcji na podprzestrzeń H kolejne zastosowania tego samego rzutowania pozostawiają funkcję niezmienioną.)

Operatorowa norma P_n spełnia relację

$$||P_n|| \leqslant 1.$$

Aby to pokazać, rozważmy

$$||P_n f|| = (P_n f, P_n f)^{1/2} = (f, P_n f)^{1/2} = \left[\sum_{i=1}^{n} (f, \phi_n)(\phi_n, f)\right]^{1/2}.$$

Z nierówności Bessela [równ. (5.9)] dostajemy natychmiast

$$||P_n f|| \leqslant ||f||$$

dla wszystkich f, skąd $||P_n|| \leqslant 1$. Ten sam dowód może być zastosowany do operatora $(I - P_n)$ w celu pokazania, że

$$||I - P_n|| \leqslant 1.$$

Stwierdzamy teraz, że obie nierówności dla norm operatorów P_n i $I-P_n$ mogą być zamienione na ścisłe równości, o ile zauważymy na przykład, że istnieje zawsze przynajmniej jedno f, dla którego $||P_nf|| = ||f||$. W rzeczywistości zawsze, gdy $f = \phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n$, będziemy mieli $||P_nf|| = ||f||$; zatem $||P_n|| \geqslant 1$ i łącząc to z naszym poprzednim wynikiem ($||P_n|| \leqslant 1$) wnioskujemy, że

$$||P_n|| = 1. \tag{8.20}$$

Podobnie otrzymujemy, że

$$||I-P_n|| = 1. \tag{8.21}$$

Zupełność ortonormalnego zbioru $\{\phi_i\}$, określona w definicji 5.6 może być sformułowana zgodnie z równ. (5.10) za pomocą operatorów rzutowych w następujący sposób:

$$\lim_{n\to\infty} (f, P_nf) = (f,f)$$

dla wszystkich $f \in H$. Używając teraz równań (8.18) i (8.19) mamy

$$||P_nf-If|| = (P_nf-f, P_nf-f)^{1/2} = [(P_nf, P_nf)^{1/2}-(P_nf, f)-(f, P_nf)-(f,f)]^{1/2} =$$

$$= [(f, P_n^2f)-2(f, P_nf)+(f,f)]^{1/2} = [(f,f)-(f, P_nf)]^{1/2},$$

a więc

$$\lim_{n\to\infty} ||P_nf-If|| = [(f,f)-(f,f)]^{1/2} = 0,$$

zatem P_n zbiega się do I w sensie takim, jak w równ. (8.16). Czasem mówi się, że ciąg operatorów $\{P_n\}$ zbiega się silnie do I. Jeżeli myślimy o wektorach jako o „punktach" w przestrzeni wektorowej, to operatory są analogiczne do funkcji; silna zbieżność ciągu operatorów jest wtedy analogiczna do punktowej zbieżności ciągu funkcji. A co ze zbieżnością w sensie normy? Aby ciąg $\{P_n\}$ był zbieżny do I w sensie normy, dla każdego ε musi istnieć takie N, że dla wszystkich $f \in H$

$$||(P_n-I)f|| \leqslant \varepsilon||f||, \tag{8.22}$$

gdy tylko $n \geqslant N$, tzn. N jest niezależne od f. Zatem zbieżność w sensie normy jest analogiczna do jednostajnej zbieżności funkcji. Równ. (8.22) nie może jednak być spełnione, ponieważ dla dowolnego danego N zawsze jest możliwe wybranie takiej funkcji $h \in H$, w szczególności $h = \phi_{N+1}$, że

$$(P_N-I)h = (P_N-I)\phi_{N+1} = -\phi_{N+1};$$

zatem

$$||(P_N-I)h|| = ||h||,$$

a więc ciąg $\{P_n\}$ nie jest zbieżny do I w sensie normy. Widzimy, że zbieżność w sensie normy jest silniejszym warunkiem niż silna zbieżność. W następnych paragrafach w sytuacjach nie prowadzących do dwuznaczności często będziemy mówić o zbieżności w sensie normy po prostu jako o „zbieżności".

8.3. METODY ITERACYJNE W PRZESTRZENI BANACHA

Teraz, gdy mamy już sposób określania wielkości operatora liniowego, możemy podać zwięzły, ale kompletny opis ogólnej metody iteracyjnej. Rozważania niniejszego paragrafu obejmować będą wyniki paragrafu 8.1 jako przypadek szczególny, ale będą

także stosować się do przedziałów o nieskończonej długości i operatorów bardziej ogólnego typu niż operatory całkowe. Rozważmy równanie operatorowe

$$f = g + Kf$$

jako równanie w przestrzeni Banacha B, gdzie $g \in B$ i K jest ograniczoną operacją liniową na B. Na operator K nakładamy ograniczenie

$$||K|| < 1, \tag{8.23}$$

które jest analogiczne do żądania $M(b-a) < 1$ z paragrafu 8.1.

Chcemy pokazać, że ciąg sum cząstkowych $\{f_n\}$, gdzie

$$f_n = \sum_{m=0}^{n} K^m g$$

jest ciągiem Cauchy'ego. Rozważmy

$$||f_\nu - f_\mu|| = || \sum_{m=\mu+1}^{\nu} K^m g|| \leqslant \sum_{m=\mu+1}^{\nu} ||K^m g|| \leqslant \sum_{m=\mu+1}^{\nu} ||K^m||\,||g||,$$

gdzie dla wygody przyjęliśmy $\nu > \mu$. Zgodnie z równ. (8.15) $||K^m|| \leqslant ||K||^m$, a więc

$$||f_\nu - f_\mu|| \leqslant ||g|| \sum_{m=\mu+1}^{\nu} ||K||^m = ||g||\,||K||^{\mu+1} \sum_{m=0}^{\nu-\mu-1} ||K||^m,$$

ale

$$\sum_{m=0}^{\nu-\mu-1} ||K||^m \leqslant \sum_{m=0}^{\infty} ||K||^m = (1-||K||)^{-1},$$

gdzie wysumowaliśmy szereg geometryczny. Zatem ostatecznie

$$||f_\nu - f_\mu|| \leqslant ||g||\,||K||^{\mu+1}(1-||K||)^{-1}. \tag{8.24}$$

Ponieważ $||K|| < 1$, to $(1-||K||)^{-1}$ jest liczbą skończoną. Równ. (8.24) mówi nam zatem, że możliwe jest wybranie dostatecznie dużego μ tak, aby $||f_\nu - f_\mu||$ było mniejsze od dowolnie uprzednio zadanej liczby. Wobec tego $\{f_n\}$ jest ciągiem Cauchy'ego i ponieważ B jest przestrzenią zupełną (z definicji),

$$f_n \to f,$$

gdzie f jest elementem przestrzeni B. Z własności ciągłości ograniczonych operatorów liniowych mamy teraz

$$Kf_n \to Kf$$

w sensie normy, ale Kf_n dane jest przez

$$Kf_n = K \sum_{m=0}^{n} K^m g = \sum_{m=1}^{n+1} K^m g = \sum_{m=0}^{n+1} K^m g - g \quad \ldots$$

skąd

$$(f_{n+1} - g) \to Kf$$

w sensie normy. Ale $f_{n+1} \to f$ w sensie normy, skąd

$$f = g + Kf,$$

funkcja f jest zatem rozwiązaniem podstawowego równania. Jest to także jedyne rozwiązanie; przypuśćmy bowiem, że

$$f_1 = g + Kf_1, \quad f_2 = g + Kf_2,$$

wtedy

$$f_1 - f_2 = K(f_1 - f_2)$$

i wobec tego

$$||f_1 - f_2|| = ||K(f_1 - f_2)|| \leqslant ||K|| \cdot ||f_1 - f_2||.$$

Ponieważ $||K|| < 1$, oznacza to, że $||f_1 - f_2|| = 0$ i rozwiązanie, które znaleźliśmy, jest jedydym rozwiązaniem.

A zatem, gdy $||K|| < 1$, zawsze możliwe jest rozwiązanie równania (8.4). Warto podkreślić, że nie oznacza to, iż dla $||K|| \geqslant 1$ szereg Neumanna musi być rozbieżny. Pokazaliśmy tylko, że musi on się zbiegać dla $||K|| < 1$. Oczywiście im mniejsze $||K||$, tym szybciej szereg ten będzie się zbiegał. Jeżeli $||K||$ jest dostatecznie małe, nawet jeden lub dwa człony szeregu Neumanna mogą być wystarczające dla konkretnych celów. Zdarza się to często w przypadku problemów fizycznych.

Powyższe wyniki znajdują szczególnie ważne zastosowanie w przypadku przestrzeni L_2 funkcji całkowalnych w kwadracie. Rozważmy operator całkowy zdefiniowany przez

$$Kf = \int k(x, y) f(y) dy$$

działający w tej przestrzeni. Jeżeli $k(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie jako funkcja dwóch zmiennych tak, że

$$\int dx \int dy |k(x, y)|^2 < \infty, \tag{8.25}$$

to możemy pokazać, iż K jest przekształceniem, które odwzorowuje każdy element L_2 w jakiś element L_2. Z nierówności Schwartza wynika, że

$$\left[\left| \int k(x, y) f(y) dy \right| \right]^2 \leqslant \int |k(x, y)|^2 dy \cdot \int |f(y)|^2 dy$$

lub

$$|Kf|^2 \leqslant \int |k(x, y)|^2 dy \cdot ||f||^2,$$

zatem

$$||Kf||^2 = \int |Kf|^2 dx \leqslant ||f||^2 \int dx \int dy |k(x, y)|^2. \tag{8.26}$$

Ta ostatnia całka jest jednak skończona ze względu na (8.25), a więc $||Kf||$ jest skończone, jak to powyżej twierdziliśmy.

Równ. (8.26) prowadzi także do użytecznego oszacowania normy K. Z równania tego możemy wnioskować, że

$$||Kf|| \leqslant \left[\int dx \int dy |k(x, y)|^2 \right]^{1/2} ||f||$$

dla wszystkich $f \in L_2$ i stąd

$$||K|| \leqslant \left[\int dx \int dy |k(x, y)|^2 \right]^{1/2}.$$

W szczególności, jeżeli

$$\int dx \int dy |k(x, y)|^2 < 1,$$

to $||K|| < 1$ i powyższe rozważania mają zastosowanie.

Całkowa postać równania Schrödingera stanowi dobry przykład jądra całkowalnego w kwadracie. Zgodnie z równaniami (7.57) i (7.68)

$$\psi(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \tag{8.27}$$

gdzie

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{8.28}$$

W przypadku stanu związanego, gdy $E < 0$, to $\xi(\mathbf{r}) \equiv 0$, natomiast

$$\xi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

w przypadku rozproszeniowym ($E \geqslant 0$). Ponadto q zdefiniowane jest przez

$$q = |\mathbf{q}| = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

i gdy $E < 0$, to bierzemy q z dodatnią częścią urojoną. W następujących dalej rozważaniach wygodnie będzie uważać q za liczbę zespoloną z dodatnią częścią urojoną. Jądro powyższego równania ma teraz postać

$$k(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}'),$$

a więc

$$\|K\|^2 \leqslant \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' |k(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)|^2 = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' |G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) V(\mathbf{r}')|^2.$$

Używając równ. (8.28) na funkcję $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ i pisząc $q = \mathrm{Re}\, q + i\, \mathrm{Im}\, q$ otrzymujemy

$$\|K\|^2 \leqslant \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{-2\mathrm{Im}\, q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2} |V(\mathbf{r}')|^2.$$

Jeżeli dokonamy zamiany zmiennych kładąc $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{r}'$, to całka daje się łatwo obliczyć. W rezultacie mamy

$$\|K\|^2 \frac{m^2}{2\pi\hbar^4 \mathrm{Im}\, q} \int |V(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \tag{8.29}$$

co jest skończone z wyjątkiem przypadku $\mathrm{Im}\, q = 0$. Ten przypadek odpowiada niestety najbardziej interesującej sytuacji, gdy $E > 0$. Wtedy właśnie jesteśmy w obszarze rozpraszania i chcielibyśmy móc dokonać iteracji równania Schrödingera, przynajmniej w niektórych określonych warunkach.

Powodem, dla którego natykamy się na tę trudność, jest po prostu fakt, że nie potrafiliśmy w należyty sposób uwzględnić fizycznej sytuacji. Jeżeli $E > 0$, jesteśmy w rzeczywistości zainteresowani uzyskaniem amplitudy rozpraszania $f(\theta, \phi)$, jak to było podkreślone w paragrafie 7.4. Używając funkcji falowej $\psi(\mathbf{r})$ z równ. (8.27), mamy

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik_f \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Z wyrażenia tego jest jasne, że potrzebujemy znać $\psi(\mathbf{r})$ tylko w tych obszarach przestrzeni, w których wielkość (siła) potencjału $V(\mathbf{r})$ jest znaczna, tzn. różne obszary trójwymiarowej przestrzeni powinny być uwzględniane z różną wagą określoną przez funkcję $V(\mathbf{r})$. Pamiętając o tym, powyższe wyrażenie na $f(\theta, \phi)$ możemy zapisać w postaci

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (\phi_{\text{swobodne}}, \psi)_Q,$$

gdzie $\phi_{\text{swobodne}} = e^{-ik_f \cdot r}$ i iloczyn skalarny $(,)_\varrho$ brany jest z wagą $V(\mathbf{r})$

$$(f, g)_\varrho \equiv \int f^*(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) d\varrho(\mathbf{r}), \tag{8.30a}$$

gdzie $d\varrho(\mathbf{r})$ jest tu zdefiniowane przez

$$d\varrho(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r}) r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi. \tag{8.30b}$$

Jest jasne, że aby był to iloczyn skalarny w sensie definicji 4.1, to $V(\mathbf{r})$ nie może zmieniać znaku przy zmianie $\mathbf{r}$. Przyjmujemy, że tak jest, natomiast gdy tak nie jest, to niezbędne modyfikacje powinny być oczywiste dla czytelnika. W tej notacji możemy przepisać równ. (8.27) jako

$$\psi(\mathbf{r}) = \xi(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \psi(\mathbf{r}') d\varrho(\mathbf{r}'), \tag{8.31}$$

co chcielibyśmy uważać za równanie całkowe w przestrzeni Hilberta, której iloczyn skalarny dany jest równaniem (8.30a). Będzie to udowodnione, jeżeli $||\xi|| < \infty$, co będzie z kolei miało miejsce, jeżeli

$$\int d\varrho(\mathbf{r}) = \int V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} < \infty,$$

ponieważ $|\xi(\mathbf{r})| = |Ae^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}|$ jest stałe. Dla większości rozsądnych potencjałów $||\xi||$ jest skończone, chociaż dla potencjału kulombowskiego $||\xi||$ jest nieskończone. Mówiąc bardziej ściśle norma $||\xi||$ będzie skończona, jeżeli $V(\mathbf{r})$ zanika dla dużych odległości szybciej niż $1/r^3$ i jest mniej osobliwe w początku układu niż $1/r^3$. Aby (8.31) było akceptowalnym równaniem w przestrzeni Hilberta, norma całkowego operatora z równ. (8.31) musi być skończona. Oznaczając przez K operator całkowy, którego jądrem jest $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$, mamy

$$||K||^2 \leqslant \int d\varrho(\mathbf{r}) \int d\varrho(\mathbf{r}') |G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)|^2 =$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int dr \int dr' V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \frac{e^{-2 \operatorname{Im} q |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}.$$

Dla centralnych potencjałów, które zwykle zdarzają się w praktyce, obliczenie tej całki jest stosunkowo łatwe. Powodem tego jest fakt, że wyrażenie podcałkowe zależy wtedy tylko od $|\mathbf{r}|$ i $|\mathbf{r}'|$ oraz $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, które tworzą boki trójkąta. Całkowanie po kątach określających orientację trójkąta w przestrzeni daje po prostu $8\pi^2$. Podstawiając $s = r+r'$, $t = r-r'$ i $u = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ można łatwo pokazać dla jąder, które zależą tylko od s, t i u, że element objętości $d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'$ redukuje się po prostu do $\pi^2(s^2-t^2)u\,ds\,dt\,du$. Granice całkowania określone są przez nierówności $-u < t < u < s$, wtedy

$$||K||^2 \leqslant \left(\frac{m}{2\hbar^2}\right)^2 \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^u dt (s^2-t^2) \frac{e^{-2u \operatorname{Im} q}}{u} V(r) V(r').$$

Jeżeli $V(r)$ jest na przykład *potencjałem Yukawy*, tzn. $V(r) = g^2 e^{-\mu r}/r$, to ponieważ $s = r+r'$ i $rr' = (s^2-t^2)/4$, więc otrzymujemy

$$||K||^2 \frac{m^2 g^4}{\hbar^4} \int_0^\infty ds e^{-\mu s} \int_0^s \frac{du}{u} e^{-2u \operatorname{Im} q} \int_{-u}^u dt.$$

Wykonując całkowanie otrzymujemy

$$||K|| \leqslant \left[\frac{2}{1+2\mathrm{Im}(q/\mu)}\right]^{1/2} \frac{mg^2}{\mu\hbar^2}. \tag{8.32a}$$

Zatem, gdy $E > 0$ (tzn., gdy $\mathrm{Im}\, q = 0$), to

$$||K|| \leqslant \sqrt{2}\, \frac{mg^2}{\mu\hbar^2}. \tag{8.32b}$$

A więc gdy potencjał jest wystarczająco słaby, tzn. gdy g jest dostatecznie małe, tak aby $||K|| < 1$, to możemy dokonać iteracji równania Schrödingera. Procedura iteracyjna będzie zbieżna w sensie ważonej normy określonej przez równ. (8.30a).

W tym celu aby nie zwodzić czytelnika, należy podkreślić, że chociaż procedura iteracyjna z pewnością będzie zbieżna, to jeżeli $V(\mathbf{r})$ nie jest zbyt silne i niezbyt osobliwe, to jest niemniej rzeczą niezwykle trudną wykonanie całek pojawiających się przy obliczaniu kolejnych członów szeregu. Jeżeli czytelnik ma w tym względzie jakieś wątpliwości, może spróbować obliczyć pierwszy człon iteracyjny równ. (8.27), gdzie $V(\mathbf{r})$ dane jest przez jakiś prosty potencjał taki, jak potencjał Yukawy. Jak zobaczymy, istnieją inne metody rozwiązywania takich równań, często łatwiejsze od metod tu przedstawionych. Jednakże szereg Neumanna jest bardzo ważnym teoretycznym narzędziem, które służy rozwinięciu innych praktycznych metod rozwiązywania równań całkowych.

8.4. METODA ITERACYJNA DLA RÓWNAŃ NIELINIOWYCH

Zanim rozstaniemy się z tematem rozwiązań iteracyjnych równań całkowych, warto jeszcze wskazać na zasadniczą różnicę, jaka występuje między prostotą sytuacji w przypadku równań liniowych a złożonością sytuacji dla równań nieliniowych. Zobaczymy, że moc metody iteracyjnej jest znacznie osłabiona przez nieliniowość, nawet jeśli ograniczyć się do równań analogicznych do równania Volterry omawianego w paragrafie 8.1.

Rozpatrzmy równanie postaci

$$f(x) = g(x) + \int_a^x h(x, y, f(y))\, dy, \quad a \leqslant x \leqslant b. \tag{8.33}$$

Chcielibyśmy rozwinąć procedurę iteracyjną podobną do zastosowanej przy rozwiązywaniu równań liniowych. Jednakże, ponieważ teraz wyrażenie podcałkowe w równaniu (8.33) zależy na ogół w sposób nieliniowy od funkcji $f(y)$, będziemy więc postępowali w sposób następujący. Kładziemy $f_0(x) \equiv g(x)$ i następnie definiujemy wzorem rekurencyjnym ciąg funkcji

$$f_n(x) \equiv g(x) + \int_a^x h(x, y, f_{n-1}(y))\, dy. \tag{8.34}$$

Czytelnik może łatwo sprawdzić, że w przypadku liniowym, tzn. dla $h(x, y, f(y)) = k(x, y)f(y)$, funkcja $f_n(x)$ określona powyżej dana jest wzorem

$$f_n(x) = \sum_{m=0}^{n} K^m g,$$

gdzie K jest dane wzorem (8.5). Pamiętając o tym łatwo zrozumiemy podstawową ideę. Zaczynamy od funkcji $f_0(x) \equiv g(x)$ jako przybliżenia rzędu zerowego dla rozwiązania $f(x)$, a następnie wstawiamy to przybliżenie do prawej strony równania (8.34), co daje nam pierwsze przybliżenie $f_1(x)$. Postępując dalej w ten sposób mamy nadzieję wygenerować ciąg funkcji zbieżny do ścisłego rozwiązania $f(x)$ równania (8.33). Można by oczekiwać, że podobnie jak w przypadku liniowego równania całkowego Volterry, ciąg $f_n(x)$ będzie zawsze zbieżny, o ile tylko $h(x, y, f(y))$ jest funkcją ograniczoną w obszarze $a \leqslant x \leqslant b$, $a \leqslant y \leqslant b$. Musimy jednak pamiętać, że funkcja h zależy jeszcze od trzeciej zmiennej, a mianowicie od samego f. Zrobimy zatem dodatkowe założenie, że dla wartości x, y zawartych w kwadracie $a \leqslant x \leqslant b$, $a \leqslant y \leqslant b$, zachodzi

$$|h(x, y, f(y))| \leqslant M, \tag{8.35}$$

o ile tylko

$$|f(y)-g(y)| \leqslant \Delta, \tag{8.36}$$

gdzie Δ jest pewną dodatnią stałą, a wartość zmiennej $y \in [a, b]$. Założenie to pozwoli nam przynajmniej rozpocząć postępowanie iteracyjne.

Przyjmując $f_0(x) = g(x)$, dostajemy

$$f_1(x) \equiv g(x)+\int_a^x h(x, y, f_0(y))\,dy = g(x)+\int_a^x h(x, y, g(y))\,dy.$$

Z powyższej postaci łatwo wywnioskować, że

$$|f_1(x)-g(x)| = |f_1(x)-f_0(x)| \leqslant M(x-a), \tag{8.37}$$

gdyż $|f_0(y)-g(y)| = 0 < \Delta$. Po to jednak, by móc wykonać następny krok, musimy wiedzieć, że $|f_1(y)-g(y)| \leqslant \Delta$. Z nierówności (8.37) wynika, że tak istotnie będzie, o ile $|y-a| \leqslant 1/M$. Ograniczmy się więc w dalszym ciągu do następującego obszaru zmiennych

$$a \leqslant x \leqslant (1/M)+a, \quad a \leqslant y \leqslant (1/M)+a. \tag{8.38}$$

Oczywiście, jeśli $(1/M)+a \geqslant b$, to warunek powyższy nie jest żadnym ograniczeniem. Teraz możemy obliczyć następne przybliżenie

$$f_2(x) \equiv g(x)+\int_a^x h(x, y, f_1(y))\,dy,$$

a ponieważ $a \leqslant x \leqslant (1/M)+a$, więc mamy $|f_1(x)-g(x)| \leqslant \Delta$ oraz

$$|f_2(x)-g(x)| \leqslant M(x-a) \leqslant \Delta.$$

Nierówność powyższa będzie spełniona dla wszystkich dalszych iteracji. Jednakże naszym głównym celem jest zbadanie, czy podobnie jak w przypadku równania liniowego, kolejne przybliżenia $f_n(x)$ i $f_{n-1}(x)$ stają się bliskie sobie, gdy n nieograniczenie rośnie. Musimy w tym celu obliczyć różnicę między kolejnymi przybliżeniami. Popatrzmy najpierw na $|f_2(x)-f_1(x)|$. Znajdujemy, że

$$|f_2(x)-f_1(x)| = \left|\int_a^x [h(x, y, f_1(y))-h(x, y, f_0(y))]\,dy\right|. \tag{8.39}$$

Dla równania liniowego oszacowanie różnicy w wyrażeniu podcałkowym we wzorze (8.39) jest stosunkowo proste, gdyż

$$h(x, y, f(y)) = k(x, y)f(y).$$

W przypadku nieliniowym musimy niestety nałożyć dalsze ograniczenia na funkcję h w obszarze określonym wzorami (8.38). Opierając się na analogii z równaniem liniowym zażądamy, by istniała taka skończona wartość N, że zachodzi

$$|h(x, y, \phi(y))-h(x, y, \psi(y))| \leqslant N|\phi(y)-\psi(y)|, \tag{8.40}$$

o ile tylko $|\phi(y)-g(y)| \leqslant \Delta$ i $|\psi(y)-g(y)| \leqslant \Delta$. Żądanie powyższe zwane jest *warunkiem Lipschitza*.

Wracając teraz do równania (8.39) widzimy, że ponieważ $|f_1(y)-g(y)| \leqslant \Delta$ oraz $|f_0(y)-g(y)| = 0 < \Delta$, to korzystając z warunku Lipschitza możemy dostać oszacowanie

$$|f_2(x)-f_1(x)| \leqslant N\int_a^x |f_1(y)-f_0(y)|dy.$$

Ale $|f_1(y)-f_0(y)| = |f_1(y)-g(y)| \leqslant \Delta$, więc

$$|f_2(x)-f_1(x)| \leqslant N\Delta(x-a).$$

Podobnie dla następnego przybliżenia otrzymujemy

$$|f_3(x)-f_2(x)| \leqslant \Delta N^2(x-a)^2/2!,$$

ponieważ $|f_2(x)-g(x)| \leqslant \Delta$. W ogólnym przypadku

$$|f_n(x)-g(x)| \leqslant \Delta \tag{8.41}$$

oraz

$$|f_n(x)-f_{n-1}(x)| \leqslant \Delta N^{n-1}(x-a)^{n-1}/(n-1)! \tag{8.42}$$

Ze względu na ograniczenia (8.38) oszacowanie (8.42) można przepisać w postaci

$$|f_n(x)-f_{n-1}(x)| \leqslant \Delta(\Delta N/M)^{n-1}/(n-1)! \tag{8.43}$$

A więc dla wszystkich $x \in [a, (\Delta/M)+a]$, różnica $|f_n(x)-f_{n-1}(x)| \to 0$ jednostajnie przy $n \to \infty$.

Podobnie jak w przypadku liniowym oczekujemy, że $f_n(x)$ powinno dążyć do rozwiązania równania (8.33). Aby się o tym przekonać, zapiszmy $f_\nu(x)$ w postaci

$$f_\nu(x) = f_0(x) + \sum_{n=1}^{\nu} [f_n(x)-f_{n-1}(x)].$$

Zgodnie z wzorem (8.43) każdy człon tej sumy jest ograniczony przez

$$\Delta(\Delta N/M)^{n-1}/(n-1)! \quad \text{dla} \quad x \in [a, (\Delta/M)+a].$$

Tak więc przy ν dążącym do nieskończoności ciąg $f_\nu(x)$ dąży jednostajnie do pewnej funkcji, powiedzmy $f(x)$. Pokażemy teraz, że granica ta, $f(x)$, spełnia równanie (8.33). Piszemy

$$f_\nu(x) = g(x)+\int_a^x h(x, y, f_{\nu-1}(y))dy =$$

$$= g(x)+\int_a^x h(x, y, f(y))dy+\int_a^x [h(x, y, f_{\nu-1}(y))-h(x, y, f(y))]dy.$$

Biorąc granicę obu stron przy $\nu \to \infty$ dostajemy

$$f(x) = g(x)+\int_a^x h(x, y, f(y))dy+\lim_{\nu\to\infty} R_\nu,$$

gdzie

$$R_\nu = \int_a^x [h(x, y, f_{\nu-1}(y)) - h(x, y, f(y))]\,dy.$$

Nierówność (8.41) i wynikający z niej warunek $|f(y)-g(y)| < \Delta$ pozwalają na skorzystanie z warunku Lipschitza. Uwzględniając ponadto oszacowanie (8.43) mamy

$$|R_\nu| \leqslant N \int_a^x |f_{\nu-1}(y) - f(y)|\,dy \leqslant$$

$$\leqslant N\Delta \sum_{n=\nu}^{\infty} \frac{N^{n-1}}{(n-1)!} \int_a^x (y-a)^{n-1}\,dy \leqslant \Delta \sum_{n=\nu}^{\infty} \frac{N^n (x-a)^n}{n!} \leqslant \Delta \sum_{n=\nu}^{\infty} \left(\frac{N\Delta}{M}\right)^n \frac{1}{n!}.$$

Widzimy więc, że $R_\nu \to 0$, gdy $\nu \to \infty$. A zatem

$$f(x) = g(x) + \int_a^x h(x, y, f(y))\,dy,$$

co oznacza, że $f(x)$ jest istotnie poszukiwanym rozwiązaniem równania (8.33).

Doszliśmy więc do iteracyjnego rozwiązania w przedziale, którego długość zależy w ogólności od konkretnych własności funkcji $h(x, y, f(y))$. W przypadku liniowego równania Volterry potrafiliśmy dowieść zbieżności szeregu iteracyjnego dla wszystkich wartości x, widzimy więc, że nieliniowość równania odbija się w bardzo istotny sposób na iteracyjnej metodzie rozwiązywania. Odpowiedni obszar zbieżności zależy od wartości Δ/M, podczas gdy szybkość osiągania rozwiązania jest uzależniona od wielkości stałej N w warunku Lipschitza (8.40).

Jako przykład nieliniowego rachunku zaburzeń rozpatrzmy problem pochodzący z mechaniki klasycznej. Przypuśćmy że cząstka jest uwiązana na sprężynie, która nie jest ściśle harmoniczna. Energia potencjalna tej sprężyny niech będzie dana wzorem.

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{3}ax^3,$$

gdzie a jest niewielką stałą. Równania ruchu są w tym przypadku postaci

$$m\ddot{x} + kx + ax^2 = 0 \quad \text{albo} \quad \ddot{x} + \omega_0^2 x = -\varepsilon x^2,$$

gdzie $\omega_0^2 = k/m$ i $\varepsilon = a/m > 0$.

Zgodnie z równaniem (7.35) dla wartości $\gamma = 0$ funkcja Greena dla operatora $d^2/dt^2 + \omega_0^2$ z jednopunktowym warunkiem brzegowym dana jest wzorem

$$G(t, t') = \frac{1}{\omega_0} \sin[\omega_0(t-t')]\Theta(t-t').$$

Przyjmując, że warunki brzegowe zadane są dla $t = 0$ i mają postać $x(0) = x_0 > 0$ i $\dot{x}(0) = 0$, dostajemy

$$x(t) = x_0 \cos\omega_0 t - \frac{\varepsilon}{\omega_0} \int_0^t \sin\omega_0(t-t')x^2(t')\,dt'.$$

Pamiętając o dotychczasowej dyskusji zbadajmy, przy jakich warunkach można otrzymać rozwiązanie iteracyjne dla funkcji $x(t)$, jeśli zażądamy, by zachodziło

$$|x(t)-x_0\cos\omega_0 t| < x_0. \tag{8.44}$$

W tym szczególnym problemie mamy również

$$h\big(t,t',x(t')\big) = -(\varepsilon/\omega_0)\sin\omega_0(t-t')x^2(t'),$$

a zatem

$$|h\big(t,t',x(t')\big)| \leqslant (\varepsilon/\omega_0)x^2(t'),$$

co można również zapisać jako

$$|h\big(t,t',x(t')\big)| \leqslant (\varepsilon/\omega_0)[x(t')-x_0\cos\omega_0 t'+x_0\cos\omega_0 t']^2 \leqslant$$
$$\leqslant (\varepsilon/\omega_0)[|x(t')-x_0\cos\omega_0 t'|+x_0|\cos\omega_0 t'|]^2.$$

Korzystając z warunku (8.44) otrzymujemy natychmiast

$$|h\big(t,t',x(t')\big)| < 4\varepsilon x_0^2/\omega_0 \tag{8.45}$$

dla wszystkich t i t', o ile tylko $|x(t')-x_0\cos\omega_0 t'| \leqslant x_0$.

Podobnie możemy oszacować różnicę

$$|h\big(t,t',x(t')\big)-h\big(t,t',\xi(t')\big)|,$$

która wchodzi do warunku Lipschitza. Mamy mianowicie

$$|h\big(t,t',x(t')\big)-h\big(t,t',\xi(t')\big)| \leqslant (\varepsilon/\omega_0)|x(t')+\xi(t')||x(t')-\xi(t')|,$$

co można przepisać w postaci

$$|h\big(t,t',x(t')\big)-h\big(t,t',\xi(t')\big)| \leqslant$$
$$\leqslant (\varepsilon/\omega_0)|x(t')-x_0\cos\omega_0 t'+\xi(t')-x_0\cos\omega_0 t'+2x_0\cos\omega_0 t'|\cdot|x(t')-\xi(t')|.$$

Korzystając jeszcze raz z warunku (8.44) mamy

$$|h\big(t,t',x(t')\big)-h\big(t,t',\xi(t')\big)| \leqslant (4\varepsilon x_0/\omega_0)|x(t')-\xi(t')| \tag{8.46}$$

dla wszystkich t i t', o ile tylko $|x(t')-x_0\cos\omega_0 t'| \leqslant x_0$ i $|\xi(t')-x_0\cos\omega_0 t'| \leqslant x_0$. A zatem wielkości Δ, M i N są w naszym przykładzie równe następującym wartościom:

$$\Delta = x_0, \tag{8.47a}$$
$$M = 4\varepsilon x_0^2/\omega_0, \tag{8.47b}$$
$$N = 4\varepsilon x_0/\omega_0. \tag{8.47c}$$

Powyższe oszacowania nie zawierają ograniczeń na t, ale z poprzedniej analizy metody iteracyjnej dla przypadku nieliniowego wiemy, że rozwiązanie iteracyjne jest słuszne jedynie w przedziale $0 \leqslant t \leqslant \Delta/M$, tzn. dla $0 \leqslant \omega_0 t \leqslant 1/(4\delta)$, gdzie $\delta = \varepsilon x_0/\omega_0^2$ jest tym parametrem, względem którego próbujemy rozwinąć $x(t)$. Widzimy więc, że gdy δ jest małe, to rozwinięcie będzie zbieżne dla dużego przedziału czasu.

Dysponując dotychczasowymi wynikami zaczynamy postępowanie iteracyjne kładąc

$$x_0(t) = x_0\cos\omega_0 t. \tag{8.48}$$

Zgodnie z ogólną metodą następne przybliżenie dane jest wzorem

$$x_1(t) = x_0\cos\omega_0 t-(\varepsilon/\omega_0)\int_0^t \sin\omega_0(t-t')x_0^2(t')\,dt'.$$

Korzystając z wyrażenia (8.48) dla $x_0(t')$ dostajemy

$$x_1(t) = x_0\left[\cos\omega_0 t + \delta\left(\frac{1}{6}\cos 2\omega_0 t + \frac{1}{3}\cos\omega_0 t - \frac{1}{2}\right)\right]. \tag{8.49}$$

Zauważmy, że $x_1(t)$ spełnia warunek brzegowy dla $t = 0$.

Główny efekt zaburzenia w pierwszym rzędzie polega na niewielkiej zmianie amplitudy głównego członu $\cos\omega_0 t$ i pojawieniu się drugiej składowej harmonicznej $\cos 2\omega_0 t$ o niewielkiej amplitudzie (oczywiście o ile δ jest małe). Patrząc jedynie na pierwsze przybliżenie $x_1(t)$ nie jest jasne, dlaczego potrzebne jest ograniczenie $0 \leqslant \omega_0 t \leqslant 1/(4\delta)$, gdyż średnia wielkość zaburzenia w pierwszym rzędzie jest niezależna od t. Aby zrozumieć rolę tego ograniczenia, musimy przejść do kolejnego przybliżenia $x_2(t)$. Kilka prostych całkowań prowadzi do wzoru

$$\begin{aligned} x_2(t) = x_0\Bigg[&\cos\omega_0 t + \delta\left(\frac{1}{6}\cos 2\omega_0 t + \frac{1}{3}\cos\omega_0 t - \frac{1}{2}\right) + \\ &+ \delta^2\left(\frac{1}{48}\cos 3\omega_0 t + \frac{1}{9}\cos 2\omega_0 t + \frac{29}{144}\cos\omega_0 t - \frac{1}{3}\right) + \\ &+ \delta^3\left(\frac{1}{1080}\cos 4\omega_0 t + \frac{1}{144}\cos 3\omega_0 t - \frac{1}{27}\cos 2\omega_0 t + \frac{753}{2160}\cos\omega_0 t - \frac{23}{72}\right) + \\ &+ \omega_0 t\left(\frac{5}{12}\delta^2\sin\omega_0 t + \frac{5}{36}\delta^3\sin\omega_0 t\right)\Bigg]. \end{aligned} \tag{8.50}$$

Drugie przybliżenie jest dość podobne w swej ogólnej strukturze do przybliżenia pierwszego z wyjątkiem tego, że w $x_2(t)$ pojawia się człon proporcjonalny do $\omega_0 t$. A zatem dla dużych t zarówno $|x_2(t) - x_1(t)|$ oraz $|x_2(t) - x_0(t)|$ są zdominowane przez człony proporcjonalne do t. Człony te będą ograniczone jedynie wtedy, gdy ograniczymy przedział czasu t.

Należy również zaznaczyć, że chociaż funkcja $x_2(t)$ zawiera człony rzędu δ^3, to jest kompletna jedynie z dokładnością do członów rzędu δ^2, gdyż w następnym przybliżeniu pojawią się dalsze człony $\sim\delta^3$ wraz z członami wyższych rzędów. W ogólności w n-tym przybliżeniu wystąpią człony do rzędu δ^{2n-1} włącznie. Jest również rzeczą interesującą zauważyć, że definiując

$$\omega_1 \equiv \omega_0\left[1 - \frac{5}{6}\delta^2\right]^{1/2} \tag{8.51}$$

i zastępując ω_0 przez ω_1 w członie $\cos\omega_0 t$, możemy z dokładnością rzędu δ^2 zapisać $x_2(t)$ w postaci takiej jak równ. (8.50), ale z pominięciem członów liniowych w t i proporcjonalnych do δ^2. Wynika to z tego, że z dokładnością do δ^2

$$\cos\omega_0 t + \frac{5}{12}\delta^2\omega_0 t\sin\omega_0 t \approx \cos\omega_1 t,$$

gdzie ω_1 dana jest wzorem (8.51). A zatem przez zmianę częstości ω_0 na ω_1 można wyeliminować człony proporcjonalne do t, przynajmniej z dokładnością do δ^2. Podobnie można wykazać, że eliminacja taka jest możliwa (patrz zadanie 8.15) dla wszystkich członów rzędu δ^3.

Nauczyliśmy się już dość dokładnie, jak można rozwiązywać równania liniowe zawierające operatory o małej normie. Jest jednakże jasne, w szczególności na podstawie przykładu omówionego przy końcu paragrafu 8.3, że istnieje wiele interesujących problemów zawierających operatory o skończonej, ale niekoniecznie małej normie. Musimy zatem zająć się ogólniejszymi metodami rozwiązywania.

Można mieć nadzieję, że okaże się możliwe traktować operatory w przestrzeniach nieskończenie wymiarowych w taki sam sposób, jak to robiliśmy z operatorami w przestrzeniach skończenie wymiarowych (rozdz. 3 i 4). W tym ostatnim przypadku zawsze było możliwe — przez obliczenie elementów macierzowych dla wektorów ortonormalnej bazy — sprowadzenie operatora do macierzy kwadratowej o skończonej liczbie wymiarów. Jednakże w przestrzeni nieskończenie wymiarowej każda baza musi składać się z nieskończonej ilości wektorów, podobna procedura musi więc prowadzić do macierzy również nieskończenie wymiarowej, a jak na razie nic o takich obiektach nie wspominaliśmy. Nawet mnożenie dwóch macierzy nieskończenie wymiarowych nie jest sprawą trywialną ze względu na problem zbieżności.

Z drugiej jednak strony wiemy, że jeśli przedstawiamy jakąś funkcję f z przestrzeni Hilberta przy pomocy wektorów ortonormalnej bazy $\{\phi_n\}$ obliczając współczynniki rozwinięcia $a_n = (\phi_n, f)$, to możemy z nieskończonym zbiorem tych współczynników związać nieskończoną kolumnę-wektor i co ważniejsze, kiedy n staje się duże, powiedzmy $n > N$, to wyrazy a_n dla $n > N$ stają się małe (nierówność Bessela). Tak więc każda funkcja w przestrzeni Hilberta może być dowolnie dokładnie aproksymowana przez skończone kombinacje liniowe

$$f \equiv \sum_{n=1}^{N} a_n \phi_n .$$

Fakt ten podtrzymuje naszą nadzieję, że być może podobna sytuacja będzie mieć miejsce i dla operatorów liniowych, mianowicie jeśli zaczniemy obliczać elementy macierzowe jakiegoś operatora A pomiędzy wektorami nieskończonej ortonormalnej bazy, to po obliczeniu dostatecznej liczby tych elementów A_{mn} zaczną one być małe, podobnie jak to było ze składowymi a_n w przypadku wektorów. Możemy więc mieć nadzieję, że można będzie poprzestać na obliczeniu elementów dostatecznie dużej macierzy $N \times N$ i po prostu zapomnieć o elementach A_{nm} dla m lub n większego od N. Wartość N będzie oczywiście zależeć od stopnia dokładności wymaganego w danym konkretnym problemie, ale wyobrażamy sobie również, że metoda ta pozwoli na osiągnięcie dowolnego stopnia dokładności.

Gdyby powyższe przypuszczenia były prawdziwe, to rozwiązanie równania całkowego sprowadziłoby się do prostego problemu diagonalizacji, albo odwrócenia macierzy, co można zrobić przy pomocy metod opisanych w rozdz. 3 i 4. Przekonamy się, że istnieje dość szeroka klasa operatorów, dla których takie podejście jest rzeczywiście możliwe. Celem tego i następnego paragrafu jest dokładniejsze przedstawienie teorii takich operatorów.

Najlepiej jednakże będzie zacząć od pewnych operatorów, które można bez żadnych przybliżeń sprowadzić do zwykłych macierzy. Są to operatory skończonego rzędu, nazy-

wane tak dlatego, że można je bezpośrednio sprowadzić do macierzy o skończonej liczbie wymiarów, a zatem macierzy skończonego rzędu (patrz paragraf 3.10).

W celu zilustrowania tego, co mamy na myśli, rozpatrzmy jądro separowalne, tj. jądro postaci

$$k_s(x, y) = \lambda\phi(x)\psi^*(y), \tag{8.52}$$

gdzie dla prostoty założymy, iż ϕ i ψ są funkcjami z przestrzeni Hilberta. Jeśli

$$\int |k_s(x, y)|^2 dx dy < 1, \tag{8.53}$$

to wiemy już z poprzednich rozważań, że szereg Neumanna będzie w tym wypadku zbieżny. Rozwiązaniem iteracyjnym równania

$$f(x) = g(x) + \int k_s(x, y) f(y) dy \tag{8.54}$$

jest szereg

$$f(x) = g(x) + \int dy_1 k_s(x, y_1) g(y_1) + \int dy_1 \int dy_2 k_s(x, y_1) k_s(y_1, y_2) g(y_2) + \ldots .$$

Ponieważ $k_s(x, y)$ jako funkcja dwóch zmiennych jest całkowalna w kwadracie, to funkcje $\phi(x)$ i $\psi(y)$ muszą być całkowalne w kwadracie jako funkcje jednej zmiennej. Jeśli także funkcja $g(x)$ jest całkowalna w kwadracie, to wszystkie całki w szeregu iteracyjnym są dobrze określone, a zatem

$$f(x) = g(x) + \lambda \int dy_1 \phi(x)\psi^*(y_1) g(y_1) +$$
$$+ \lambda^2 \int dy_1 \int dy_2 \phi(x)\psi^*(y_1)\phi(y_1)\psi^*(y_2) g(y_2) + \ldots .$$

Oznaczmy

$$\int \psi^*(y)\phi(y) dy = (\psi, \phi),$$

funkcję $f(x)$ można zatem zapisać w postaci

$$f(x) = g(x) + \lambda\phi(x)(\psi, g) + \lambda^2\phi(x)(\psi, \phi)(\psi, g) + \lambda^3\phi(x)(\psi, \phi)^2(\psi, g) + \ldots =$$
$$= g(x) + \lambda\phi(x)(\psi, g) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (\psi, \phi)^n. \tag{8.55}$$

Jeśli $|\lambda(\psi, \phi)| < 1$, to szereg w wyrażeniu (8.55) jest zbieżny. Istotnie $|\lambda(\psi, \phi)|$ jest mniejsze od jedności. Aby tego dowieść, zauważmy, że nierówność (8.53) implikuje

$$|\lambda|^2 \int |\phi(x)|^2 dx \int |\psi(y)|^2 dy < 1. \tag{8.56}$$

Ze względu na nierówność Schwartza mamy

$$|(\psi, \phi)| \leqslant [(\phi, \phi)(\psi, \psi)]^{1/2},$$

zatem na mocy (8.56)

$$|\lambda(\psi, \phi)| \leqslant [|\lambda|^2(\phi, \phi)(\psi, \psi)]^{1/2} < 1$$

i szereg geometryczny z równania (8.55) może być bezpośrednio zsumowany:

$$f(x) = g(x) + \lambda \frac{(\psi, g)}{1 - \lambda(\psi, \phi)} \phi(x). \tag{8.57}$$

Chociaż do wyniku tego doszliśmy poprzez szereg Neumanna, to jego skończona prosta postać sugeruje, że wzór (8.57) może być słuszny w ogólniejszym przypadku. Że tak istotnie jest, możemy się przekonać przepisując równanie (8.54) w postaci

$$f(x) = g(x)+\lambda \int \phi(x)\psi^*(y)f(y)dy = g(x)+\lambda\phi(x)(\psi, f). \tag{8.58}$$

Biorąc iloczyn skalarny obu stron z funkcją ψ dostajemy

$$(\psi, f) = (\psi, g)+\lambda(\psi, \phi)(\psi, f), \tag{8.59}$$

a zatem

$$(\psi, f) = \frac{(\psi, g)}{1-\lambda(\psi, \phi)} \tag{8.60}$$

i ostatecznie

$$f(x) = g(x)+\lambda \frac{(\psi, g)}{1-\lambda(\psi, \phi)}\phi(x) \tag{8.61}$$

dla wszystkich wartości λ, z wyjątkiem $\lambda = 1/(\psi, \phi)$. Tak więc trudności pojawiają się dla wartości λ leżącej na brzegu obszaru zbieżności szeregu Neumanna. Przyczynę tego najłatwiej dostrzec w szczególnym przypadku, $g(x) = 0$. Równanie nasze w tym przypadku upraszcza się

$$f(x) = \int k_s(x, y)f(y)dy = \lambda\phi(x)(\psi, f) \tag{8.62}$$

i sprowadza się do zagadnienia własnego zwyczajnego typu. Równanie (8.62) implikuje równanie

$$(\psi, f) = \lambda(\psi, \phi)(\psi, f),$$

które ma niezerowe rozwiązanie na (ψ, f) wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\lambda = 1/(\psi, \phi),$$

a wtedy (ψ, f) może być równe dowolnej stałej. Rozpatrywane zagadnienie własne ma więc rozwiązanie

$$f(x) = A\phi(x),$$

gdzie A dowolne. Na to, by ustalić wartość stałej A, potrzebny jest warunek normalizacyjny, dokładnie tak jak to miało miejsce w przypadku skończenie wymiarowym. Interesujące, że warunek na istnienie rozwiązania własnego jest identyczny z warunkiem, przy którym, jak widzieliśmy, rozwiązanie równania niejednorodnego w postaci (8.61) traci sens. Ale ten wynik jest nam już znany z teorii skończenie wymiarowej, gdzie jak pamiętamy, jeśli równanie jednorodne ma rozwiązanie, to na to, by równanie niejednorodne miało rozwiązanie, człon niejednorodny musi spełniać specjalny warunek. Z równania (8.61) widzimy natychmiast, że w naszym przypadku warunkiem na istnienie rozwiązania równania niejednorodnego jest $(\psi, g) = 0$, bo tylko dzięki temu może być skompensowane zero mianownika. Jeśli jednak ten warunek jest spełniony, to z równania (8.59) widzimy, że (ψ, f) jest dowolne, a rozwiązanie równania (8.54) dane wzorem (8.58) przybiera postać

$$f(x) = g(x)+B\phi(x),$$

gdzie B jest dowolną stałą. Podstawiając ten wynik do równania (8.54) możemy przekonać się, że istotnie równanie będzie spełnione dla każdego B, o ile tylko $\lambda(\psi, \phi) = 1$, tzn. kiedy $\phi(x)$ jest wektorem własnym operatora K_s, którego jądrem jest $k_s(x, y)$. Wniosek ten brzmi bardzo podobnie do twierdzenia 4.27 z teorii równań skończenie wymiarowych; podo-

bieństwo to będzie zupełne, jeśli zauważymy, że warunek $(\psi, g) = 0$ oznacza, że g jest ortogonalne do rozwiązania równania

$$K_s^{\dagger}\psi = \lambda^* \int k_s(y, x)\psi(y)dy = \psi,$$

gdy $\lambda = 1/(\psi, \phi)$.

Odkryliśmy zatem ścisły związek pomiędzy prostym nieskończenie wymiarowym przykładem i przypadkiem skończenie wymiarowym. Jeszcze ciekawsza jednak jest obserwacja, że rozbieżność szeregu Neumanna jest związana z istnieniem rozwiązań równania jednorodnego.

Ponieważ jądra separowalne prowadzą do równań całkowych posiadających niezwykle proste rozwiązania dające się zapisać w zwartej postaci, przeto fizycy naturalnie próbowali wykorzystać je w praktycznych problemach. Jednym z przykładów użyteczności jąder separowalnych jest zastosowanie ich do opisu sił jądrowych. Od wielu lat fizycy starają się określić postać potencjału oddziaływania nukleon–nukleon. W trakcie tych poszukiwań przekonano się, że trzeba odrzucić praktycznie wszystkie uświęcone klasyczne wyobrażenia o tym, jaki powinien być potencjał. Jak wspominaliśmy już w rozdz. 1, trzeba było odrzucić warunek, że potencjał jest centralny, trzeba było również dopuścić zależność potencjału od spinów nukleonów. W tej sytuacji było dość naturalne oczekiwanie, że w końcu trzeba będzie zwątpić nawet w lokalność potencjału.

Potencjał nazywamy *lokalnym*, jeśli jego działanie w jakimś punkcie zależy jedynie od tego, co dzieje się w tym samym punkcie. Równanie Schrödingera pisze się tradycyjnie zwykle w postaci zawierającej potencjał lokalny

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{8.63}$$

Nie można jednakże wykluczyć *a priori* sytuacji, w której potencjał byłby w mechanice kwantowej operatorem działającym w sposób *nielokalny*. Możemy sobie, na przykład wyobrazić, że równanie Schrödingera powinno być postaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \int U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = E\psi(\mathbf{r}). \tag{8.64}$$

Jak widzimy z powyższego równania, wynik działania operatora potencjału na ψ nie jest zależny wyłącznie od wartości ψ w jednym punkcie $\mathbf{r}$, jak to miało miejsce w równaniu (8.63), lecz od całki po pewnym obszarze z funkcji ψ z wagą określoną przez funkcję potencjału $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Zauważmy, że na to, by operator Hamiltona występujący w równaniu (8.64) był hermitowski, powinien być spełniony warunek

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(\mathbf{r}', \mathbf{r})^*. \tag{8.65}$$

Do równania (8.64) można stosować bezpośrednio metodę funkcji Greena wyłożoną w rozdz. 7. Postępując w sposób opisany w paragrafie 7.4 stwierdzamy, że funkcja $\psi(\mathbf{r})$ musi być rozwiązaniem następującego równania całkowego

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{q}_i\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\int \frac{e^{-iq_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}'')d\mathbf{r}'d\mathbf{r}'', \tag{8.66}$$

gdzie $\mathbf{q}_i$, m, $\hbar$ i A oznaczają dokładnie to samo co w paragrafie 7.4. Zwróćmy uwagę na podobieństwo tego równania do równania (7.68). Jak wspominaliśmy w paragrafie 7.4, jedną z najbardziej interesujących wielkości fizycznych jest amplituda rozpraszania $f^s(\mathbf{q}_f)$,

zdefiniowana przez amplitudę wychodzącej fali rozproszonej. Postępując podobnie jak w paragrafie 7.4 można łatwo wykazać, że

$$f^s(\mathbf{q}_f) = f(\mathbf{q}_f), \tag{8.67a}$$

gdzie f spełnia równanie całkowe

$$f(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\hat{U}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_i) - \frac{2m}{\hbar^2}\int \hat{U}(\mathbf{k}, \mathbf{q})\frac{1}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}f(\mathbf{q})\,d\mathbf{q}, \tag{8.67b}$$

a $\hat{U}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ jest transformatą Fouriera funkcji $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, tzn.

$$\hat{U}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\,d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'.$$

Wektor $\mathbf{q}_i$ w równaniach (8.67a) i (8.67b) przedstawia kierunek cząstki padającej, a $\mathbf{q}_f$ kierunek cząstki rozproszonej. Wartości bezwzględne tych wektorów są sobie równe i dane wzorem

$$|\mathbf{q}_i| = |\mathbf{q}_f| = \left[\frac{2mE}{\hbar^2}\right]^{1/2}.$$

Wszystkie interesujące wielkości fizyczne opisujące rozpraszanie są już określone, jeśli znamy $f(\mathbf{k})$. Dla zupełnie dowolnej postaci funkcji $\hat{U}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ niewiele możemy powiedzieć o rozwiązaniu równania (8.67b), ale jeśli przyjmiemy U w postaci separowalnej, tzn.

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -g^2 v(\mathbf{r})v(\mathbf{r}'), \tag{8.68}$$

to wtedy możemy uczynić dalszy postęp. Po to, by U było hermitowskie, $v(\mathbf{r})$ w powyższym wzorze musi być funkcją rzeczywistą. Korzystając z postaci (8.68) funkcji U i oznaczając transformatę Fouriera funkcji $v(\mathbf{r})$ symbolem $\hat{v}(\mathbf{k})$, możemy sprowadzić równanie (8.67b) do postaci

$$f(\mathbf{k}) = \frac{4\pi^2 m g^2}{\hbar^2}\hat{v}(\mathbf{q}_i)v(\mathbf{k}) + \frac{2mg^2}{\hbar^2}\int \hat{v}(\mathbf{k})\frac{\hat{v}(\mathbf{q})}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}f(\mathbf{q})\,d\mathbf{q}$$

lub

$$f(\mathbf{k}) = \pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{k}) + \frac{\tau}{2\pi}\int \hat{v}(\mathbf{k})\frac{\hat{v}(\mathbf{q})}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}f(\mathbf{q})\,d\mathbf{q}, \tag{8.69}$$

gdzie położyliśmy $4\pi m g^2/\hbar^2 \equiv \tau$. Jeśli dokonamy następujących identyfikacji

$$x \to \mathbf{k}, \quad y \to \mathbf{q}, \quad g(x) \to \pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{k}), \quad \phi(x) \to \hat{v}(\mathbf{k}),$$
$$\psi^*(y) \to \frac{\hat{v}(\mathbf{q})}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}$$

i położymy jeszcze $\lambda = \tau/2\pi$, to zauważymy, że równania (8.69) i (8.54) są dokładnie tej samej postaci. Jedyna różnica polega na tym, że teraz mamy całkę trójwymiarową, ale i równanie (8.54) nie musi być traktowane dosłownie — można sobie wyobrażać, że symbole x i y są niekoniecznie wektorami jednowymiarowymi, a dy jednowymiarową objętością. Korzystając z wzoru (8.61) możemy natychmiast podać rozwiązanie równania (8.69). Stwierdzamy, że

$$f(\mathbf{k}) = \pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{k}) + \lambda\frac{\int \frac{\hat{v}(\mathbf{q})}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}[\pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{q})]\,d\mathbf{q}}{1-\lambda\int \frac{\hat{v}(\mathbf{q})}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}\hat{v}(\mathbf{q})\,d\mathbf{q}}\hat{v}(\mathbf{k}),$$

co można również zapisać jako

$$f(\mathbf{k}) = \pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{k})[1+\lambda I/(1-\lambda I)] = \pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{k})/(1-\lambda I),$$

gdzie oznaczyliśmy

$$I \equiv \int \frac{\hat{v}(\mathbf{q})\hat{v}(\mathbf{q})}{q^2-(q_i+i\varepsilon)^2}\, d\mathbf{q}.$$

Zgodnie z definicją $f^s(\mathbf{q}_f)$, widzimy że

$$f^s(\mathbf{q}_f) = \frac{\pi\tau\hat{v}(\mathbf{q}_i)\hat{v}(\mathbf{q}_f)}{1-\tau I/2\pi}. \tag{8.70}$$

Tak więc dla dowolnej zadanej funkcji $v(\mathbf{r})$ lub $\hat{v}(\mathbf{q})$ problem jest rozwiązany. Najbardziej naturalne jest spróbować podstawić za $v(\mathbf{r})$ prosty potencjał Yukawy $v(\mathbf{r}) = e^{-\mu r}/r$, z odpowiadającą mu transformatą Fouriera daną wzorem (7.58'):

$$\hat{v}(\mathbf{q}) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{q^2+\mu^2}. \tag{8.71}$$

Ponieważ funkcja ta zależy jedynie od q^2, to widzimy że $f^s(\mathbf{q}_f)$ będzie zależeć jedynie od wartości bezwzględnej $\mathbf{q}_f$ i $\mathbf{q}_i$. A zatem możemy rozpatrywać amplitudę f^s, jako funkcję jedynie energii E, niezależną od kąta rozpraszania. Przy takim wyborze $\hat{v}(\mathbf{q})$ całka I może być łatwo obliczona metodą całek konturowych w płaszczyźnie zespolonej (patrz rozdz. 6). Wtedy otrzymujemy

$$I = -\frac{2\pi}{\mu}\frac{1}{(q_i+i\mu)^2}, \tag{8.72}$$

gdzie po wykonaniu całkowania przeszliśmy do granicy $\varepsilon \to 0$. Wstawiając (8.71) i (8.72) do wzoru (8.70) dostajemy

$$f^s(E) = \frac{2\tau}{(q_i^2+\mu^2)^2+\frac{\tau}{\mu}(q_i-i\mu)^2}. \tag{8.73}$$

Jeśli zdefiniujemy

$$a_0 \equiv \frac{2}{\mu}\left(1-\frac{\mu^3}{\tau}\right)^{-1} \quad \text{oraz} \quad r_0 \equiv \frac{1}{\mu}\left(1+\frac{2\mu^3}{\tau}\right),$$

to możemy również napisać

$$f^s(E) = \left[-\frac{1}{a_0}+\frac{1}{2}r_0 q_i^2+\frac{1}{2\tau}q_i^4-iq_i\right]^{-1}. \tag{8.74}$$

Widzimy jeszcze raz, że f^s nie zależy od kątów, to znaczy amplituda ta opisuje rozpraszanie tylko w fali s ($l = 0$).

Można dowieść, że dla dowolnego dostatecznie regularnego krótkozasięgowego potencjału lokalnego amplituda rozpraszania w fali s wyraża się w granicy małych energii (tzn. małych $\mathbf{q}_i$) wzorem

$$f^s = \left[-\frac{1}{a_0}+\frac{1}{2}r_0 q_i^2+\ \ldots\ -iq_i\right]^{-1},$$

gdzie wielkości a_0 i r_0 mogą być obliczone dla konkretnego kształtu potencjału lokalnego. (Patrz na przykład Blatt i Weisskopf — *Theoretical Nuclear Physics*.) Postać ta znana jest pod nazwą przybliżenia zasięgu efektywnego; a_0 i r_0 nazywają się odpowiednio długością rozpraszania i zasięgiem efektywnym. Widzimy więc, że można dobrać taki potencjał nielokalny, który przede wszystkim pozwala na wykonanie rachunków w skończonej postaci, a ponadto daje amplitudę wyglądającą dokładnie tak samo jak niskoenergetyczna amplituda pochodząca od potencjału lokalnego. Jako zadanie dla czytelnika pozostawiamy sprawdzenie, że powyższy potencjał prowadzi również do stanów związanych, tj. ujemnych wartości własnych równania Schrödingera, o ile tylko stała g jest dostatecznie duża.

Ze względu na możliwość opisu stanu związanego deuteronu, jak również ze względu na postać otrzymywanej amplitudy rozpraszania typu zasięgu efektywnego, potencjał separowalny postaci (8.68) i jego uogólnienie uwzględniające zależność od spinu był często stosowany do analizy niskoenergetycznych własności układu nukleon–nukleon. W ostatnich latach potencjały tego typu były stosowane również do badań układów trójciałowych. Prosta postać potencjału separowalnego pozwala na uzyskanie względnie przejrzystych wyrażeń na trójciałowe amplitudy rozpraszania i funkcje falowe stanów związanych.

8.6. JĄDRA SKOŃCZONEGO RZĘDU

Kiedy już przekonaliśmy się, że jądra separowalne prowadzą do zwartej postaci rozwiązań równań całkowych, nie jest trudno dokonać uogólnienia na jądra skończonego rzędu. Jedyną komplikacją będzie to, że zamiast prostego równania skalarnego, do którego sprowadza się równanie wyjściowe w przestrzeni wektorowej, dostaniemy teraz skończony układ równań skalarnych. Równania te będzie można przedstawić w postaci skończenie wymiarowego równania macierzowego — z tego też powodu rozważane jądra noszą nazwę jąder skończonego rzędu (patrz paragraf 3.10).

Definiujemy jako jądro skończonego rzędu, każde jądro dające się przedstawić w postaci

$$K_F f \equiv \sum_{n=1}^{N} \phi_n(\psi_n, f), \tag{8.75}$$

gdzie f jest dowolnym wektorem w przestrzeni Banacha B, w której określone jest działanie operatora K_F. Iloczyn wewnętrzny występujący w powyższej definicji nie musi być iloczynem skalarnym właściwym dla przestrzeni Hilberta; wymagamy jedynie, by (ψ_n, f) był funkcjonałem liniowym przyporządkowującym każdej funkcji $f \in B$ liczbę oznaczoną symbolicznie jako (ψ_n, f). Zbiór wszystkich funkcjonałów liniowych na przestrzeni Banacha B jest znów przestrzenią Banacha nazywaną często *przestrzenią dualną* do B. W przypadku przestrzeni Hilberta ta przestrzeń funkcjonałów liniowych jest izomorficzna z wyjściową przestrzenią Hilberta. Dla przestrzeni L_p, przestrzeń Banacha funkcjonałów liniowych jest izomorficzna z przestrzenią L_q, gdzie $1/p+1/q = 1$.

Można łatwo dowieść (patrz zadanie 8.21), że jeśli $f \in L_p$ i $g \in L_q$, gdzie $1/p+1/q = 1$, to istnieje całka

$$(g, f) = \int g^* f dx.$$

Równanie (8.75) będziemy interpretowali w sensie powyższej relacji. Można oczywiście równanie (8.75) interpretować jako równanie w przestrzeni Hilberta, wtedy (,) oznacza po prostu iloczyn skalarny w tej przestrzeni. Taka interpretacja nie jest jednak konieczna — wyniki, które uzyskamy, będą słuszne w ogólniejszym przypadku.

Przekonaliśmy się już, że twierdzenie 4.27 z teorii skończenie wymiarowych stosuje się do jąder separowalnych, teraz chcemy przekonać się, czy stosuje się ono również w ogólniejszym przypadku jąder skończonego rzędu. Zaczniemy od rozpatrzenia transformacji sprzężonej $K_F^\dagger$ zdefiniowanej w następujący sposób:

$$K_F^\dagger \tilde{f} = \sum_{n=1}^{N} \psi_n(\phi_n, \tilde{f}). \tag{8.76}$$

W świetle naszej poprzedniej dyskusji przestrzeni Banacha jest jasne, że jeśli K_F działa w przestrzeni L_p transformując $f \in L_p$ w $K_F f \in L_p$, to $K_F^\dagger$ działa w przestrzeni L_q $(1/p+1/q = 1)$ i transformuje $\tilde{f} \in L_q$ w $K_F^\dagger \tilde{f} \in L_q$. W tym miejscu chcemy zauważyć, że pozornie ogólniejsza postać K_F, a mianowicie

$$K_F' f \equiv \sum_{m,n=1}^{N} k_{mn} \phi_m(\psi_n, f),$$

gdzie k_{mn} jest zbiorem stałych i jest już uwzględniona w naszej definicji (8.75), gdyż nie zakładamy o funkcjach ϕ_m i ψ_n żadnego szczególnego sposobu normalizacji, a liczba N określająca ilość składników sumy jest całkowicie dowolna.

Rozpatrzmy teraz, w duchu twierdzenia 4.27, dwa równania

$$f - \lambda K f = g \tag{8.77}$$

i

$$\tilde{h} - \lambda^* K^\dagger \tilde{h} = 0, \tag{8.78}$$

gdzie f i g są wektorami z przestrzeni B, a $\tilde{h}$ jest wektorem z przestrzeni dualnej do B. Korzystając z definicji (8.75) i (8.76) dostajemy

$$f = g + \lambda \sum_{n=1}^{N} \phi_n(\psi_n, f) \tag{8.79}$$

i

$$\tilde{h} - \lambda^* \sum_{n=1}^{N} \psi_n(\phi_n, \tilde{h}) = 0. \tag{8.80}$$

Z równania (8.79) widzimy, że do wyznaczenia rozwiązania f wystarczy jedynie określić zbiór stałych

$$a_n \equiv (\psi_n, f).$$

Korzystając z równania (8.79) znajdujemy, że

$$(\psi_m, f) = (\psi_m, g) + \lambda \sum_{n=1}^{N} (\psi_m, \phi_n)(\psi_n, f).$$

Wprowadzając oznaczenia

$$\alpha_{mn} \equiv (\psi_m, \phi_n), \qquad b_m \equiv (\psi_m, g) \tag{8.81}$$

możemy to równanie zapisać w postaci

$$a_m - \lambda \sum_{n=1}^{N} \alpha_{mn} a_n = b_m.$$

Wygodnie jest również użyć notacji macierzowej

$$(I - \lambda A)a = b, \tag{8.82}$$

gdzie

$$[A]_{mn} = \alpha_{mn}, \quad [a]_n = a_n, \quad [b]_n = b_n.$$

Podobnie jeśli oznaczymy $\tilde{a}_n = (\phi_n, \tilde{h})$, to jednorodne równanie sprzężone można zapisać jako

$$\tilde{a}_m - \lambda^* \sum_{n=1}^{N} (\phi_m, \psi_n)\tilde{a}_n = 0,$$

które zgodnie z (8.81) można również przepisać w postaci

$$\tilde{a}_m - \lambda^* \sum_{n=1}^{N} \alpha_{nm}^* \tilde{a}_n = 0.$$

W notacji macierzowej równanie to zapisujemy tak:

$$(I - \lambda A)^\dagger \tilde{a} = 0, \tag{8.83}$$

gdzie $[\tilde{a}]_n = \tilde{a}_n$. A zatem nasze podstawowe równania (8.77) i (8.78) zostały sprowadzone do równań macierzowych (8.82) i (8.83).

Ale równania (8.82) i (8.83) mają dokładnie taką postać, jakiej wymaga twierdzenie 4.27. Dochodzimy zatem do wniosku, że równanie (8.82) ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy

$$(b, \tilde{a}) = 0 = \sum_{n=1}^{N} b_n^* \tilde{a}_n \tag{8.84}$$

dla wszystkich rozwiązań $\tilde{a}$ sprzężonego równania jednorodnego. Podobnie, równanie (8.87) ma rozwiązania wtedy i tylko wtedy, gdy spełniony jest warunek (8.84). Korzystając z definicji b_n i $\tilde{a}_n$ możemy ten warunek zapisać w postaci

$$\sum_{n=1}^{N} (g, \psi_n)(\phi_n, \tilde{h}) = 0$$

lub też zgodnie z definicją $K^\dagger$ [wzór (8.76)] w postaci

$$(g, K^\dagger \tilde{h}) = 0.$$

Jeżeli $\tilde{h} \not\equiv 0$, to na mocy równania (8.78) mamy $\lambda^* K^\dagger \tilde{h} = \tilde{h}$, a zatem rozwiązanie równania (8.77) będzie istnieć, jeśli zażądamy, by

$$(g, \tilde{h}) = 0 \tag{8.85}$$

dla wszystkich $\tilde{h}$ spełniających równanie (8.78). Zauważmy, że jeśli równanie (8.83) nie ma rozwiązań nietrywialnych, to wtedy istnieje $[I - \lambda A]^{-1}$ i równanie (8.82) ma rozwiązanie jednoznaczne. A więc jeśli równanie (8.78) nie ma rozwiązań, to wtedy istnieje dokładnie jedno rozwiązanie równania (8.77). Dochodzimy w ten sposób do następującego wyniku:

Twierdzenie 8.1. Jeśli K_F jest transformacją liniową skończonego rzędu, to równanie

$$f = g + \lambda K_F f$$

ma rozwiązania wtedy i tylko wtedy, gdy $(g, \tilde{h}_i) = 0$ dla wszystkich i, gdzie $\tilde{h}_i$ spełnia jednorodne równanie sprzężone

$$\lambda^* K_F^\dagger \tilde{h}_i = \tilde{h}_i.$$

Jeśli równanie jednorodne nie ma rozwiązań, to rozwiązanie równania niejednorodnego jest jednoznaczne.

W ten sam sposób możemy dowieść analogicznego twierdzenia dla operatora $K_F^\dagger$.

Wniosek. Jeśli $K_F^\dagger$ jest liniowym operatorem skończonego rzędu, to równanie

$$\tilde{f} = g + \lambda^* K_F^\dagger \tilde{f}$$

ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy $(\tilde{g}, h_i) = 0$ dla wszystkich i, gdzie h_i jest rozwiązaniem równania jednorodnego

$$\lambda K_F h_i = h_i.$$

Jeśli równanie jednorodne nie ma rozwiązań, to rozwiązanie niejednorodnego równania sprzężonego jest jednoznaczne.

Wniosek następny jest natychmiastową konsekwencją skończenie wymiarowego twierdzenia 4.26.

Wniosek. Równania

$$\lambda K_F h_i = h_i \quad \text{i} \quad \lambda^* K_F^\dagger \tilde{h}_i = \tilde{h}_i$$

mają taką samą liczbę liniowo niezależnych rozwiązań.

Twierdzenie 8.1 i dwa wnioski, jakie z niego wypływają, nazywa się często *alternatywą Fredholma* („alternatywa" ze względu na dwie wykluczające się możliwości — albo równanie liniowo niejednorodne $(I - \lambda K)f = g$ ma rozwiązanie jednoznaczne, albo sprzężone równanie jednorodne ma co najmniej jedno rozwiązanie). Stanowią one rozszerzenie twierdzeń z paragrafu 4.8 na przypadek przestrzeni nieskończenie wymiarowej, ale jedynie dla operatorów dość szczególnej postaci. Przekonamy się jednak w następnym rozdziale, że wyniki te można rozszerzyć na znacznie szerszą klasę operatorów.

Zanim dokonamy tego uogólnienia, zauważmy jeszcze, że jeśli równanie (8.77) ma jednoznaczne rozwiązanie, to wtedy możemy wyznaczyć je w jawnej postaci korzystając z wzoru (8.79) i równania (8.82). Z tego ostatniego mamy mianowicie

$$a = (I - \lambda A)^{-1} b$$

lub po rozpisaniu na składowe

$$a_n \equiv (\psi_n, f) \equiv \sum_{m=1}^{N} [(I - \lambda A)^{-1}]_{nm} b_m = \sum_{m=1}^{N} [(I - \lambda A)^{-1}]_{nm} (\psi_m, g).$$

Podstawiając ten wynik do wzoru (8.79) otrzymujemy

$$f = g + \lambda \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \phi_n [(I - \lambda A)^{-1}]_{nm} (\psi_m, g), \tag{8.86}$$

co jest szukanym rozwiązaniem, o ile równanie

$$\lambda^* K_F^\dagger \tilde{h} = \tilde{h}$$

lub równoważne mu równanie

$$(I-\lambda A)^\dagger \tilde{a} = 0$$

nie ma rozwiązań. Cały więc problem rozwiązania równania (8.77) sprowadza się do obliczenia macierzy odwrotnej do danej, skończenie wymiarowej macierzy. Na równanie (8.86) można również spojrzeć jako na definicję nowego operatora G_{K_F} będącego odwrotnością operatora $(I-\lambda K_F)$. Zgodnie z wzorem (8.86) piszemy

$$G_{K_F} \equiv I+\lambda R_{K_F} = (I-\lambda K_F)^{-1}, \tag{8.87}$$

gdzie

$$R_{K_F} f \equiv \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} [(I-\lambda A)^{-1}]_{mn}\phi_m(\varphi_n, f). \tag{8.88}$$

Operator R_{K_F} nazywa się *rezolwentą* operatora K_F. Oczywiście w rozpatrywanym przypadku rezolwenta jest też operatorem skończonego rzędu. Istnieje ona zawsze wtedy, gdy istnieje macierz $(I-\lambda A)^{-1}$, tzn. wtedy, gdy

$$\det(I-\lambda A) \neq 0.$$

Ponieważ wyznacznik $\det(I-\lambda A)$ jest wielomianem stopnia N, to ma on dokładnie N (niekoniecznie różnych) pierwiastków — wynika stąd, że rezolwenta R_{K_F} jest *meromorficzną funkcją* zmiennej λ, tzn. jest ona analityczna wszędzie z wyjątkiem skończonej liczby biegunów. W biegunach tych R_{K_F} przestaje istnieć, a wraz z tym równanie

$$\lambda K_F h = h$$

lub równoważne mu równanie

$$\lambda^* K_F^\dagger \tilde{h} = \tilde{h}$$

mają nietrywialne rozwiązania.

Warto spróbować sprawdzić, że rzeczywiście zachodzi

$$(I-\lambda K_F)(I+\lambda R_{K_F}) = (I+\lambda R_{K_F})(I-\lambda K_F) = I.$$

Jako przykład jądra skończonego rzędu rozpatrzmy równanie

$$f(x) = x+\lambda\int_0^\pi \frac{\sin(x+x')}{\pi} f(x')dx' = x+\lambda\frac{\sin x}{\sqrt{\pi}}\int_0^\pi \frac{\cos x'}{\sqrt{\pi}} f(x')dx' + \\ +\lambda\frac{\cos x}{\sqrt{\pi}}\int_0^\pi \frac{\sin x'}{\sqrt{\pi}} f(x')dx'. \tag{8.89}$$

Oznaczając

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\pi \cos x' f(x')dx', \qquad a_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\pi \sin x' f(x')dx'$$

oraz

$$b_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\pi x\cos x\,dx, \qquad b_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\pi x\sin x\,dx$$

możemy równanie (8.89) sprowadzić do poniższych równań

$$a_1 = b_1 + \lambda \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos^2 x\,dx\,a_2, \qquad a_2 = b_2 + \lambda \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \sin^2 x\,dx\,a_1.$$

W zapisie macierzowym będzie to miało postać

$$a = b + \lambda M a, \quad \text{czyli} \quad (I - \lambda M)a = b,$$

gdzie

$$M = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \qquad a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \begin{bmatrix} -2 \\ \pi \end{bmatrix},$$

a macierz odwrotna $(I - \lambda M)^{-1}$ jest postaci

$$\begin{bmatrix} 1 & -\lambda/2 \\ -\lambda/2 & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{1 - \lambda^2/4} \begin{bmatrix} 1 & \lambda/2 \\ \lambda/2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Stąd

$$a = (I - \lambda M)^{-1} b = \frac{1}{1 - \lambda^2/4} \begin{bmatrix} 1 & \lambda/2 \\ \lambda/2 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \begin{bmatrix} -2 \\ \pi \end{bmatrix},$$

czyli

$$a_1 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi\lambda - 4}{4 - \lambda^2}, \qquad a_2 = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi - \lambda}{4 - \lambda^2}.$$

Ostatecznie więc

$$f(x) = x + 2\lambda \frac{(\lambda - 4/\pi)}{4 - \lambda^2} \sin x + 4\lambda \frac{(1 - \lambda/\pi)}{4 - \lambda^2} \cos x. \tag{8.90}$$

Oczywiście, kiedy $\lambda = \pm 2$, rozwiązanie to dąży do nieskończoności, co odpowiada istnieniu przy tych wartościach λ rozwiązań równania jednorodnego.

Szereg Neumanna dla $f(x)$ jest następujący:

$$f(x) = x + \frac{\lambda}{\pi} \int_0^{\pi} dx' \sin(x + x')x' + \frac{\lambda^2}{\pi^2} \int_0^{\pi} dx' \int_0^{\pi} dx'' \sin(x + x') \sin(x' + x'')x'' + \ldots.$$

Zgodnie z ustalonymi poprzednio przez nas kryteriami szereg ten jest na pewno zbieżny, gdy spełniony jest warunek

$$\frac{|\lambda|}{\pi} \left[\int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \sin^2(x + x')\,dx\,dx' \right]^{1/2} < 1.$$

Wykonując całkowania stwierdzamy, że warunek powyższy sprowadza się do nierówności $\lambda < \sqrt{2}$. A oto explicite kilka pierwszych członów szeregu Neumanna

$$f(x) = x + \lambda[\cos x - (2/\pi)\sin x] + \lambda^2[(1/2)\sin x - (1/\pi)\cos x] + \ldots. \tag{8.91}$$

Powyższe rozwinięcie jest identyczne z rozwinięciem ścisłego wyrażenia (8.90) względem potęg λ. Ostatni szereg jest jednak na pewno zbieżny dla $\lambda < 2$. Widzimy więc, że oszacowanie normy operatora całkowego przez całkę z kwadratu jądra tegoż operatora pozwala nam na wyznaczenie tylko dolnej granicy na promień zbieżności szeregu Neumanna. W rzeczywistości, nawet gdybyśmy znali ściśle normę operatora, to żądanie $||K|| < 1$ zapewnia,

że szereg Neumanna będzie zbieżny, ale nie oznacza to, że przy $||K|| > 1$ będzie on na pewno rozbieżny.

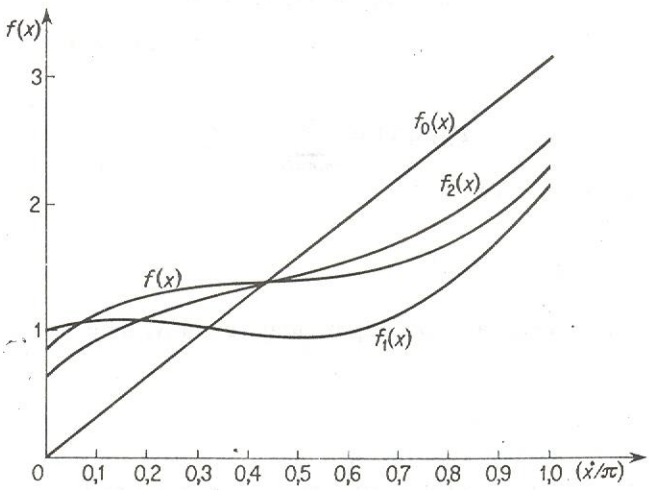
Dla wartości $\lambda = \pm 2$ wektorami własnymi równania

$$f(x) = \lambda \int_0^{\pi} \frac{\sin(x+x')}{\pi} f(x')\,dx'$$

są odpowiednio funkcje $f_+(x) = A_+(\sin x + \cos x)$ i $f_-(x) = A_-(\sin x - \cos x)$. Po unormowaniu do jedności mamy

$$f_+(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(x+\frac{\pi}{4}\right), \quad f_-(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(x-\frac{\pi}{4}\right).$$

Zauważmy, że rozwiązania te są ortogonalne, co być powinno, gdyż $k(x, y) = (1/\pi)\sin(x+y)$ jest rzeczywistym symetrycznym jądrem.



Rys. 8.1 Ścisłe rozwiązanie $f(x)$ równania (8.79) w zestawieniu z pierwszymi trzema przybliżeniami iteracyjnymi szeregu Neumanna: $f_0(x)$, $f_1(x)$, $f_2(x)$.

Na rysunku 8.1 przedstawione jest dla wartości $\lambda = 1$ ścisłe rozwiązanie, wraz z kolejnymi przybliżeniami iteracyjnymi:

$$f_0(x) = x,$$
$$f_1(x) = x + \lambda[\cos x - (2/\pi)\sin x],$$
$$f_2(x) = x + \lambda[\cos x - (2/\pi)\sin x] + \lambda^2[(1/2)\sin x - (1/\pi)\cos x].$$

Widzimy, że $f_2(x)$ jest bardzo dobrym przybliżeniem ścisłego rozwiązania, mimo że dla $\lambda = 1$ jest $||K_F|| \approx \frac{1}{2}$

8.7. OPERATORY ZWARTE

Mimo że jądra skończonego rzędu omawiane dotychczas prowadzą do równań, które można rozwiązać do końca w jawnej postaci, to jednak bardzo rzadko równania takie znajdują bezpośrednie zastosowanie w problemach fizycznych. Równania całkowe pojawiające

się w fizyce (np. całkowe równanie Schrödingera i jego uogólnienie relatywistystyczne) mają zazwyczaj jądra $k(x, y)$, w których zależności od x i y nie można sprowadzić do postaci skończonej sumy (8.75).

Dlaczego wobec tego tak wiele czasu poświęcilismy badaniu transformacji skończonego rzędu? Wyjaśnieniem tego jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 8.2. Każda liniowa transformacja przestrzeni Hilberta, której jądro jest ciągłe i całkowalne w kwadracie jako funkcja dwóch zmiennych, może być dowolnie dokładnie przybliżona w sensie normy przez transformację liniową skończonego rzędu.

Dowód. Z najprostszym przypadkiem mamy do czynienia wtedy, gdy funkcje w przestrzeni Hilberta określone są na odcinku skończonym. Dwuwymiarowe twierdzenie Weierstrassa mówi, że w tym wypadku $k(x, y)$ może być jednostajnie aproksymowane przez wielomian, innymi słowy, dla każdego δ istnieje wielomian $P_N(x, y)$ z N zależnym od δ taki, że zachodzi

$$|k(x, y) - P_N(x, y)| < \delta$$

dla wszystkich x i y. Zauważmy, że jądro w postaci wielomianu jest zarazem jądrem skończonego rzędu, gdyż

$$P_N(x, y) = \sum_{m,n=0}^{N} C_{mn} x^m y^n$$

dla wszystkich x, y. Mamy więc

$$\int_a^b dx \int_a^b dy |k(x, y) - P_N(x, y)| \leqslant [\delta(b-a)]^2.$$

Możemy więc znaleźć zawsze takie δ i odpowiadające mu N, by było

$$||K - K_N|| < \varepsilon$$

dla dowolnego, zadanego z góry ε, gdzie K_N oznacza transformację, której jądrem jest $P_N(x, y)$. Jeśli przestrzeń Hilberta jest przestrzenią funkcji określonych na odcinku nieskończonym, to wystarczy jedynie obciąć jądro, przyjmując że jest ono zawsze równe zeru dla wszystkich x i y leżących na zewnątrz pewnego zbioru B o skończonej powierzchni. Nazwijmy to jądro k_B, a odpowiadającą mu transformację K_B; oznaczając przez $C(B)$ dopełnienie obszaru B w płaszczyźnie xy możemy napisać

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy |k(x, y) - k_B(x, y)|^2 = \int_{C(B)} dx \int dy |k(x, y)|^2.$$

Ale z założenia $k(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie, można więc wybrać tak obszar B, by na zewnątrz niego całka z $|k(x, y)|^2$ była dowolnie mała. Wybieramy więc B takie, aby

$$||K - K_B|| < \varepsilon/2.$$

Na podstawie poprzednich rozważań wiemy, że możemy wybrać takie jądro o postaci wielomianu $k_N(x, y)$, by dla odpowiadającej mu liniowej transformacji K_N było

$$||K_B - K_N|| < \varepsilon/2.$$

Ostatecznie mamy

$$||K - K_N|| \leqslant ||K - K_B|| + ||K_B - K_N|| < \varepsilon$$

dla odpowiednio wybranego N, a to jest właśnie rezultat, do którego zmierzaliśmy.

Łatwo osłabić założenia rozpatrywanego twierdzenia dopuszczając jądra kawałkami ciągłe. Można również rozszerzyć to twierdzenie na przypadek jąder całkowalnych w kwadracie nie ograniczonych poza tym innymi warunkami ciągłości i ograniczoności prócz tych, które wynikają z warunku całkowalności. Jedyną trudnością w tym ogólnym przypadku jest fakt, że jądro może w niektórych punktach stawać się nieskończone. Na przykład w przestrzeni $L_2[0, 1]$ liniowy operator o jądrze

$$k(x, y) = 1/\sqrt{x+y} \tag{8.92}$$

jest dopuszczalnym operatorem, ponieważ $k(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie. Jednakże w punkcie $x = 0$, $y = 0$ jądro staje się nieskończone. Trudność tę łatwo przezwyciężyć. W tym wypadku obcinamy jądro, kładąc je równe zeru, w tym obszarze, w którym $|k(x, y)| \geqslant L$, gdzie L jest liczbą, którą możemy wybrać jako dowolnie wielką. Obcięte jądro $k_L(x, y)$ może być przybliżone przez wielomian zgodnie z twierdzeniem 8.2. Ponieważ jednak $k(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie, to musi istnieć takie L odpowiednio duże, by błąd popełniony zastąpieniem $k(x, y)$ przez $k_L(x, y)$, tzn. wielkość

$$I_L = \int dx \int dy |k(x, y) - k_L(x, y)|^2$$

była tak mała, jak tylko chcemy. Wielkość I_L możemy przedstawić w postaci

$$I_L = \iint\limits_{\mathscr{D}_L} |k(x, y)|^2 dx dy,$$

gdzie $\mathscr{D}_L$ jest zbiorem punktów, dla których $|k(x, y)| \geqslant L$. Jasne jest, że musi istnieć takie L, by powierzchnia obszaru $\mathscr{D}_L$ była tak mała, jak tylko chcemy (w przeciwnym wypadku $k(x, y)$ nie byłoby całkowalne w kwadracie). Jasne jest również, że I_L musi być skończone dla dowolnego $\mathscr{D}_L$, gdyż inaczej $k(x, y)$ znów nie byłoby całkowalne w kwadracie. Pozostaje jeszcze do rozpatrzenia możliwość, że chociaż pole powierzchni obszaru $\mathscr{D}_L$ jest tak małe, jak tylko chcemy, to jednak całka z $|k(x, y)|^2$ po tym dowolnie małym obszarze pozostaje skończona. Można istotnie wyobrazić sobie obiekty, które są osobliwe w taki właśnie sposób, że całka po dowolnie małym obszarze pozostaje skończona; funkcja δ ma na przykład tę własność. Jednakże w teorii całki Lebesgue'a (a również Riemanna) obiekty takie są wykluczone z klasy dopuszczalnych funkcji, a zatem wyrzucamy je również z przestrzeni wektorowej funkcji całkowalnych w kwadracie. Jądro (8.92) podane przykładowo, mimo że jest osobliwe w początku układu, posiada jednak tę własność, że całka z $|k(x, y)|^2$ po dowolnie małym obszarze zawierającym początek układu dąży do zera, gdy pole tego obszaru dąży do zera. A zatem twierdzenie 8.2 może być rozszerzone na przestrzeń funkcji całkowalnych w kwadracie.

Ze względu na praktyczną ważność jąder całkowalnych w kwadracie (patrz na przykład paragraf 8.3) twierdzenie powyższe jest niezwykle ważne. W rozdziale 9 wiele uwagi poświęcimy dokładnemu zbadaniu jego konsekwencji. Mimo to, często wygodniej jest posługiwać się bardziej subtelną własnością operatorów całkowalnych w kwadracie (równoważną, jak się okazuje, możliwości aproksymacji przez operatory skończonego rzędu). Chodzi nam tu o pojęcie zwartości operatora.

Definicja 8.8. Operator liniowy w przestrzeni metrycznej nazywa się operatorem zwartym, jeśli przekształca on dowolny ograniczony ciąg wektorów (tzn. normy wszystkich wektorów ciągu są mniejsze od ustalonej liczby) w ciąg zawierający podciąg zbieżny w sensie normy.

Pojęcie zwartości jest mocniejsze od pojęcia ciągłości. Transformacja ciągła (tzn. ograniczona) zachowuje zbieżność ciągów, tzn. jeśli ciąg $\{f_n\}$ jest zbieżny, to ciąg $\{Kf_n\}$ jest też zbieżny, o ile K jest ciągłe. Operator zwarty zmusza ciąg do zbieżności, nawet jeśli początkowo nie był on zbieżny. Żeby zrozumieć istotę zwartości, należy sobie uświadomić, że mogą istnieć ciągi ograniczone nie posiadające podciągu zbieżnego. Ciągi takie mogą istnieć w przestrzeni nieskończenie wymiarowej, gdyż w przestrzeni o skończonej liczbie wymiarów nie jest to możliwe na mocy twierdzenia Bolzano–Weierstrassa*). Można również powiedzieć, że w przestrzeni n-wymiarowej każdy operator ciągły jest operatorem zwartym.

Wprowadźmy teraz niektóre proste własności odwzorowania zwartego. Oczywiste jest, że suma skończonej liczby odwzorowań zwartych jest odwzorowaniem zwartym. Można również dowieść, że iloczyn odwzorowania zwartego i odwzorowania ograniczonego jest odwzorowaniem zwartym. Przypuśćmy bowiem, że K jest odwzorowaniem zwartym, a B ograniczonym. Rozpatrzmy działanie KB na ciąg $\{f_n\}$, gdzie $||f_n|| < C$ dla wszystkich n. Operator K działa na ciąg $\{Bf_n\}$, który jest ciągiem ograniczonym, ponieważ B jest operatorem ograniczonym. Ponieważ K jest zwarty, przeto musi istnieć podciąg ciągu $\{KBf_n\}$, który jest zbieżny w sensie normy do granicy, a więc KB jest operatorem zwartym. Rozpatrzmy teraz operator BK działający na $\{f_n\}$. Ponieważ K jest zwarty, więc $\{Kf_n\}$ posiada podciąg zbieżny w sensie normy. Ponieważ operator B jest ograniczony, więc jest ciągły, a więc $\{BKf_n\}$ posiada podciąg zbieżny odpowiadający podciągowi zbieżnemu ciągu $\{Kf_n\}$.

Pokażemy teraz, że rzeczywiście istnieją odwzorowania zwarte. Weźmy w tym celu przestrzeń funkcji całkowalnych w kwadracie i weźmy odwzorowanie separowalne K_s z jądrem

$$k_s(x, y) = \phi(x)\psi^*(y)$$

oraz dowolny ciąg $\{f_n\}$, gdy $||f_n|| < C$ dla wszystkich n. Rozważmy ciąg

$$K_s f_n = \phi(x)(\psi, f_n).$$

Ponieważ $|(\psi, f_n)| \leqslant ||\psi|| \cdot ||f_n||$, więc ciąg liczb zespolonych (ψ, f_n) jest na płaszczyźnie zespolonej ograniczony, a zatem posiada podciąg zbieżny (twierdzenie Bolzano–Weierstrassa). Oznaczmy granicę takiego podciągu literą l i rozpatrzmy

$$||K_s f_{n_k} - l\phi|| = ||\phi[(\psi, f_{n_k}) - l]|| \leqslant ||\phi|| \cdot |(\psi, f_{n_k}) - l|,$$

gdzie $n_k (k = 1, 2, 3, \ldots)$ wybiera podciąg zbieżny. Ponieważ $|(\psi, f_{n_k}) - l|$ dąży do zera przy wzroście n_k, przeto mamy

$$K_s f_{n_k} \to l\phi$$

w sensie zbieżności według normy, a zatem K_s jest odwzorowaniem zwartym. Również każdy operator skończonego rzędu jako skończona suma operatorów separowalnych jest operatorem zwartym.

Istnieje oczywiście mnóstwo operatorów, które nie są zwarte. Rozważmy na przykład operator $D_x = -id/dx$ działający w przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie określonych na odcinku $[0, 1]$. Wiemy, że ciąg $\{f_n = e^{inx}\}$ jest ciągiem ograniczonym, ale

*) Dla naszych celów twierdzenie Bolzano–Weierstrassa można sformułować następująco: z każdego ograniczonego ciągu punktów w n wymiarowej przestrzeni euklidesowej można wybrać podciąg zbieżny.

$\{Df_n = ne^{inx}\}$ nie zawiera żadnego podciągu zbieżnego. W istocie nawet tak prosty operator jak operator jednostkowy (odwzorowanie tożsamościowe) nie jest zwarty.

Szczególnie interesującą cechą operatorów zwartych jest to, że granica dowolnego ciągu operatorów zwartych jest znów operatorem zwartym.

Twierdzenie 8.3. Jeśli $||K_i - K|| \to 0$ przy $i \to \infty$ oraz K_i jest odwzorowaniem zwartym dla każdego i, to K jest również odwzorowaniem zwartym.

Dowód. Niech $\{f_n\}$ będzie dowolnym ograniczonym ciągiem funkcji. Możemy zatem wybrać podciąg $f_{n_1}^{(1)}$ taki, że $\{K_1 f_{n_1}^{(1)}\}$ jest zbieżny w sensie normy, ponieważ K_1 jest zwarty. Rozpatrzmy teraz ograniczony ciąg $\{f_{n_1}^{(1)}\}$. Możemy z niego wybrać podciąg $\{f_{n_2}^{(2)}\}$ taki, że $\{K_2 f_{n_2}^{(2)}\}$ jest zbieżny w sensie normy. Proces ten możemy przedłużać nieograniczenie otrzymując w końcu ciąg $\{\phi_m\}$ taki, że $\{K_i \phi_m\}$ jest zbieżny w sensie normy dla wszystkich K_i. Rozpatrzmy teraz

$$K\phi_n - K\phi_m = K\phi_n - K_i\phi_n + K_i\phi_n - K_i\phi_m + K_i\phi_m - K\phi_m.$$

Z nierówności trójkąta możemy napisać, że

$$||K\phi_n - K\phi_m|| \leqslant ||K\phi_n - K_i\phi_n|| + ||K_i\phi_n - K_i\phi_m|| + ||K_i\phi_m - K\phi_m|| \leqslant$$
$$\leqslant ||K - K_i|| \cdot ||\phi_n|| + ||K_i\phi_n - K_i\phi_m|| + ||K - K_i|| \cdot ||\phi_m||.$$

Ponieważ ϕ_n jest ciągiem ograniczonym, więc

$$||K\phi_n - K\phi_m|| \leqslant C||K - K_i|| + ||K_i\phi_n - K_i\phi_m||.$$

Ponieważ $||K - K_i|| \to 0$, możemy więc wybrać dostatecznie duże i, dla którego

$$||K - K_i|| < \varepsilon/2C.$$

Dla $m, n > N$ drugi człon po prawej stronie w poprzedniej nierówności może być oszacowany przez $\varepsilon/2$, a zatem dla $m, n > N$ mamy

$$||K\phi_n - K\phi_m|| < \varepsilon.$$

Oznacza to, że ciąg $\{K\phi_n\}$ jest zbieżny, co należało udowodnić.

Jak wspomnieliśmy, każde odwzorowanie z jądrem całkowalnym w kwadracie można dowolnie aproksymować w sensie normy przez odwzorowanie skończonego rzędu. Wynika stąd, że odwzorowania takie są zwarte. Twierdzenie to leży u podstaw faktu, że operatory rzutowe P_n zdefiniowane w paragrafie 8.2 nie są zbieżne w sensie normy do operatora jednostkowego I. Gdyby były zbieżne, to ponieważ P_n jest operatorem skończonego rzędu, a zatem zwarty, więc z twierdzenia 8.3 wynikałoby, że operator jednostkowy jest zwarty, co nie jest prawdą.

Pokazaliśmy, że dowolny operator, który może być w sensie normy aproksymowany przez operatory skończonego rzędu, jest zwarty. Chcemy teraz pokazać, że twierdzenie odwrotne jest również prawdziwe, to znaczy że każdy operator zwarty może być przybliżany dowolnie dokładnie w sensie normy przez ciąg operatorów skończonego rzędu. Dowód jest znacznie prostszy, gdy istnieje ortonormalna baza w przestrzeni, dlatego ograniczymy się do dowodu tego twierdzenia jedynie w przestrzeni Hilberta.

Wzorując się na metodach z rozdz. 5 wyobraźmy sobie, że mamy do czynienia z operatorem całkowym, którego jądro jest $k(x, y)$. Niech $\{\phi_n\}$ będzie ortonormalną bazą w L_2. Piszemy

$$k(x, y) = \sum_{n,m=1}^{\infty} (\phi_n \phi_m^*, k)\phi_n(x)\phi_m^*(y)$$

w sensie zbieżności średniej. Do wypisania powyższego wzoru potrzebny nam był fakt, że zbiór wszystkich iloczynów $\phi_n(x)\phi_m(y)$ [albo $\phi_n(x)\phi_m^*(y)$] tworzy zupełną ortonormalną bazę w przestrzeni funkcji dwóch zmiennych całkowalnych w kwadracie, do których należy $k(x, y)$; urywając powyższą sumę przy pewnym, dostatecznie dużym N, dostajemy jądro skończonego rzędu

$$k_N(x, y) = \sum_{n,m=1}^{N} (\phi_n\phi_m^*, k)\phi_n(x)\phi_m^*(y).$$

Opierając się na analogii z szeregami Fouriera, można mieć nadzieję, że powyższa skończona suma będzie aproksymować $k(x, y)$ dowolnie dokładnie w sensie normy, o ile tylko N będzie odpowiednio duże. Odpowiadające jądru $k_N(x, y)$ odwzorowanie K_N jest zdefiniowane następująco:

$$K_N f = \sum_{n,m=1}^{N} \phi_n(x)(\phi_n\phi_m^*, k)(\phi_m, f). \tag{8.93}$$

Możemy to krócej zapisać w postaci (patrz zadanie 8.26)

$$K_N = P_N K P_N,$$

gdzie P_N jest operatorem rzutowym zdefiniowanym wzorem

$$P_N f \equiv \sum_{n=1}^{N} (\phi_n, f)\phi_n. \tag{8.94}$$

Na podstawie powyższej dyskusji możemy końcowe twierdzenie tego rozdziału sformułować w całej ogólności

Twierdzenie 8.4. Niech $\{\phi_n\}$ będzie bazą*) ortonormalną w przestrzeni Hilberta H, a K niech będzie operatorem zwartym w tej przestrzeni. Przez P_N oznaczamy operator rzutowy rzutujący na podprzestrzeń przestrzeni H rozpiętą przez $\{\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N\}$. Operator $K_N \equiv P_N K P_N$ dąży w sensie normy do operatora K, jeśli N dąży do nieskończoności.

Dowód. Rozpatrzmy

$$K-K_N = K-P_N K P_N = K-P_N K+P_N K-P_N K P_N = (I-P_N)K+P_N K(I-P_N). \tag{8.95}$$

Gdyby było prawdą, że P_N dąży do I w sensie normy, to nierówność trójkąta zastosowana do równania (8.95) zakończyłaby natychmiast dowód, który musiałby w takim wypadku być słuszny dla dowolnego operatora ograniczonego. Jednakże przekonaliśmy się niedawno, że P_N nie dąży do I w sensie normy. Nie mogąc oprzeć się na nierówności trójkąta udowodnimy nasze twierdzenie przez sprowadzenie do niedorzeczności. Jeśli bowiem twierdzenie nie byłoby słuszne, to musiałaby istnieć pewna liczba rzeczywista a, taka że dla każdego n powinien istnieć wektor f_N spełniający

$$||(K-K_n)f_n|| > a||f_n||, \tag{8.96}$$

gdzie $a > 0$ i nie zależy od n. Gdyby takiej liczby nie można było znaleźć, to znaczyłoby to zgodnie z definicją 8.7, że K_N dąży do K w sensie normy. Dzieląc teraz obie strony nierówności

*) Zakładamy tu istnienie przeliczalnej bazy w H. Przestrzeń Hilberta o tej własności nazywa się separowalną przestrzenią Hilberta; większość, ale nie wszystkie przestrzenie spotykane w zastosowaniach fizycznych są tego typu. Dowód twierdzenia 8.4 może być rozszerzony i na przestrzenie nieseparowalne.

(8.96) przez $||f_n||$ możemy powiedzieć, że jeśli twierdzenie nie jest prawdziwe, to istnieje ciąg funkcji $\{f_n: ||f_n|| = 1\}$, dla którego

$$||(K-K_n)f_n|| > a \tag{8.97}$$

dla wszystkich n. Zakładając że K jest operatorem zwartym pokażemy, że nierówność (8.97) nie może być prawdziwa, a zatem że twierdzenie 8.4 jest spełnione. Warto podkreślić, że nie wystarczy pokazać w tym celu, że dla każdego ustalonego $f \in H$ norma $||(K-K_n)f|| \to 0$. Ten wynik również łatwo wynika z (8.95) przez zastosowanie nierówności trójkąta.

Zaczniemy dowód od skorzystania z tego, że $||P_N|| < 1$, i z nierówności trójkąta zastosowanych do równania (8.95) dostajemy

$$\begin{aligned} ||(K-K_N)f_N|| &\leqslant ||(I-P_N)Kf_N|| + ||P_N K(I-P_N)f_N|| \leqslant \\ &\leqslant ||(I-P_N)Kf_N|| + ||K(I-P_N)f_N||. \end{aligned} \tag{8.98}$$

Musimy teraz pokazać, że zarówno $||(I-P_N)Kf_N||$, jak i $||K(I-P_N)f_N||$ stają się małe ze wzrostem N. W tym miejscu decydującą rolę zaczyna odgrywać zwartość K. Pozwala ona wybrać z ciągu $\{f_N\}$ podciąg $\{\tilde{g}_n\}$ taki, że $\{K\tilde{g}_n\}$ dąży do granicy, powiedzmy $\xi \in H$. Rozpatrzmy również ciąg $\{(I-P_n)\tilde{g}_n\}$, który jest ograniczony, ponieważ $||I-P_n|| = 1$ i $||\tilde{g}_n|| = 1$. Ponieważ K jest zwarte, możemy wybrać podciąg $\{(I-P_m)g_m\}$ taki, że $\{K(I-P_m)g_m\}$ dąży do granicy, powiedzmy $\eta \in H$. Zauważmy, że $\{Kg_m\}$ będzie dążyć do ξ, ponieważ $\{K\tilde{g}_n\}$ dąży do ξ, a $\{g_m\}$ jest podciągiem ciągu $\{\tilde{g}_n\}$. Żeby nie komplikować notacji kolejne podciągi ciągu f_N oznaczamy nowymi literami g_n i $\tilde{g}_m$, ale pamiętajmy o tym fakcie w trakcie dowodu.

Główny punkt dowodu jest już poza nami, pozostało jeszcze parę oszacowań wielkości $||(I-P_m)Kg_m||$ i $||K(I-P_m)g_m||$. Rozpatrzmy najpierw $||(I-P_m)Kg_m||$. Piszemy

$$(I-P_m)Kg_m \equiv (I-P_m)(Kg_m-\xi)+(I-P_m)\xi,$$

gdzie ξ jest ustalonym wektorem. Korzystając z nierówności trójkąta i tego, że $||I-P_m|| = 1$, mamy

$$||(I-P_m)Kg_m|| \leqslant ||(I-P_m)(Kg_m-\xi)|| + ||(I-P_m)\xi|| \leqslant ||Kg_m-\xi|| + ||\xi-P_m\xi||.$$

Ale na mocy konstrukcji Kg_m dąży w sensie normy do ξ, a ponieważ ξ jest ustalone, więc i $P_m\xi$ dąży do ξ w tym samym sensie, a zatem

$$||(I-P_m)Kg_m|| \to 0. \tag{8.99}$$

Zajmijmy się na koniec oszacowaniem $||K(I-P_m)g_m||$. Na mocy konstrukcji przy $m \to \infty$, $K(I-P_m)g_m$ dąży w sensie normy do η. Pokażemy, że $||\eta|| = 0$. Rozpatrzmy

$$||\eta||^2 = (\eta, \eta) = \lim_{m\to\infty} (\eta, K(I-P_m)g_m) = \lim_{m\to\infty} ((I-P_m)K^\dagger\eta, g_m),$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że P_m jest samosprzężony (w drugiej równości powyższego wzoru; patrz zadanie 8.21a). Ale dzięki nierówności Schwartza mamy

$$|((I-P_m)K^\dagger\eta, g_m)| \leqslant ||(I-P_m)K^\dagger\eta||\,||g_m||$$

i korzystając z faktu, że $||g_m|| = 1$, dostajemy

$$||\eta||^2 \leqslant \lim_{m\to\infty} ||(I-P_m)K^\dagger\eta||.$$

Ponieważ $K^\dagger\eta$ jest ustalonym wektorem, przeto $||(I-P_m)K^\dagger\eta|| \to 0$ dla $m \to \infty$, a więc $||\eta|| = 0$. Wektor η jest więc wektorem zerowym, a ponieważ $K(I-P_m)g_m$ dąży do η w sensie normy, możemy napisać

$$||K(I-P_m)g_m|| \to 0 \tag{8.100}$$

przy $m \to \infty$. Podstawiając wyniki zawarte we wzorach (8.99) i (8.100) do nierówności (8.98) widzimy, że

$$||(K-K_m)g_m|| \to 0$$

przy $m \to \infty$. Ale g_m jest podciągiem początkowego ciągu f_N, dla którego założyliśmy $||(K-K_N)f_N|| > a$. Nierówność powyższa z liczbą a ściśle dodatnią jest zatem słuszna i dla ciągu g_m. Stanowi to wraz z rezultatem $||(K-K_m)g_m|| \to 0$ żądaną sprzeczność. Twierdzenie nasze jest więc udowodnione.

Twierdzenie 8.4 sugeruje bardzo atrakcyjną metodę rozwiązywania równań z operatorami zwartymi. Dzielimy taki operator na „małą" część plus operator skończonego rzędu. Rozwiązując zwyczajną techniką macierzową równanie z operatorem skończonego rzędu mamy punkt wyjścia do szybkobieżnej procedury iteracyjnej z pozostałym operatorem. W praktyce wiele problemów w zastosowaniach fizycznych i technicznych rozwiązywać trzeba tą właśnie metodą, gdyż występujące operatory nie są ani tak „małe", by było prawdziwe proste przybliżenie Borna, ani też nie należą do klasy operatorów skończonego rzędu. Głównym problemem, który pozostaje, jest więc rozwinięcie praktycznej metody, w której byłyby połączone te dwa procesy, tj. iteracja i przybliżenie skończonego rzędu. Temu celowi jest poświęcony głównie rozdział 9.

ZADANIA

1. Udowodnić, że przestrzeń C funkcji ciągłych na $[a, b]$ z normą zdefiniowaną jako

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

dla $f \in C$ jest przestrzenią Banacha, tzn. wykazać, że jest ona zupełna ze względu na powyższą normę.

2. *Nierówność Höldera*

a) Wykazać, że funkcja $f(z) = z^\alpha - \alpha z - \beta$ przyjmuje wartość maksymalną w punkcie $z = 1$, jeśli $\alpha < 1$, oraz że ta wartość maksymalna równa się zeru, jeśli $\beta = 1-\alpha$, a zatem $z^\alpha \leqslant \alpha z + \beta$, jeśli $\alpha < 1$ i $\beta = 1-\alpha$.

b) Stosując zamianę zmiennych $z = x/y$ wykazać, że $x^\alpha y^\beta \leqslant \alpha x + \beta y$, gdzie jak poprzednio $\alpha \leqslant 1$ i $\beta = 1-\alpha$.

c) Przypuśćmy teraz, że $|f(x)|^p$ i $|g(x)|^q$ są funkcjami całkowalnymi i $1/p+1/q = 1$. Korzystając z wyników punktu (b) udowodnić, że

$$|fg| \leqslant \frac{1}{p}|f|^p + \frac{1}{q}|g|^q,$$

a więc funkcja $|fg|$ jest również całkowalna.

d) Wykazać, że jeśli $|f(x)|^p$ i $|g(x)|^q$ są całkowalne, to

$$\left|\int f(x)g(x)\,dx\right| \leqslant \left[\int |f(x)|^p dx\right]^{1/p}\left[\int |g(x)|^q dx\right]^{1/q}.$$

Wskazówka: Zastosować wynik punktu (c) do funkcji

$$F(x) = f(x)/[\int |f(x)|^p dx]^{1/p} \qquad G(x) = g(x)/[\int |g(x)|^q dx]^{1/q}.$$

Wynik ten jest uogólnieniem nierówności Schwartza dla przestrzeni Hilberta i nazywa się nierównością Höldera.

3. *Nierówność Minkowskiego*

a) Wykazać, że $|f(x)+g(x)|^p \leqslant 2^p[|f(x)|^p+|g(x)|^p]$ i jeśli f i g należą do L_p (przestrzeni p — całkowalnych funkcji), to i $f+g$ należy do L_p. Oznacza to, że L_p jest istotnie przestrzenią wektorową.

b) Wykazać, że dla $p > 1$

$$\int |f(x)+g(x)|^p dx \leqslant \int |f(x)||f(x)+g(x)|^{p-1} dx + \int |g(x)||f(x)+g(x)|^{p-1} dx$$

i że $|f+g|^{p-1}$ należy do L_q, jeśli f i g należy do L_p, gdzie $1/p+1/q = 1$.

c) Stosując nierówność Höldera (patrz zadanie 8.2) do każdej z dwóch całek po prawej stronie nierówności w punkcie (b) wykazać, że

$$\left[\int |f(x)+g(x)|^p dx\right]^{1/p} \leqslant \left[\int |f(x)|^p dx\right]^{1/p} + \left[\int |g(x)|^p dx\right]^{1/p}.$$

Jest to nierówność Minkowskiego. Widzimy że $[\int |f(x)|^p dx]^{1/p}$ definiuje rzeczywiście normę w przestrzeni L_p; nierówność Minkowskiego jest po prostu sformułowaniem nierówności trójkąta, która jest niezbędnym składnikiem definicji normy.

4. Rozwiązać równania

a) $f(x) = 1+\lambda \int_0^\infty e^{-(x+y)} f(y) dy$,

b) $f(x) = 1+\lambda \int_0^x f(y) dy$

przy pomocy iteracji. Dla jakich wartości λ szereg iteracyjny jest zbieżny?

5. Mnożąc obie strony równania (8.27) przez $V^{1/2}(\mathbf{r})$ [zakładamy, że $V(\mathbf{r})$ jest ściśle dodatnie] wykazać, że

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}) = \tilde{\xi}(\mathbf{r}) + \int \tilde{k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)\tilde{\psi}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}',$$

gdzie zdefiniowaliśmy

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}) = V^{1/2}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \quad \tilde{\xi}(\mathbf{r}) = V^{1/2}(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r})$$

i

$$\tilde{k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = V^{1/2}(\mathbf{r})G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)V^{1/2}(\mathbf{r}').$$

Oznaczając operator całkowy, którego jądrem jest funkcja $\tilde{k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$, symbolem $\tilde{K}$ wykazać, że norma operatora $\tilde{K}$ jest taka sama jak norma jądra z równania (8.27) otrzymana metodą funkcji wagowej. Wykazać również, że jeśli iterujemy równanie dla funkcji $\tilde{\psi}(\mathbf{r})$, to wyrażenie $V^{1/2}(\mathbf{r})$ nigdy faktycznie się w rachunkach nie pojawi — dostaniemy zwyczajny szereg Borna dla $\psi(\mathbf{r})$ z dodatkowym czynnikiem multiplikatywnym $V^{1/2}(\mathbf{r})$.

6. Oszacować normę jądra równania Lippmanna–Schwingera dla przypadku $V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-\mu r}$. Dla jakich wartości V_0 szereg Borna będzie zbieżny według tego oszacowania?

7. a) Przypuśćmy, że mamy opisany funkcją δ przyciągający potencjał w jednym wymiarze $V(x) = -V_0\delta(x)$. Korzystając z wyników zadania 7.10 wykazać, że potencjał ten wytwarza dokładnie jeden stan związany, niezależnie od tego, jak wielka byłaby wartość V_0. Wyznacz energię wiązania i funkcję falową dla tego stanu.

b) Przypuśćmy, że cząstka o dodatniej energii E pada na potencjał $V(x) = V_0\delta(x)$ w jednym wymiarze. Jaki ułamek cząstek zostanie przepuszczony, a jaki odbity od tego potencjału?

8. a) Mamy potencjał $V(x)$ w jednym wymiarze, który znika na zewnątrz przedziału $[-a/2, a/2]$. Funkcję falową w przedziale $[-\infty, -a/2]$ oznaczamy przez $\psi_1(x)$, funkcję falową w obszarze $[-a/2, a/2]$ oznaczamy przez $\psi_2(x)$, a w obszarze $[a/2, \infty]$ oznaczamy przez $\psi_3(x)$; przyjmujemy ponadto $E = \hbar^2k^2/2m$, gdzie energia $E > 0$, a m jest masą cząstki. Korzystając z wyniku zadania 7.10 wykazać, że

$$\psi_1(x) = e^{ikx} - \frac{im}{\hbar^2 k} e^{-ikx} \int_{-a/2}^{a/2} e^{ikx'} V(x')\psi_2(x')\,dx',$$

$$\psi_3(x) = e^{ikx}\left[1 - \frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikx'} V(x')\psi_2(x')\,dx'\right]$$

oraz

$$\psi_2(x) = e^{ikx} - \frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-a/2}^{a/2} e^{ik|x-x'|} V(x')\psi_2(x')\,dx'.$$

Widzimy, że na to, by określić funkcję w obszarze, gdzie potencjał znika, wystarczy znać funkcję falową jedynie w obszarze, gdzie potencjał jest różny od zera.

b) Przyjmujemy, że w punkcie (a) $V(x) = V_0 = \text{const}$ w interesującym obszarze. W tym wypadku

$$\psi_2(x) = e^{ikx} - \frac{imV_0}{\hbar^2 k} \int_{-a/2}^{a/2} e^{ik|x-x'|}\psi_2(x')\,dx'.$$

Wykazać, że n-ty człon szeregu iteracyjnego dla tego równania jest mniejszy co do wartości bezwzględnej od $(mV_0a/\hbar^2k)^{n-1}$, a zatem szereg iteracyjny jest zbieżny, jeśli $(mV_0a/\hbar^2k) < 1$, a ponieważ $\hbar k = p = mv$, to mamy równoważny warunek $V_0a/\hbar v < 1$. Wniosek ten jest słuszny również dla trzech wymiarów, ale wtedy znacznie trudniej go udowodnić. Zauważmy, że metody przestrzeni Hilberta użyte w tekście dają kryterium na zbieżność szeregu Borna w trzech wymiarach, które jest niezależne od energii cząstki, podczas gdy kryterium $V_0a/\hbar v < 1$ mówi, że niezależnie od wielkości potencjału, szereg Borna będzie zawsze zbieżny dla dostatecznie dużej energii cząstki.

9. Stosując metodę funkcji wagowej wykazać, że w jednym wymiarze szereg iteracyjny dla równania Lippmanna–Schwingera będzie zbieżny, jeśli

$$\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\,dx < 1,$$

gdzie $V(x)$ jest potencjałem. Zauważmy, że jeśli zasięg potencjału wynosi a, to

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(x)\,dx = \bar{V}a,$$

gdzie $\bar{V}$ jest wartością średnią potencjału. Wynik ten jest prostym uogólnieniem wyniku z zadania 8(b). W tamtym problemie podstawowe idee fizyczne są bardziej przejrzyste,

gdyż istnieje ostra granica między obszarem działania sił i obszarem gdzie potencjał jest równy zeru. Funkcja wagowa jest niezbędna, ponieważ potencjały używane w praktyce są na ogół różne od zera we wszystkich punktach przestrzeni, chociaż w większości punktów ich wartość jest mała.

10. Przyjmujemy, że w zadaniu 8(a) potencjał $V(x) = V_0 = \text{const}$, gdzie V_0 jest małe w sensie zadania 8(b). Obliczyć ψ_1 i ψ_3 stosując dla ψ_2 przybliżenie najniższego rzędu. Ile wynosi prawdopodobieństwo przejścia w tym przybliżeniu? Jakie jest prawdopodobieństwo odbicia? Zauważyć, że suma tych prawdopodobieństw nie jest równa 1. Dlaczego? (Ścisłe odpowiedzi można znaleźć w książce L. I. Schiffa „Quantum Mechanics", drugie wydanie, rozdział 17, McGraw-Hill 1955.)

11. Wykazać, że jeśli $V(\mathbf{r})$ zmienia znak dla różnych wartości $\mathbf{r}$, to odpowiednia modyfikacja funkcji $\varrho(\mathbf{r})$ w metodzie funkcji wagowej polega na przyjęciu $d\varrho(\mathbf{r}) = |V(\mathbf{r})|\,d\mathbf{r}$. Oszacować normę operatora całkowego w równaniu Lippmanna–Schwingera stosując tę funkcję wagową.

12. a) Korzystając z podstawienia $\psi(x) = e^{ikx}\phi(x)$ w jednorodnym równaniu Lippmanna–Schwingera wykazać, że $\phi(x)$ spełnia równanie całkowe

$$\phi(x) = 1 - \frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{x} V(x')\phi(x')\,dx' - \frac{im}{\hbar^2 k}\,e^{-ikx}\int_{x}^{\infty} e^{2ikx'}V(x')\phi(x')\,dx'.$$

b) Postaraj się znaleźć argumenty przemawiające za tym, że ostatni człon w powyższym równaniu jest zaniedbywalnie mały dla dużych wartości k (to znaczy dla dużych energii cząstki padającej).

c) Zaniedbując ten człon wykazać, że w tym przybliżeniu funkcja $\phi(x)$, którą będziemy oznaczać $\phi_E(x)$, spełnia równanie różniczkowe

$$\frac{d\phi_E(x)}{dx} = -\frac{im}{\hbar^2 k}V(x)\phi_E(x)$$

z warunkiem brzegowym $\phi_E(-\infty) = 1$. Wykazać, że w takim razie

$$\phi_E(x) = \exp\left\{-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{x} V(x')\,dx'\right\}.$$

Przybliżenie to nazywa się przybliżeniem *eikonalnym*; jego uogólnienie na przypadek trójwymiarowy okazało się bardzo użyteczne w badaniu niektórych problemów rozproszeniowych przy wysokich energiach.

d) Wracając do punktów (a) i (b) wykazać, że dla potencjału $V(x) = V_0$, gdy $x \in [-a/2, a/2]$ i $V(x) = 0$ dla pozostałych x, ostatni człon równania w punkcie (a) jest rzeczywiście mały dla $k \to \infty$. W oszacowaniu tym należy zastąpić $\phi(x)$ pod całką przybliżeniem tej funkcji przez $\phi_E(x)$ znalezionym w punkcie (c). Po tej zamianie całka jest bardzo prosta; wykazać, że wartość rozpatrywanego członu jest mniejsza od

$$\frac{1}{2}\left|\frac{E}{V_0} - \frac{1}{4}\right|^{-1},$$

a więc rzeczywiście dla $E \gg V_0$ człon ten może być zaniedbany.

13. Rozpatrujemy równanie różniczkowe

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2}+2\gamma\frac{dx(t)}{dt}+\omega_0^2x(t)=0$$

dla tłumionego oscylatora harmonicznego.

a) Wykazać, że jeśli $x(0)=x_0$ i $\dot{x}(0)=0$, to $x(t)$ spełnia równanie całkowe

$$x(t)=x_0\cos\omega_0 t+\frac{2x_0\gamma}{\omega_0}\sin\omega_0 t-2\gamma\int_0^t\cos\omega_0(t-t')x(t')dt'.$$

b) Wykazać, że pierwszych kilka członów szeregu iteracyjnego dla tego równania zgadza się z rozwinięciem ścisłego rozwiązania do odpowiedniego rzędu.

14. Wykazać, że $x_1(t)$ dane wzorem (8.49) spełnia warunek zachowania energii do rzędu δ, gdzie $\delta=\varepsilon x_0/\omega_0^2\equiv ax_0/k$. To znaczy wykazać, że

$$\frac{1}{2}m\dot{x}_1^2+\frac{1}{2}kx_1^2+\frac{1}{3}ax_1^3=\frac{1}{2}kx_0^2+\frac{1}{3}ax_0^3+\mathcal{O}(\delta^2),$$

gdzie $\mathcal{O}(\delta^2)$ oznacza człony rzędu δ^2 i wyższe.

15. Rozwiązując równanie oscylatora anharmonicznego w paragrafie 8.4 pisaliśmy $x_0(t)$, $x_1(t)$, $x_2(t)$ itd. na oznaczenie zerowej iteracji, pierwszej iteracji, drugiej iteracji itd. Podobnie, oznaczmy $\bar{x}_0(t)$, $\bar{x}_1(t)$, $\bar{x}_2(t)$, tę część rozwiązania iteracyjnego, która zawiera wszystkie człony do rzędu δ^0, rzędu δ^1, rzędu δ^2 itd. Oczywiście $\bar{x}_0(t)=x_0(t)$ i $\bar{x}_1(t)=x_1(t)$, ale $\bar{x}_2(t)$ jest tylko częścią $x_2(t)$. Wyznaczyć $\bar{x}_3(t)$ (będzie to wymagało policzenia jedynie paru członów wchodzących w skład $x_3(t)$) i wykazać, że wszystkie człony $\bar{x}_3(t)$, liniowe w t mogą być usunięte, aż do rzędu δ^3, jeśli zastąpimy wszędzie w funkcjach trygonometrycznych częstość ω_0 przez ω_1. Wielkość ω_1 zapisujemy w postaci

$$\omega_1=\omega_0[1+a\delta+b\delta^2+c\delta^3]^{1/2}.$$

Wyznaczyć wartości a, b oraz c, które rzeczywiście usuwają człony liniowe zmiennej t. Stosując argumenty fizyczne podać, jak duże może być x_0, by powyższe rozwinięcie dla ω_1 było jeszcze zbieżne (wyobrażamy sobie, że powyższa redefinicja częstości jest przeprowadzona we wszystkich rzędach δ).

16. a) Wyprowadzić równanie całkowe równoważne równaniu różniczkowemu dla oscylatora anharmonicznego

$$\ddot{x}(t)+\omega_0^2x(t)=-ax^3(t).$$

W wyprowadzeniu tym należy skorzystać z funkcji Greena dla operatora $d^2/dt^2+\omega_0^2$. Przyjąć, że $x(0)=x_0$ i $\dot{x}(0)=0$.

b) Przeiterować raz to równanie i podać pierwszą poprawkę do rozwiązania najniższego rzędu, tj. $x_0(t)=x_0\cos\omega_0 t$.

17. Dla układu z zadania 8.16 znaleźć $\bar{x}_2(t)$ (używamy notacji wprowadzonej w zadaniu 8.15). Wykazać, że pisząc

$$\omega_1=\omega_0[1+a\delta+b\delta^2]^{1/2}$$

i wybierając odpowiednio stałe a i b możemy wyeliminować do rzędu δ^2 wszystkie człony w $\bar{x}_2(t)$ proporcjonalne do t i t^2, jeśli zastąpimy w funkcjach trygonometrycznych częstość ω_0 przez powyższe ω_1.

18. Rozwiązać równania:

a) $f(x) = x + \lambda \int_0^\infty e^{-(x+y)} f(y)\,dy$,

b) $f(x) = x + \frac{\lambda}{\pi} \int_0^{\pi/2} \cos(x+y) f(y)\,dy$.

19. Znaleźć odpowiadające jedynemu stanowi związanemu rozwiązanie całkowego równania Schrödingera z potencjałem separowalnym o postaci $-g^2 v(r) v(r')$, gdzie $v(r) = e^{-\mu r}/r$. Wykazać, że stan związany istnieje wtedy i tylko wtedy, gdy $g^2 > \hbar^2 \mu^3/(4\pi m)$, gdzie m jest masą związanej cząstki. Wykazać również, że energia stanu związanego wynosi

$$E_B = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{4\pi m g^2}{\mu \hbar^2}\right)^{1/2} - \mu\right]^2.$$

Jaka jest funkcja falowa stanu związanego?

20. Rozpatrujemy wielkość

$$f^s(E) = \frac{2\tau}{(q_i^2+\mu^2)^2 + \frac{\tau}{\mu}(q_i - i\mu)^2},$$

gdzie $\tau = 4\pi m g^2/\hbar^2$, a $q_i = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ [patrz równanie (8.73)]. Wykazać, że jeżeli nie ograniczamy się do rzeczywistych fizycznych wartości E, to znaczy jeśli traktujemy $f^s(E)$ jako funkcję zmiennej zespolonej na dwupłatowej powierzchni Riemanna z cięciem wzdłuż dodatniej półosi rzeczywistej, to funkcja $f^s(E)$ jest jednoznaczna i analityczna wszędzie, z wyjątkiem bieguna drugiego rzędu w punkcie $E = -\hbar^2\mu^2/2m$ na pierwszym płacie, bieguna pierwszego rzędu w punkcie $E = -\hbar^2(\mu + \sqrt{\tau/\mu})^2/2m$ na drugim płacie i tzw. bieguna stanu związanego, który może być albo na pierwszym, albo na drugim płacie. Jeśli $\mu > \sqrt{\tau/\mu}$, to biegun ten jest na drugim płacie w punkcie $E = -\hbar^2(\sqrt{\tau/\mu} - \mu)^2/2m$; jeśli $\sqrt{\tau/\mu} > \mu$, to biegun ten leży na pierwszym płacie w punkcie $E = -\hbar^2(\sqrt{\tau/\mu} - \mu)^2/2m$. Ta wartość E jest dokładnie energią stanu związanego wyznaczoną w poprzednim zadaniu. Widzimy więc, że kiedy g^2 spada poniżej wartości krytycznej niezbędnej do utworzenia stanu związanego, to wpływ stanu związanego na amplitudę rozproszenia nie znika w magiczny sposób — biegun odpowiadający stanowi związanemu przechodzi w sposób ciągły z pierwszego „fizycznego" płatu na drugi płat.

21. Omawiając jądra skończonego rzędu na początku paragrafu 8.6 wprowadziliśmy pokrótce pojęcie funkcjonału liniowego. Celem tego zadania i dwóch następnych jest zapoznanie czytelnika z niektórymi najprostszymi aspektami funkcjonałów liniowych na przestrzeni Banacha. Przyjmujemy następujące definicje. Funkcjonał F na przestrzeni Banacha B jest odwzorowaniem przypisującym każdemu elementowi $g \in B$ liczbę zespoloną (jeśli B jest określone nad ciałem liczb zespolonych). Działanie odwzorowania F na g oznaczać będziemy $F(g)$. Mówimy, że F jest funkcjonałem liniowym, jeśli $F(\alpha g_1 + \beta g_2) = \alpha F(g_1) + \beta F(g_2)$ dla wszystkich liczb zespolonych α oraz β i dla wszystkich $g_1, g_2 \in B$. Funkcjonał F nazywa się ograniczony, jeśli istnieje liczba rzeczywista M taka, że $|F(g)| \leqslant M||g||$ dla wszystkich $g \in B$, przy czym M ma być niezależne od g. Rozpatrzmy teraz dwa zagadnienia:

a) Niech F będzie ograniczonym, liniowym funkcjonałem na B. Przypuśćmy dalej, że mamy w B ciąg $\{f_n\}$ zbieżny w sensie normy do $f \in B$. Wykazać, że $F(f_n) \to F(f)$, to znaczy że F jest ciągłe.

b) Wykazać, że jeśli $f \in L_p$, to funkcjonał F jest zdefiniowany na przestrzeni L_q, gdzie $1/p+1/q = 1$, wzorem

$$F(g) \equiv (f, g) \equiv \int f^*(x)g(x)dx,$$

gdzie $g \in L_q$, jest ograniczonym funkcjonałem liniowym.

[*Wskazówka*: Przypomnieć sobie zadanie 8.2.] Można wykazać, że każdy liniowy, ograniczony funkcjonał na L_q może być zapisany w powyższej postaci, tzn. może być generowany przez element należący do L_p.

22. Podobnie jak dla ograniczonych operatorów liniowych działających na B, tak i dla ograniczonych liniowych funkcjonałów na B definiujemy normę jako kres dolny zbioru wszystkich wartości M spełniających $|F(g)| \leqslant M||g||$ dla wszystkich $g \in B$. Jak zwykle normę funkcjonału F będziemy oznaczać symbolem $||F||$.

a) Wykazać, że dla funkcjonału F zdefiniowanego na L_q w następujący sposób

$$F(g) = (f, g),$$

gdzie $f \in L_p$ i $1/p+1/q = 1$ (patrz poprzednie zadanie), mamy $||F|| \leqslant ||f||$. Tutaj norma wektora f jest normą odpowiednią dla L_p, to znaczy

$$||f|| = \left[\int |f(x)|^p dx\right]^{1/p}.$$

b) Wykazać że funkcja

$$g = \frac{|f|^{(p/q)+1}}{f^*}$$

należy do L_q, jeśli $f \in L_p$ i gdy $(1/p+1/q = 1)$, a zatem że $||F|| \geqslant ||f||$. W tym celu wykazać kolejno, że

$$|F(g)| = |(f, g)| = ||f||^p$$

oraz

$$||f|| \cdot ||g|| = ||f||^p.$$

Wynika stąd, że $|F(g)| = ||f|| \cdot ||g||$, a więc $||F|| \geqslant ||f||$. Zestawiając wyniki punktów (a) i (b) przekonujemy się, że w istocie $||F|| = ||f||$.

23. Wykazać, że definiując w oczywisty sposób operację dodawania funkcjonałów i mnożenia ich przez liczby zespolone możemy zbiór funkcjonałów liniowych na B uczynić nową przestrzenią Banacha zwaną przestrzenią dualną do B i oznaczaną symbolem B^*. Ponieważ każdy funkcjonał liniowy na L_q jest generowany przez element przestrzeni L_p, gdzie $1/p+1/q = 1$, możemy utożsamić L_q^* z przestrzenią L_p i powiedzieć, że L_p jest przestrzenią dualną do L_q. Zauważmy, że przestrzeń L_2 funkcji całkowalnych w kwadracie jest swoją własną przestrzenią dualną.

Problem postawiony w tym zadaniu sprowadza się do trzech punktów. Po pierwsze trzeba wykazać, iż definicja dodawania i mnożenia przez liczbę jest taka, że prowadzi do liniowej przestrzeni wektorowej. Po wtóre trzeba wykazać, że definicja normy podana w poprzednim zadaniu spełnia wszystkie aksjomaty normy (tak jak to wykazywaliśmy w paragrafie 8.2 przy omawianiu normy operatorów). Te dwa punkty łatwo dowieść.

Nie tak łatwy jest już dowód trzeciej części, a mianowicie że skonstruowana przestrzeń wektorowa jest zupełna.

Wskazówka: Trzeba wykazać, że każdy ciąg Cauchy'ego funkcjonałów $\{F_n\}$ ma granicę, która jest również ograniczonym funkcjonałem liniowym. Zauważmy, że dla każdego $f \in B$, ciąg $\{F_n(f)\}$ jest ciągiem Cauchy'ego liczb zespolonych. Ponieważ liczby zespolone tworzą przestrzeń zupełną, więc możemy zdefiniować granicę $\{F_n\}$ w działaniu na dowolne $f \in B$, jako granicę ciągu $\{F_n(f)\}$, o której wiemy na pewno, że istnieje. Oznaczmy tę granicę symbolem $F(f)$. Nietrudno już wykazać, że tak zdefiniowane F jest liniowe i ograniczone, oraz że $||F_n - F|| \to 0$ dla $n \to \infty$. Podstawowa idea wszystkich tych dowodów zawiera się w następującej tożsamości potrzebnej w dowodzie liniowości F:

$$F(\alpha g_1 + \beta g_2) - [\alpha F(g_1) + \beta F(g_2)] \equiv$$
$$\equiv [F(\alpha g_1 + \beta g_2) - F_n(\alpha g_1 + \beta g_2)] -$$
$$- [\alpha F(g_1) - \alpha F_n(g_1)] - [\beta F(g_2) - \beta F_n(g_2)].$$

Skorzystaliśmy tu ze znanej liniowości F_n.]

24. Wykazać, że definiując w oczywisty sposób dodawanie i mnożenie przez liczbę możemy skonstruować przestrzeń Banacha ze zbioru wszystkich ograniczonych operatorów liniowych na B. W dowodzie powyższego twierdzenia można się wzorować ściśle na dowodzie podanym w poprzednim zadaniu dla ograniczonych funkcjonałów liniowych. Podobnie jak tam i w tym zadaniu zupełność wyjściowej przestrzeni B odgrywa decydującą rolę w dowodzie.

25. Korzystając z wzorów (8.75) i (8.88) wykazać explicite, że

$$(I - \lambda K_F)(I + \lambda R_{K_F}) = I.$$

26. Wykazać, że jeśli K_N jest zdefiniowane wzorem (8.93), a P_N wzorem (8.94), to $K_N = P_N K P_N$.

LITERATURA POMOCNICZA

J. M. Blatt i V. F. Weisskopf *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York 1952.

M. L. Goldberger i K. M. Watson *Collision Theory*. Wiley, New York 1964.

W. V. Lovitt *Linear Integral Equations*. New York–Dover 1950.

N. I. Mushelishvili *Singular Integral Equations*. P. Noordhoff Ltd. Groningen 1953. W książce tej podany jest użyteczny i interesujący przegląd równań całkowych z jądrami osobliwymi.

R. G. Newton *Scattering Theory of Waves and Particles*. McGraw-Hill New York 1966.

F. Riesz i B. Sz. Nagy *Functional Analysis*. New York 1955.

ROZDZIAŁ 9

RÓWNANIA CAŁKOWE W PRZESTRZENI HILBERTA

WSTĘP

W ostatnim rozdziale rozwinęliśmy dwie podstawowe metody rozwiązywania równań całkowych — metodę iteracji oraz przybliżenie przez operatory skończonego rzędu. W tym rozdziale chcemy wykorzystać te metody do wyprowadzenia pewnych wyników ułatwiających znacznie rozwiązywanie praktycznych problemów. Zaczniemy od dokładniejszej analizy własności zwartych operatorów hermitowskich, w szczególności wyprowadzimy *własności zupełności* układu funkcji własnych takich operatorów, a następnie wykorzystamy własności tych funkcji własnych do zbadania teorii zaburzeń i rozwiązywania równań liniowych.

Po uzyskaniu pewnych doświadczeń z badania takich operatorów przejdziemy do ogólniejszego przypadku operatorów zwartych i zobaczymy, jak rozwiązywać równania liniowe przy pomocy przybliżenia skończonego rzędu. Rozdział ten zakończymy spojrzeniem na transformację Fouriera z punktu widzenia teorii *operatorów unitarnych* w przestrzeni Hilberta. Jest to jedno z najważniejszych narzędzi fizyki teoretycznej, a łatwość, z jaką można nim operować w kontekście nieskończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej, jest piękną ilustracją potęgi teorii operatorów liniowych.

9.1. ZWARTE OPERATORY HERMITOWSKIE

Zanim podejmiemy wysiłek zbadania ogólniejszego typu operatorów zwartych, zajmijmy się ważnym przypadkiem szczególnym, a mianowicie *samosprzężonymi operatorami zwartymi*. Ten rodzaj operatorów jest interesujący sam w sobie; na przykład z równaniem Schrödingera dla stanów związanych można radzić sobie bardzo zgrabnie przy pomocy metod, które zamierzamy rozwinąć. Ponadto ten przypadek szczególny pozwoli nam zorientować się, jak należy postępować w ogólnym przypadku operatorów zwartych.

Podobnie jak w przypadku skończenie wymiarowym zwarty operator samosprzężony ma następującą własność

$$(x, Ay) = (Ax, y) \tag{9.1}$$

dla wszystkich x, y należących do przestrzeni wektorowej. Ponieważ A jest operatorem zwartym, więc jest zarazem operatorem ograniczonym, a zatem zdefiniowany na każdym

elemencie tej przestrzeni. Jeśli A jest operatorem całkowym z jądrem $a(t, t')$, wtedy żądanie hermitowskości jest równoważne warunkowi

$$a(t, t') = a^*(t', t); \tag{9.2}$$

wynika to z następujących równości:

$$(x, Ay) = \int dt \int dt' x^*(t) a(t, t') y(t'),$$

$$(Ax, y) = \int dt' \int dt\, a^*(t, t') x^*(t') y(t) = \int dt' \int dt\, x^*(t) a^*(t', t) y(t').$$

Oczywiście warunek (9.2) pociąga za sobą spełnienie warunku (9.1). Należy w tym miejscu powiedzieć, że zmiana oznaczeń, jaką tu wprowadziliśmy, a mianowicie zapis operatora jako A, zaś wektorów w postaci x, y nie jest przypadkowa. Przekonamy się niebawem, że teoria zwartych operatorów hermitowskich jest niemal identyczna z teorią skończenie wymiarową omawianą w rozdz. 4. Aby podkreślić to podobieństwo w tym i następnym paragrafie, będziemy stosować te same konwencje co do oznaczeń, które stosowaliśmy w rozdz. 4. Jednakże należy pamiętać, że w tym rozdziale wektory x i y mogą być funkcjami; jeśli tę funkcyjną zależność zechcemy uwidocznić, będziemy pisać $x(t)$ i $y(t)$.

Zaczniemy od przypomnienia definicji normy podanej w paragrafie 8.2, a mianowicie $||A||$ jest najmniejszą stałą taką, że

$$||Ax|| \leqslant ||A|| \cdot ||x||$$

dla wszystkich $x \in B$, gdzie B jest dowolną metryczną przestrzenią wektorową, a A jest operatorem ograniczonym. Interesujące jest zbadanie, czy istnieje w przestrzeni taki wektor, dla którego by było

$$Ay = \pm ||A|| y. \tag{9.3}$$

Niech H_1 będzie przestrzenią Hilberta, a A operatorem o własności takiej, że zawsze istnieje pewien wektor w przestrzeni spełniający równanie (9.3). Przypuśćmy, że znaleźliśmy pewien wektor x_1 spełniający

$$Ax_1 = \pm ||A||_1 x_1,$$

gdzie $||A||_1$ jest normą operatora A rozpatrywanego w całej przestrzeni Hilberta H_1. Zbiór wszystkich wektorów ortogonalnych do x_1 jest znów przestrzenią Hilberta; oznaczmy ją jako H_2; jeśli operator A był ograniczony w H_1, to jest on oczywiście tym bardziej ograniczony w H_2, a zatem

$$||Ax|| \leqslant ||A||_2 ||x||$$

dla wszystkich $x \in H_2$; ponadto oczywiście zachodzi związek $||A||_2 \leqslant ||A||_1$. Jeśli jednak A ma własność sformułowaną powyżej, to istnieje pewien wektor $x_2 \in H_2$, dla którego

$$Ax_2 = \pm ||A||_2 x_2,$$

gdzie $(x_1, x_2) = 0$. Możemy przedłużać ten proces nieograniczenie generując w ten sposób $H_1, H_2, H_3, \ldots$ oraz $x_1, x_2, x_3, \ldots$.

Mogą teraz zajść różne przypadki. Może być tak, że $||A||_1 = ||A||_2 = ||A||_3 = \ldots$. Tak by było na przykład, gdyby A było operatorem jednostkowym. Jeśli jednak operator A jest zwarty i $A \neq 0$, to sytuacja taka nie może się zdarzyć, to znaczy nie możemy mieć nieskończenie wiele razy pewnej niezerowej wartości własnej. Gdyby tak było, to mieli-

byśmy nieskończony ortonormalny ciąg $\{x_n\}$, a ze względu na zwartość A ciąg $\{Ax_n\}$ musiałby mieć podciąg zbieżny. Ponieważ jednak $Ax_n = ax_n$ dla wszystkich wektorów ciągu, to i ciąg $\{ax_n\}$ musiałby mieć podciąg zbieżny. Jednakże $||x_m - x_n|| = \sqrt{2}$ dla wszystkich m i n, a zatem nie może być takiego podciągu, chyba że $a = 0$. A zatem daną, skończoną wartość własną można otrzymać co najwyżej skończoną ilość razy.

Wartość własna równa zeru może jednak wystąpić nieskończenie wiele razy. Z takim przypadkiem będziemy mieli do czynienia dla operatora skończonego rzędu w przestrzeni Hilberta. W każdym jednak przypadku wartości własne λ_n muszą dążyć do zera, gdyż w przeciwnym wypadku x_n/λ_n byłby ciągiem ograniczonym. Ale $A\frac{x_n}{\lambda_n} = \lambda_n \frac{x_n}{\lambda_n} = x_n$, a zatem ciąg x_n musiałby posiadać podciąg zbieżny, co jak już ustaliliśmy, nie może mieć miejsca. Takie zachowanie się wartości własnych może być albo wynikiem tego, że tylko skończona ich liczba jest różna od zera, albo też że mamy do czynienia z nieskończonym zbiorem λ_n, w którym każda wartość występuje skończoną liczbę razy oraz jednocześnie $\lambda_n \to 0$ dla dostatecznie dużych n. W tym ostatnim przypadku możemy mieć również wartości własne zero występujące być może nieskończoną liczbę razy. Nieskończona liczba wektorów własnych x_n odpowiadających tym wartościom własnym pozwala nam mieć nadzieję, że będą one tworzyły układ zupełny, aczkolwiek fakt, że zbiór $\{x_n\}$ jest nieskończony, jest tylko warunkiem koniecznym, ale nie dostatecznym jego kompletności.

W przestrzeni skończenie wymiarowej własności zupełności mają wektory własne odwzorowań samosprzężonych, izometrycznych albo normalnych. Pokażemy, że w przestrzeni nieskończenie wymiarowej to samo zachodzi dla zwartych operatorów samosprzężonych. Oczywiście takie podstawowe własności jak rzeczywistość wartości własnych również przenoszą się na ten przypadek, gdyż dowód tych własności podany w rozdz. 4 nie był bynajmniej ograniczony do przypadku skończenie wymiarowego. Dla podkreślenia jednak tego, że istnieją jakieś różnice pomiędzy przypadkiem skończenie wymiarowym a nieskończenie wymiarowym chcemy wspomnieć, że nie istnieją zwarte odwzorowania izometryczne w nieskończenie wymiarowej przestrzeni Hilberta. Oczywiście każda izometria jest ograniczona, gdyż

$$||Uy||^2 = (Uy, Uy) = (y, y) = ||y||^2$$

dla każdego $y \in H$, a zatem $||U|| = 1$. Rozważmy jednak dowolny ciąg $\{y_n\}$ nie posiadający podciągu zbieżnego. Odpowiadający mu ciąg $\{Uy_n\}$ również nie może mieć podciągu zbieżnego, gdyż

$$||Uy_n - Uy_m|| = ||U(y_n - y_m)|| = ||y_n - y_m||.$$

A zatem operator U nie zmienia w żaden sposób własności zbieżności ciągu $\{y_n\}$. A więc odwzorowania izometryczne nie są zwarte.

Najważniejszą własnością odwzorowań samosprzężonych jest to, że mają one rzeczywiste wartości oczekiwane. Fakt ten prowadzi do następującego ważnego twierdzenia.

Twierdzenie 9.1. Niech A będzie ograniczonym samosprzężonym operatorem liniowym w przestrzeni Hilberta H. Jeżeli $||y|| = 1$, to

$$\sup_{y \in H} |(y, Ay)| = ||A||,$$

gdzie sup oznacza kres górny.

Dowód. Na mocy nierówności Schwartza, dla każdego $y \in H$ mamy

$$|(y, Ay)| \leqslant ||y|| \cdot ||Ay|| \leqslant ||A|| \cdot ||y||^2. \tag{9.4}$$

Analogicznie jak definiowaliśmy normę $||A||$, definiujemy wielkość $|A|$ jako najmniejszą stałą, dla której

$$|(y, Ay)| \leqslant |A| \cdot ||y||^2, \tag{9.5}$$

dla wszystkich $y \in H$. Zgodnie z (9.4) mamy $|A| \leqslant ||A||$. Pokażemy teraz, że $|A| \geqslant ||A||$. W tym celu skorzystamy z tożsamości

$$||Ay||^2 = (Ay, Ay) \equiv \frac{1}{4}\left\{\left(\lambda y + \frac{1}{\lambda} Ay, A\left[\lambda y + \frac{1}{\lambda} Ay\right]\right) - \left(\lambda y - \frac{1}{\lambda} Ay, A\left[\lambda y - \frac{1}{\lambda} Ay\right]\right)\right\}$$

prawdziwej dla wszystkich rzeczywistych λ. Korzystając z (9.5) dostajemy

$$||Ay||^2 \leqslant \frac{1}{4}|A| \cdot \left[||\lambda y + \frac{1}{\lambda} Ay||^2 + ||\lambda y - \frac{1}{\lambda} Ay||^2\right],$$

czyli

$$||Ay||^2 \leqslant \frac{1}{2}|A| \cdot \left(\lambda^2 \cdot ||y||^2 + \frac{1}{\lambda^2} ||Ay||^2\right).$$

Nierówność jest w szczególności prawdziwa dla $\lambda^2 = ||Ay||/||y||$. Dla tej wartości dostajemy

$$||Ay||^2 \leqslant |A| \cdot ||Ay|| \cdot ||y|| \quad \text{lub} \quad ||Ay|| \leqslant |A| \cdot ||y||,$$

a zatem $||A|| \leqslant |A|$. Ponieważ już udowodniliśmy, że $||A|| \geqslant |A|$, zatem widzimy, że istotnie $||A|| = |A|$. Zauważmy, że wynik ten jest prawdziwy dla każdego ograniczonego operatora samosprzężonego niezależnie od tego, czy jest on zwarty, czy nie. Mogłoby się nawet wydawać, że dowód jest również niezależny od hermitowskości A, jednakże można się przekonać, że tożsamość z λ, odgrywająca decydującą rolę w dowodzie jest słuszna jedynie wtedy, gdy A jest samosprzężony.

Mając już ten rezultat możemy przystąpić do realizacji programu nakreślonego na początku tego paragrafu.

Twierdzenie 9.2. Niech A będzie zwartym, samosprzężonym odwzorowaniem w przestrzeni Hilberta H, i niech C oznacza zbiór wszystkich $y \in H$ takich, że $||y|| = 1$. Wielkość $|(y, Ay)|$ osiąga na tym zbiorze swój kres górny, a wektor x, dla którego to następuje, jest wektorem własnym A o wartości własnej $\lambda = \pm||A||$.

Dowód. Wybierzmy ciąg $\{y_n\}$, $y_n \in C$ taki, że (y_n, Ay_n) dąży do λ_1, gdzie $\lambda_1 = ||A||$. Poprzednie twierdzenie mówi nam, że to zawsze możliwe. Ponieważ chcemy dowieść, że λ_1 jest wartością własną, rozpatrzmy

$$||Ay_n - \lambda_1 y_n||^2 = ||Ay_n||^2 - 2\lambda_1(y_n, Ay_n) + \lambda_1^2||y_n||^2,$$

a ponieważ $||Ay_n||^2 \leqslant ||A||^2 \cdot ||y_n||^2 = \lambda_1^2||y_n||^2$ oraz $||y_n|| = 1$, zatem

$$||Ay_n - \lambda_1 y_n||^2 \leqslant 2[\lambda_1^2 - \lambda_1(y_n, Ay_n)].$$

Z założenia mamy $(y_n, Ay_n) \to \lambda_1$, więc

$$||Ay_n - \lambda_1 y_n|| \to 0. \tag{9.6}$$

Ponieważ A jest zwarty, więc ciąg $\{Ay_n\}$ posiada podciąg zbieżny, nazwijmy go $\{A\eta_m\}$, gdzie $\{\eta_m\}$ jest podciągiem ciągu $\{y_n\}$. Z powodów, które wkrótce staną się jasne, oznaczmy granicę, do której dąży $\{A\eta_m\}$ przez $\lambda_1 x_1$, tzn.

$$||A\eta_m - \lambda_1 x_1|| \to 0. \tag{9.7}$$

Ale

$$A\eta_m - \lambda_1 \eta_m \equiv A\eta_m - \lambda_1 x_1 + \lambda_1 x_1 - \lambda_1 \eta_m, \tag{9.8}$$

więc

$$||\lambda_1 x_1 - \lambda_1 \eta_m|| \leqslant ||A\eta_m - \lambda_1 x_1|| + ||A\eta_m - \lambda_1 \eta_m||.$$

Na mocy (9.6) i (9.7)

$$||\lambda_1 x_1 - \lambda_1 \eta_m|| \to 0, \tag{9.9}$$

czyli innymi słowy ciąg $\{\eta_m\}$ dąży do x_1 (zakładając oczywiście, że $\lambda_1 = ||A|| \neq 0$). Na mocy nierówności trójkąta

$$||Ax_1 - \lambda_1 x_1|| \leqslant ||Ax_1 - A\eta_m|| + ||A\eta_m - \lambda_1 \eta_m|| + ||\lambda_1 \eta_m - \lambda_1 x_1|| \leqslant$$
$$\leqslant 2||A|| \cdot ||x_1 - \eta_m|| + ||A\eta_m - \lambda_1 \eta_m||,$$

a więc uwzględniając (9.6) i (9.9) możemy uczynić

$$||Ax_1 - \lambda_1 x_1|| < \varepsilon$$

dla dowolnego ε. Stąd

$$Ax_1 = \lambda_1 x_1,$$

czyli innymi słowy λ_1 jest wartością własną operatora A odpowiadającą wektorowi własnemu x_1. Również

$$|(x_1, Ax_1)| = |(x_1, \lambda_1 x_1)| = |\lambda_1| = ||A||.$$

Kończy to dowód tego twierdzenia, który jest podstawowym rezultatem dla zwartych operatorów samosprzężonych.

Rozpatrzmy znów przestrzeń Hilberta H_2 wszystkich wektorów ortogonalnych do wektora x_1 znalezionego w poprzednim twierdzeniu. Operator A w działaniu na tę przestrzeń jest zwarty i hermitowski. Piszemy

$$||Ay|| \leqslant ||A||_2 \cdot ||y||$$

dla wszystkich $y \in H_2$, gdzie $||A||_2 \leqslant ||A||$. Powtarzając procedurę z dowodu powyższego twierdzenia znajdujemy x_2 takie, że

$$Ax_2 = \lambda_2 x_2, \quad |\lambda_2| = ||A||_2.$$

Proces ten możemy kontynuować nieograniczenie, chyba że dojdziemy do liczby m, dla której wartość własna $\lambda_m = 0$, tzn. $||A||_m = 0$. Oznacza to, że po odrzuceniu pewnej liczby m ortonormalnych wektorów z wyjściowej przestrzeni H, dochodzimy do przestrzeni H_{m+1} takiej, że operator A działając na wektory z tej przestrzeni produkuje jedynie wektory zerowe. Oznacza to, że H_{m+1} jest przestrzenią zerową operatora A. Taki przypadek będzie na pewno miał miejsce dla operatora skończonego rzędu A_F zdefiniowanego jako

$$A_F y \equiv \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \phi_n(\phi_n, y),$$

gdzie ϕ_n tworzą pewien zbiór ortonormalny. Wektorami własnymi operatora A_F są wektory ϕ_n z odpowiadającymi im wartościami własnymi α_n. Wektorem własnym operatora A_F jest również każdy wektor ortogonalny do wszystkich ϕ_n. Wspólną wartością własną tych wszystkich wektorów własnych jest zero. Rezultaty te możemy podsumować w następującym twierdzeniu:

Twierdzenie 9.3. Niech Y będzie zbiorem wszystkich wektorów $y \in H$ takich, że $||y|| = 1$ oraz y jest ortogonalne do wszystkich wektorów $x_1, x_2, \ldots, x_n$ spełniających

$$Ax_n = \lambda_n x_n.$$

Jeżeli A jest zwartym operatorem samosprzężonym, to wielkość $|(y, Ay)|$ osiąga na tym zbiorze swą wartość maksymalną. Ponadto wektor x_{n+1}, dla którego osiągane jest to maksimum, jest wektorem własnym operatora A z wartością własną λ_{n+1}, gdzie $|\lambda_{n+1}| = ||A||_{n+1}$ jest normą operatora A w podprzestrzeni przestrzeni H ortogonalnej do wektorów $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Procedura taka generuje nieskończony ciąg wektorów $\{x_n\}$ i zbiór wartości własnych $\{\lambda_n\}$. Każda niezerowa wartość własna λ_n ma skończoną krotność oraz $\lambda_n \to 0$ przy $n \to \infty$.

Teraz już możemy wyprowadzić twierdzenie o zupełności dla zwartych, samosprzężonych operatorów w przestrzeni Hilberta.

Twierdzenie 9.4. Wektory własne zwartego, samosprzężonego operatora A tworzą zupełny, ortonormalny zbiór wektorów w przestrzeni Hilberta H, w której działa operator A.

Dowód. Załóżmy na wstępie, że A ma tylko niezerowe wartości własne*). Jasne jest, że sytuacja taka ma miejsce przynajmniej w pewnej podprzestrzeni przestrzeni H. Dla dowolnego $y \in H$ rozpatrujemy wyrażenie

$$y_N = y - \sum_{n=1}^{N} (x_n, y)x_n,$$

gdzie zbiór $\{x_n\}$ składa się z wektorów własnych operatora A. Aby dowieść zupełności, należy wykazać, że $||y_N|| \to 0$ przy $N \to \infty$. Ale oczywiście y_N jest ortogonalne do wszystkich x_n, dla których $n \leqslant N$. Na podstawie naszych poprzednich rezultatów mamy

$$||Ay_N|| \leqslant |\lambda_{N+1}| \cdot ||y_N||,$$

a ponieważ $||y_N|| \leqslant ||y||$, to wynika, że

$$||Ay_N|| \leqslant |\lambda_{N+1}| \cdot ||y||;$$

ale $\lambda_{N+1} \to 0$ przy $N \to \infty$, więc

$$||Ay_N|| \to 0,$$

gdy $N \to \infty$. Łatwo pokazać, że

$$Ay_N = Ay - \sum_{n=1}^{N} (x_n, y)Ax_n = Ay - \sum_{n=1}^{N} (x_n, Ay)x_n.$$

---

*) Będziemy również zakładali, że A ma nieskończoną liczbę wektorów własnych należących do niezerowych wartości własnych. Przypadek, kiedy A ma tylko skończoną liczbę niezerowych wartości własnych, jest elementarny i pozostawiamy go jako ćwiczenie dla czytelnika.

Możemy więc powiedzieć, że wektor

$$\sum_{n=1}^{N}(x_n, Ay)x_n$$

dąży w sensie normy do wektora Ay przy $N \to \infty$, co możemy zapisać następująco

$$Ay \doteq \sum_{n=1}^{\infty}(x_n, Ay)x_n^{*)} \tag{9.10}$$

dla wszystkich $y \in H$. Uzyskaliśmy tutaj związek zupełności dla wszystkich wektorów przestrzeni o postaci Ay.

Gdybyśmy wiedzieli, że operator A jest odwracalny, to można by natychmiast powyższą własność zupełności rozszerzyć na wszystkie wektory z przestrzeni H, ponieważ w takim wypadku każdy wektor z H mógłby być zapisany w postaci Ay z pewnym wektorem $y \in H$. W bardziej ogólnym przypadku możemy rozumować w sposób następujący. Ponieważ H jest przestrzenią zupełną, więc ciąg

$$\lim_{N\to\infty}\left[\sum_{n=1}^{N}(x_n, \eta)x_n\right]$$

jest zbieżny średnio do pewnego wektora $\tilde{\eta}$, gdyż nierówność Bessela (5.9) gwarantuje nam, że ciąg

$$\left\{\eta_N = \sum_{n=1}^{N}(x_n, \eta)x_n\right\}$$

jest ciągiem Cauchy'ego. Piszemy więc

$$\tilde{\eta} \doteq \sum_{n=1}^{N}(x_n, \eta)x_n. \tag{9.11}$$

Ponieważ A jest operatorem ciągłym, to mamy

$$A\tilde{\eta} \doteq \sum_{n=1}^{\infty}(x_n, \eta)Ax_n \doteq \sum_{n=1}^{\infty}(x_n, A\eta)x_n.$$

Ale z równości (9.10) mamy

$$A\eta \doteq \sum_{n=1}^{\infty}(x_n, A\eta)x_n,$$

więc

$$A\tilde{\eta} - A\eta = A(\tilde{\eta} - \eta) = 0$$

z wyjątkiem być może zbioru miary zero. Założyliśmy jednak, że A nie ma zerowych wartości własnych, przeto

$$\tilde{\eta} = \eta.$$

A zatem równanie (9.11) przechodzi w

$$\eta \doteq \sum_{n=1}^{\infty}(x_n, \eta)x_n \tag{9.12}$$

*) znak $\doteq$ oznacza zbieżność w sensie średnim.

dla dowolnego $\eta \in H$, co jest znanym związkiem zupełności. Należy pamiętać, że zbieżność sumy nieskończonej w wyrażeniu (9.12) jest określona w sensie zbieżności średniej.

Z przypadkiem kiedy równanie $Ax = 0$ ma nietrywialne rozwiązania, można już łatwo sobie poradzić. Zbiór rozwiązań zerowych stanowi przestrzeń Hilberta, w której możemy w jakikolwiek sposób wybrać ortonormalną bazę $\{y_n\}$. (Zauważmy, że zgodnie z twierdzeniem 4.18 każdy wektor y_n jest ortogonalny do każdego wektora x_m należącego do niezerowej wartości własnej.) Każdy element tej bazy spełnia równanie $Ay_n = 0$. Mając dany wektor x tworzymy wyrażenie

$$\tilde{x} = x - \sum_{n=1}^{\nu} (y_n, x) y_n,$$

gdzie ν jest liczbą elementów zbioru $\{y_n\}$. Oczywiście $\tilde{x}$ leży w dopełnieniu ortogonalnym przestrzeni rozpiętej przez $\{y_n\}$, możemy więc do tego wektora zastosować poprzednie twierdzenie

$$\tilde{x} \doteq \sum_{m=1}^{\infty} (x_m, \tilde{x}) x_m \doteq \sum_{m=1}^{\infty} (x_m, x) x_m,$$

gdzie $\{x_m\}$ są wektorami własnymi operatora A ograniczonego do dopełnienia ortogonalnego przestrzeni rozpiętej przez wektory y_n. Ostatecznie otrzymujemy

$$x \doteq \sum_{n=1}^{\nu} (y_n, x) y_n + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m, x) x_m$$

dla każdego $x \in H$. A zatem zbiór $\{x_n, y_m\}$ stanowi zupełną ortogonalną bazę w przestrzeni H, co właśnie chcieliśmy wykazać.

Rozpatrzmy teraz prosty przykład ilustrujący powyższe rozważania. Rozpatrzmy równanie

$$\int_0^1 t_<(1-t_>) x_n(t') dt' = \lambda_n x_n(t'), \tag{9.13}$$

które, jak wykazaliśmy w paragrafie 7.1, jest równoważne różniczkowemu zagadnieniu własnemu

$$\frac{d^2 x_n(t)}{dt^2} + \mu_n x_n(t) = 0, \qquad x_n(0) = 0 = x_n(1),$$

gdzie $\mu_n = 1/\lambda_n$. Wektorami własnymi równania (9.13) są funkcje

$$x_n(t) = \sqrt{2} \sin(n\pi t),$$

a wartościami własnymi są

$$\lambda_n = 1/n^2\pi^2.$$

Że tak jest, można się przekonać przez bezpośrednie podstawienie do równania (9.13). Twierdzenie 9.4 mówi nam, że wektory $x_n(t) = \sqrt{2}\sin(n\pi t)$ tworzą ortonormalny zupełny zbiór funkcji w przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie na odcinku [0, 1] i znikających w punktach $t = 0$ i $t = 1$. Z poprzednich rozważań wiemy, że norma operatora całkowego zdefiniowanego równaniem (9.13) musi być równa największej wartości własnej, tj. $1/\pi^2$. Przekonaliśmy się również, że norma operatora całkowego jest mniejsza lub równa pier-

wiastkowi kwadratowemu całki z kwadratu jądra [patrz np. równanie (8.47) i dalsze]. W tym konkretnym przypadku musi być

$$\lambda_1^2 \leqslant \int_0^1 dt \int_0^1 dt' t_<^2 (1-t_>)^2 = 1/90$$

lub inaczej

$$|\lambda_1| \leqslant 1/9{,}49 = 0{,}1054.$$

Faktyczna wartość λ_1 wynosi $1/\pi^2$, tzn. $\lambda_1 = 0{,}1013$, widzimy więc, że przybliżenie normy operatora A przez pierwiastek całki z kwadratu jego jądra jest bardzo dobrym oszacowaniem jego największej wartości własnej. Możemy również w ten sposób oszacować drugą wartość własną obliczając w sposób przybliżony normę operatora zawężonego do przestrzeni wszystkich wektorów ortogonalnych do wektora x_1. Oznacza to, że mamy obliczyć normę operatora

$$(I-P_1)A(I-P_1),$$

gdzie P_1 jest operatorem rzutowym na podprzestrzeń rozpiętą przez x_1. Przechodząc od operatora A do jego jądra $a(t, t') = t_<(1-t_>)$ mamy

$$|\lambda_2| \leqslant \left[\int_0^1 dt \int_0^1 dt' [a(t, t') - \lambda_1 x_1(t')]^2\right]^{1/2}.$$

Ponieważ x_1 jest wektorem własnym operatora A, całka ta redukuje się natychmiast do

$$|\lambda_2| \leqslant \left[\int_0^1 dt \int_0^1 dt' [a(t, t')^2 - \lambda_1^2]\right]^{1/2}.$$

Obie wielkości w nawiasie są znane i dostajemy

$$|\lambda_2| \leqslant 0{,}029,$$

co jest dość bliskie ścisłej wartości $\lambda_2 = 1/4\pi^2 = 0{,}025$. Błąd oszacowania λ_1 wynosił 4%, a dla λ_2 błąd ten jest już większy i wynosi 16%. Ta sama metoda zastosowana do λ_3 daje

$$|\lambda_3| \leqslant 0{,}015$$

w porównaniu z wartością dokładną $\lambda_3 = 1/9\pi^2 = 0{,}011$. Widzimy więc, że dokładność oszacowania stale się pogarsza przy przechodzeniu do wyższych wartości własnych. Mimo to oszacowania takie są często użyteczne w praktycznych problemach, gdyż pozwalają zorientować się w przybliżeniu co do wartości najniższej wartości własnej. Oczywiście metoda ta nie może być użyta do oszacowania wyższych wartości własnych, o ile nie znamy ściśle niższych wartości własnych.

Łatwiej zrozumieć te oszacowania, jeśli rozpatrzymy następujący wniosek wynikający z poprzedniego twierdzenia.

Wniosek. Jeśli A jest samosprzężonym operatorem całkowym z jądrem $a(t, t')$ całkowalnym w kwadracie, wtedy

$$a(t, t') \doteq \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n x_n(t) x_n^*(t'), \tag{9.14}$$

gdzie $\{x_n\}$ są wektorami własnymi, a $\{\lambda_n\}$ odpowiadającymi im wartościami własnymi operatora A oraz suma jest określona w sensie zbieżności średniej.

Dowód. Oznaczmy sumę symbolem

$$S(t,t') \doteq \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n x_n(t) x_n^*(t').$$

Pozostawiamy czytelnikowi sprawdzenie, czy suma ta istotnie jest zbieżna; wystarczy zastosować kryterium Cauchy'ego. Zdefiniujmy nową funkcję

$$d(t,t') \equiv a(t,t') - S(t,t')$$

i rozpatrzmy operator całkowy D związany z tą funkcją następującym równaniem:

$$Dy = \int d(t,t')y(t')dt'.$$

Załóżmy teraz, że $||D||$ jest różne od zera. Na mocy twierdzenia 9.2 operator D ma przynajmniej jedną niezerową wartość własną, powiedzmy λ, i odpowiadający jej wektor własny $x(t)$. Niech $x_n(t)$ dla $n = 1, 2, \ldots$ będzie dowolnym wektorem własnym A [a zatem i operatora S, gdzie S jest operatorem całkowym o jądrze $S(t,t')$]. Rozpatrzmy wielkość

$$(x, x_n) \equiv \frac{1}{\lambda^*}(\lambda x, x_n) = \frac{1}{\lambda^*}(Dx, x_n) = \frac{1}{\lambda^*}(x, Dx_n),$$

a ponieważ

$$Dx_n = \int [a(t,t') - S(t,t')]x_n(t')dt' = (A-S)x_n = 0,$$

więc

$$(x, x_n) = 0.$$

Znaleźliśmy więc niezerowy wektor x, którego nie można przedstawić przy pomocy rozwinięcia na skądinąd zupełny układ $\{x_n\}$, co przeczy twierdzeniu o zupełności (twierdzenie 9.4). A zatem nasze założenie, że $||D|| \neq 0$ było niepoprawne, tzn. musi być $||D|| = 0$. Oznacza to jednak, że $d(t,t') = 0$, co uzasadnia rozpatrywany wniosek.

Wniosek powyższy oznacza również, że każda symetryczna, całkowalna w kwadracie funkcja dwóch zmiennych może być rozwinięta w szereg postaci (9.14). Można również pokazać, co pozostawiamy czytelnikowi, że

$$\int dt \int dt' |a(t,t')|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2, \tag{9.15}$$

gdzie $\{\lambda_n\}$ jest zbiorem wartości własnych operatora całkowego A o jądrze zadanym przez symetryczną funkcję $a(t,t')$. Równanie (9.15) stanowi podstawę oszacowania wartości własnych $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$, które rozpatrywaliśmy poprzednio. Z równania tego wynika bowiem, że jeśli nie ma wartości własnych „bliskich" λ_1, tzn. jeśli $\lambda_1^2 \gg \lambda_2^2 > \lambda_3^2 > \ldots$, to wtedy

$$\int dt \int dt' |a(t,t')|^2 \cong \lambda_1^2.$$

Dotychczas szeregowaliśmy wartości własne według malejących wartości bezwzględnych $|\lambda_n|$, tzn. $|\lambda_1|$ było maksymalną wartością $|(y, Ay)|$ osiąganą dla $y = x_1$, gdzie

$$Ax_1 = \lambda_1 \cdot x_1,$$

przy czym samo λ_1 może być albo dodatnie, albo ujemne. Poprzednie twierdzenie umożliwia wprowadzenie podobnego uszeregowania osobno dla dodatnich i ujemnych wartości własnych.

Twierdzenie 9.5. Przypuśćmy, że A jest zwartym operatorem hermitowskim. Niech λ_1^+, λ_2^+, ... będą dodatnimi wartościami własnymi uporządkowanymi zgodnie z warunkiem $\lambda_1^+ \geqslant \lambda_2^+ \geqslant \ldots$, a wektory $x_1^+, x_2^+, \ldots$ są wektorami własnymi odpowiadającymi tym wartościom własnym. Podobnie niech $\lambda_1^-, \lambda_2^-, \ldots$ będą ujemnymi wartościami własnymi operatora A uporządkowanymi zgodnie z nierównościami $\lambda_1^- \leqslant \lambda_2^- \leqslant \ldots$, a odpowiadające im wektory własne niech będą $x_1^-, x_2^-, \ldots$. Twierdzimy, że λ_{n+1}^+ jest maksymalną wartością wyrażenia (y, Ay) w klasie wektorów $y \in H$ i spełniających warunki $\|y\| = 1$ oraz $(y, x_i^+) = 0$ dla $i = 1, 2, \ldots, n$. Podobnie λ_{n+1}^- jest minimalną wartością (y, Ay), kiedy $y \in H$ i spełnia warunki $\|y\| = 1$ i $(y, x_i^-) = 0$ dla $i = 1, 2, \ldots, n$.

Dowód. Na mocy twierdzenia 9.4 mamy dla dowolnego $y \in H$

$$Ay \doteq \sum_{n=1}^{\infty} (x_n, Ay)x_n \doteq \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (x_n, y)x_n,$$

zatem

$$(y, Ay) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |(x_n, y)|^2.$$

Używając wprowadzonych przed chwilą oznaczeń możemy to zapisać w postaci

$$(y, Ay) = \sum_{\nu=1}^{N} \lambda_\nu^+ |(x_\nu^+, y)|^2 + \sum_{\mu=1}^{M} \lambda_\mu^- |(x_\mu^-, y)|^2,$$

gdzie N jest liczbą dodatnich wartości własnych, a M liczbą ujemnych wartości własnych (M i N mogą z osobna lub razem być nieskończone). Przypuśćmy, że $(y, x_i^+) = 0$ dla $i = 1, 2, \ldots, n$, wtedy

$$(y, Ay) = \sum_{\nu=n+1}^{N} \lambda_\nu^+ |(x_\nu^+, y)|^2 + \sum_{\mu=1}^{M} \lambda_\mu^- |(x_\mu^-, y)|^2.$$

Oczywiście, jeśli $y = x_{n+1}^+$, to wtedy $(y, Ay) = \lambda_{n+1}^+$. Weźmy teraz dowolny wektor y i rozwińmy go w szereg

$$y = \sum_{i=n+1}^{N} c_i^+ x_i^+ + \sum_{j=1}^{M} c_j^- x_j^-,$$

gdzie

$$\sum_{i=n+1}^{N} |c_i^+|^2 + \sum_{j=1}^{M} |c_j^-|^2 = 1. \tag{9.16}$$

Wektor y jest ortogonalny do $x_1^+, x_2^+, \ldots, x_n^+$ i jest unormowany do jedności. Dla takiego wektora

$$(y, Ay) = \sum_{\nu=n+1}^{N} \lambda_\nu^+ |c_\nu^+|^2 + \sum_{\mu=1}^{M} \lambda_\mu^- |c_\mu^-|^2.$$

Ponieważ wszystkie λ_ν^+ o wskaźniku $\nu \geqslant n+1$ spełniają warunek $\lambda_\nu^+ \leqslant \lambda_{n+1}^+$ i ponieważ $\lambda_\mu^- \leqslant \lambda_{n+1}^+$ dla wszystkich μ, więc

$$(y, Ay) \leqslant \lambda_{n+1}^+ \Big[\sum_{\nu=n+1}^{N} |c_\nu^+|^2 + \sum_{\mu=1}^{M} |c_\mu^-|^2 \Big].$$

Zgodnie więc z (9.16) mamy

$$(y, Ay) \leqslant \lambda_{n+1}^{+},$$

co kończy dowód dla dodatnich wartości własnych. Zupełnie podobnie dowodzi się drugą część twierdzenia. Nie udowodniliśmy, że $(y, Ay) = \lambda_{n+1}^{+}$ jedynie dla $y = x_{n+1}$; nie jest to na ogół prawdą, gdyż λ_{n+1}^{+} może mieć krotność $\mu > 1$. Przy szeregowaniu wartości własnych dana wartość własna i odpowiadające jej wektory własne występują tyle razy, ile tego wymaga krotność μ.

Powyższe twierdzenie uogólnia do nieskończenie wymiarowej przestrzeni wyniki paragrafu 4.8 uzyskane dla przestrzeni o skończonej liczbie wymiarów. Widzimy więc, że dla zwartych operatorów hermitowskich wyniki uzyskane dla przestrzeni skończenie wymiarowej przenoszą się w identycznej niemal postaci do przestrzeni o nieskończonej liczbie wymiarów. Skoro już znamy zupełny układ ortonormalnych funkcji własnych dla operatora A, nie przedstawia żadnych trudności skonstruowanie operatorów rzutowych $E(\lambda)$ wprowadzonych w paragrafie 5.11 i napisanie rozkładu spektralnego dla samosprzężonego zwartego operatora

$$A = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \lambda \, dE(\lambda),$$

gdzie $E(\lambda)$ jest rozkładem jedności należącym do A. Tak więc dla szczególnej klasy samosprzężonych operatorów w przestrzeni Hilberta udowodniliśmy *twierdzenie spektralne.* Jednakże operatory samosprzężone nie są bynajmniej zawsze operatorami zwartymi. Nawet dla ograniczonych operatorów samosprzężonych pojawiają się problemy, które nie pozwalają dojść do twierdzenia spektralnego w powyższy sposób. Omówmy krótko jedną z możliwych komplikacji.

Rozpatrzmy ograniczony operator hermitowski X zdefiniowany następująco:

$$Xf(x) \equiv xf(x)$$

dla wszystkich $f \in L_2[0, 1]$, gdzie $L_2[0, 1]$ jest przestrzenią Hilberta funkcji całkowalnych w kwadracie określonych na odcinku $[0, 1]$. Ponieważ $x \in [0, 1]$, więc oczywiście operator X jest ograniczony. Jednakże X nie jest operatorem zwartym. Ponadto operator X nie ma funkcji własnych, gdyż równanie

$$xf(x) = \lambda f(x)$$

nie da się rozwiązać w klasie zwyczajnych funkcji. Oczywiście można znaleźć „niezwyczajne" funkcje własne, a mianowicie $\delta(x-x_0)$, tzn. można napisać

$$x\delta(x-x_0) = x_0\delta(x-x_0)$$

i powiedzieć, że $\delta(x-x_0)$ jest funkcją własną operatora X z wartością własną x_0. Jest to prawdą dla dowolnego $x_0 \in [0, 1]$. Niestety $\delta(x-x_0)$ nie jest funkcją w zwykłym tego słowa znaczeniu, a ponadto

$$\int_0^1 |\delta(x-x_0)|^2 dx = \infty,$$

jeśli $x_0 \in [0, 1]$, tak więc $\delta(x-x_0)$ nie jest nawet całkowalna w kwadracie. Jednakże funkcja δ sugeruje następującą możliwość. Weźmy dowolny punkt $x_0 \in [0, 1]$. Możemy łatwo

skonstruować ciąg funkcji, które w sensie równania 9.6 można nazwać „przybliżonymi" funkcjami własnymi. Definiujemy

$$\phi_{x_0}^{(N)}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{N}{2}}, & \text{jeśli } 0 \leqslant x_0 - \frac{1}{N} \leqslant x \leqslant x_0 + \frac{1}{N} \leqslant 1, \\ 0 & \text{dla pozostałych } x, \end{cases}$$

przy czym zachodzi oczywiście $(\phi_{x_0}^{(N)}, \phi_{x_0}^{(N)}) = 1$. Kwadrat funkcji $\phi_{x_0}^{N}$ przypomina funkcję δ, kiedy N jest duże. Prosty rachunek przekonuje nas, że

$$||X\phi_{x_0}^{(N)} - x_0\phi_{x_0}^{(N)}|| = ||(x-x_0)\phi_{x_0}^{(N)}|| = \frac{1}{3N^2},$$

a więc

$$||X\phi_{x_0}^{(N)} - x_0\phi_{x_0}^{(N)}|| \to 0$$

przy $N \to \infty$. A więc zbiór $\{\phi_{x_0}^{(N)}\}$ może być traktowany jako zbiór „przybliżonych" funkcji własnych o wartościach własnych x_0, gdyż dla dowolnego ε, niezależnie od tego jak małego, możemy znaleźć takie N, by $\phi_{x_0}^{(N)}$ spełniało

$$||X\phi_{x_0}^{(N)} - x_0\phi_{x_0}^{(N)}|| < \varepsilon.$$

Niestety ciąg $\{\phi_{x_0}^{(N)}\}$ nie jest ciągiem Cauchy'ego, gdyż

$$||\phi_{x_0}^{(N)} - \phi_{x_0}^{(M)}|| = 2(1-\sqrt{M/N})$$

(przyjęliśmy, że $N \geqslant M$), a zatem ciąg ten nie zbiega do żadnego elementu $L_2[0, 1]$. Reasumując, możemy powiedzieć, że dla każdego $x_0 \in [0, 1]$ mamy „przybliżone" funkcje własne o wartościach własnych x_0, ale nie istnieją prawdziwe funkcje własne. To właśnie trudności tego typu powodują, że pojęcie funkcji własnej i wartości własnej musi być odrzucone przy formułowaniu twierdzenia spektralnego dla najogólniejszego typu operatorów samosprzężonych.

9.2. RÓWNANIA LINIOWE I TEORIA ZABURZEŃ

Skoro już dysponujemy własnością zupełności i zasadą minimum–maksimum dla zwartych operatorów samosprzężonych, możemy przejść do problemu rachunku zaburzeń i równań liniowych. Zacznijmy od podstawowego problemu rozwiązania równania o postaci

$$x = y + \lambda Ax, \tag{9.17}$$

gdzie A jest zwartym operatorem samosprzężonym. Niech $\{x_i\}$ oznacza zupełny układ wektorów własnych operatora A z odpowiadającymi im wartościami własnymi λ_i. Biorąc iloczyn skalarny obu stron równania 9.17 z wektorem x_i dostajemy

$$(x_i, x) = (x_i, y) + \lambda(x_i, Ax) = (x_i, y) + \lambda\lambda_i(x_i, x),$$

a zatem

$$(1-\lambda\lambda_i)(x_i, x) = (x_i, y). \tag{9.18}$$

Jeżeli λ nie jest odwrotnością żadnej z wartości własnych operatora A, to wtedy

$$(x_i, x) = \frac{(x_i, y)}{(1-\lambda\lambda_i)}. \tag{9.19}$$

Jeśli $\lambda = \lambda_\nu^{-1}$, to wtedy równanie (9.18) jest dobrze określone dla $i = \nu$ jedynie wtedy, gdy $(x_\nu, y) = 0$, ale wtedy wielkość (x_ν, x) pozostaje nieokreślona. Jeśli λ_ν ma więcej niż jeden odpowiadający jej wektor własny, to rozwiązanie istnieje tylko wtedy, gdy y jest ortogonalne do każdego z tych wektorów.

Ponieważ

$$\phi \doteq \sum_{n=1}^{\infty} x_n(x_n, \phi)$$

w sensie zbieżności średniej, więc równanie (9.19) mówi nam, że

$$x \doteq \sum_{i=1}^{\infty} (1-\lambda\lambda_i)^{-1}(x_i, y)x_i, \tag{9.20}$$

o ile tylko λ nie jest odwrotnością żadnej z wartości własnych λ_i. Korzystając z tożsamości

$$(1-\lambda\lambda_i)^{-1} = 1+\lambda\lambda_i(1-\lambda\lambda_i)^{-1}$$

wygodnie jest przepisać wynik (9.20) w postaci

$$x \doteq \sum_{i=1}^{\infty}(x_i, y)x_i + \lambda \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i}{1-\lambda\lambda_i}(x_i, y)x_i.$$

Stąd mamy

$$x \doteq y + \lambda R_A y, \tag{9.21}$$

gdzie dla dowolnego $\xi \in H$ rezolwenta R_A operatora A jest zdefiniowana następująco:

$$R_A\xi \equiv \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i}{1-\lambda\lambda_i}(x_i, \xi)x_i. \tag{9.22}$$

Zauważmy, że R_A jest operatorem samosprzężonym, a suma (9.22) istnieje w sensie zbieżności średniej, ponieważ $\lambda_i/(1-\lambda\lambda_i)$ jest ograniczone ($\lambda_i \to 0$, $\lambda \neq 1/\lambda_i$ dla dowolnego i), a zatem ciąg sum częściowych jest ciągiem Cauchy'ego. Możemy nawet powiedzieć, że ciąg operatorowych sum częściowych $\{R_A^{(N)}\}$, gdzie

$$R_A^{(N)}\xi \equiv \sum_{i=1}^{N} \frac{\lambda_i}{1-\lambda\lambda_i}(x_i, \xi)x_i,$$

jest zbieżny w sensie normy do operatora R_A, gdyż

$$||R_A - R_A^{(N)}\xi|| =$$

$$= \left[\sum_{i=N+1}^{\infty} \frac{\lambda_i^2}{(1-\lambda\lambda_i)^2}|(x_i, \xi)|^2\right]^{1/2} \leqslant \frac{|\lambda_{N+1}|}{\Delta_{\min}}\left[\sum_{i=N+1}^{\infty}|(x_i, \xi)|^2\right]^{1/2}$$

oraz $\Delta_{\min}$ jest minimalną wartością wyrażenia $|1-\lambda\lambda_i|$ na zbiorze wszystkich wartości własnych operatora A, a wartości własne są uszeregowane według malejących wartości. Następnie mamy, że

$$\sum_{i=N+1}^{\infty}|(x_i, \xi)|^2 \leqslant ||\xi||,$$

a więc

$$\|(R_A - R_A^{(N)})\xi\| \leqslant \frac{|\lambda_{N+1}|}{\Delta_{\min}} \|\xi\|.$$

Ponieważ $\lambda_{N+1} \to 0$ przy $N \to \infty$, zatem $\|R_A - R_A^{(N)}\| \to 0$, gdy $N \to \infty$. Z wyniku tego oraz z tego, że operatory $R_A^{(N)}$ jako operatory skończonego rzędu są zwarte, wyciągamy na podstawie twierdzenia 8.3 wniosek, że R_A jest również operatorem zwartym. Wnioski te podsumowuje następujące twierdzenie:

Twierdzenie 9.6. Niech A będzie zwartym operatorem samosprzężonym w przestrzeni Hilberta H. Jeśli λ nie jest równa odwrotności którejś wartości własnej operatora A, to istnieje operator $(I-\lambda A)^{-1}$ i dany jest on wyrażeniem

$$(I-\lambda A)^{-1} = I + \lambda R_A, \tag{9.23}$$

gdzie R_A jest zwartym operatorem hermitowskim zdefiniowanym dla dowolnego $\xi \in H$ następująco:

$$R_A \xi \equiv \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i}{1-\lambda\lambda_i}(x_i, \xi)x_i. \tag{9.24}$$

Nieskończona suma jest określona w sensie zbieżności średniej oraz x_i jest zbiorem wszystkich wektorów własnych operatora A.

Przypuśćmy teraz, że $\lambda = 1/\lambda_\nu$. Zgodnie z naszymi poprzednimi wynikami

$$x = \tilde{x} + \sum_{i=1}^{\infty}{}' \frac{\lambda_i}{1-\lambda\lambda_i}(x_i, y)x_i$$

jest rozwiązaniem równania $x = y + \lambda A x$, wtedy i tylko wtedy gdy y jest ortogonalny do każdego wektora własnego należącego do wartości własnej λ_ν. Znak „prim" przy sumie oznacza, że wektory własne należące do λ_ν powinny być opuszczone, a $\tilde{x}$ jest dowolną kombinacją liniową wektorów własnych należących do λ_ν. Zauważmy, że warunek, by y było ortogonalne do każdego wektora własnego należącego do λ_ν, jest równoważny żądaniu, aby y było ortogonalne do każdego z liniowo niezależnych rozwiązań równania

$$A\xi = \lambda_\nu \xi$$

lub też $A^\dagger \xi = \lambda_\nu \xi$, ponieważ A jest operatorem samosprzężonym.

Podobnie jak dla operatorów skończonego rzędu możemy zebrać wszystkie nasze wyniki w postaci twierdzenia.

Twierdzenie 9.7. Dla dowolnego zwartego operatora hermitowskiego zachodzi alternatywa Fredholma.

Należy je porównać z twierdzeniem 8.1 i dwoma wnioskami zeń wynikającymi udowodnionymi dla dowolnych odwzorowań skończonego rzędu.

Twierdzenie 9.6 daje nam również przykład sytuacji, w której metoda naszkicowana w paragrafie 7.2 w sposób nieścisły może być wykorzystana do otrzymania funkcji Greena operatora A. W terminologii ostatniego rozdziału, funkcją Greena operatora $(I-\lambda A)$ jest operator $(I+\lambda R_A)$; można się o tym przekonać na podstawie równania (9.23). Należy również podkreślić raz jeszcze, że R_A zdefiniowane równością (9.24) jest meromorficzną funkcją zmiennej λ z biegunami położonymi w punktach $\lambda = 1/\lambda_i$.

Niestety w większości wypadków, kiedy napotykamy na równanie liniowe typu (9.17), nie jesteśmy w tak szczęśliwym położeniu, by znać wszystkie wektory własne i wartości własne operatora A, a zatem wzory (9.21) i (9.22) są często mało przydatne. Jednakże wyniki twierdzenia 8.4 sugerują, że może być często możliwe rozbicie A na dwie części $A = A_0 + A_1$, gdzie A_1 jest „małym" operatorem w tym sensie, że $||A_1|| \ll ||A_0||$, a operator A_0 jest na tyle prosty, że można wyznaczyć dla niego i wektory, i wartości własne. Zanim jednak wgłębimy się w dokładniejsze rachunki, należy koniecznie się upewnić, że dodanie „małego" operatora A_1 do A_0 nie wpłynie zasadniczo na widmo A_0, gdyż jest oczywiste, że widmo operatora A_0 i A będzie odgrywało decydującą rolę we wszystkich rozważaniach. W tym kontekście bardzo zachęcający jest fakt, że dla operatorów zwartych A, A_0 i A_1 zachodzi twierdzenie mówiące, że wraz z normą $||A_1||$ dążącą do zera wartości własne A_0 dążą do wartości własnych operatora A.

Twierdzenie 9.8. Jeżeli $A = A_0 + A_1$ oraz A, A_0, A_1 są zwartymi operatorami hermitowskimi, to mamy zawsze

$$\lambda_n^{(0)} - ||A_1|| \leqslant \lambda_n \leqslant \lambda_n^{(0)} + ||A_1||,$$

gdzie $\lambda_n^{(0)}$ i λ_n są n-tymi wartościami własnymi odpowiednio operatora A_0 i A.

Dowód. Rozpatrzmy najpierw $\lambda_n^{(0)+}$. Niech C będzie zbiorem wszystkich $y \in H$ takich, że $||y|| = 1$ oraz $(y, x_i^{(0)+}) = 0$ dla $i = 1, 2, \ldots, n-1$, gdzie $x_i^{(0)+}$ oznacza wektor własny A_0 z dodatnią wartością własną $\lambda_i^{(0)+}$. Ponieważ mamy

$$\sup_{y \in C}(y, Ay) = \sup_{y \in C}[(y, A_0 y) + (y, A_1 y)] \leqslant \sup_{y \in C}(y, A_0 y) + \sup_{y \in C}|(y, A_1 y)|,$$

to na mocy twierdzeń 9.1 i 9.5

$$\sup_{y \in C}(y, A_0 y) = \lambda_n^{(0)+},$$

$$\sup_{y \in C}|(y, A_1 y)| \leqslant ||A_1||,$$

a więc

$$\sup_{y \in C}(y, Ay) \leqslant \lambda_n^{(0)+} + ||A_1||. \tag{9.25}$$

Człon po lewej stronie tego równania jest bardzo podobny do wielkości λ_n^+, ale faktycznie nie jest jej równy, gdyż y musi być ortogonalne do $n-1$ wektorów własnych operatora A_0, a nie do $n-1$ wektorów własnych operatora A. Jest jednak jasne, że wielkość ta jest większa lub równa λ_n^+, gdyż możemy znaleźć znormalizowaną kombinację liniową pierwszych n wektorów własnych należącą do C (tzn. ortogonalną do pierwszych $n-1$ wektorów własnych A_0). Dla takiego wektora, nazwijmy go η, mamy na pewno $(\eta, A\eta) \geqslant \lambda_n^+$, a więc

$$\sup_{y \in C}(y, Ay) \geqslant \lambda_n^+.$$

Wracając do nierówności (9.25) mamy

$$\lambda_n^+ \leqslant \lambda_n^{(0)+} + ||A_1||.$$

Aby dowieść drugą połowę nierówności, rozpatrzymy zbiór D wszystkich y takich, że $||y|| = 1$ oraz $(y, x_i^+) = 0$ dla $i = 1, 2, \ldots, n-1$. Mamy wtedy

$$\sup_{y \in D}(y, A_0 y) = \sup_{y \in D}[(y, Ay) - (y, A_1 y)] \leqslant \sup_{y \in D}(y, Ay) + \sup_{y \in D}|(y, A_1 y)|.$$

Ale z definicji D

$$\sup_{y\in D}(y, Ay) = \lambda_n^+, \quad \text{a więc} \quad \sup_{y\in D}(y, A_0 y) \leqslant \lambda_n^+ + ||A_1||.$$

Zgodnie z poprzednimi argumentami mamy

$$\sup_{y\in D}(y, A_0 y) \geqslant \lambda_n^{(0)+}.$$

Stąd

$$\lambda_n^{(0)+} \leqslant \lambda_n^+ + ||A_1|| \quad \text{lub} \quad \lambda_n^{(0)+} - ||A_1|| \leqslant \lambda_n^+,$$

co kończy dowód dla λ_n^+. Przypadek λ_n^- dowodzi się w sposób całkowicie analogiczny.

Kiedy już przekonaliśmy się o stabilności widma zwartych operatorów hermitowskich pod wpływem małego zaburzenia, zbadajmy *perturbacyjne* podejście do rozwiązywania równań liniowych. Dzielimy A na dwie części

$$A = A_0 + A_1$$

tak, by $||A_1||$ było bardzo małe. Równanie (9.17) przepisujemy w postaci

$$x = y + \lambda A_0 x + \lambda A_1 x,$$

lub też w bardziej sugestywnej postaci

$$(I - \lambda A_0 x) = y + \lambda A_1 x.$$

Zgodnie z wynikiem (9.21), o ile λ^{-1} nie pokrywa się z wartością własną A_0, mamy

$$x = y + \lambda A_1 x + \lambda R_{A_0}(y + \lambda A_1 x)$$

lub w innej formie

$$x = y + \lambda R_{A_0} y + \lambda(A_1 + \lambda R_{A_0} A_1)x. \tag{9.26}$$

Dostaliśmy więc nowe równanie liniowe, ale teraz występujący w tym równaniu operator ma małą normę, gdyż z założenia $||A_1||$ jest małe. Zakładaliśmy cały czas, że λ^{-1} nie jest wartością własną operatora A_0. Wiemy jednakże, że wraz z $||A_1|| \to 0$ wartości własne A_0 są coraz bliższe wartościom własnym operatora A. W tej granicy można równoważnie założyć, że λ^{-1} nie jest wartością własną A. W miarę jak norma $||A_1||$ staje się coraz mniejsza, również norma $||A_1 + \lambda R_{A_0} A_1||$ staje się coraz mniejsza, tak że $|\lambda| \cdot ||A_1 + \lambda R_{A_0} A_1|| < 1$ i równanie (9.26) można rozwiązać przy pomocy szeregu Neumanna. A więc w granicy $||A_1|| \to 0$ zachodzi

$$x \to y + \lambda R_{A_0} y,$$

o ile λ nie jest wartością własną operatora A. Z twierdzenia 8.4 wiemy, że zawsze można przybliżać A w sensie normy operatora przez odwzorowanie skończonego rzędu. Można więc problem wyjściowy sprowadzić zgodnie z wynikami paragrafu 8.6 w szczególności z równaniem (8.88) do problemu macierzowego bez znajomości funkcji własnych operatora A. Jeśli A jest operatorem całkowym, to metoda przybliżeń będzie polegać na zastąpieniu jądra przez szereg funkcji schodkowych — zajmiemy się tym dokładniej w następnym paragrafie.

Przejdźmy teraz do problemu wartości własnych. Dla wygody zapiszmy A w postaci

$$A = A_0 + \varepsilon A_1,$$

gdzie dodaliśmy współczynnik ε do operatora A_1 dla podkreślenia faktu, że ten człon będzie mały w sensie normy. O operatorach A, A_0, A_1 zakładamy, że są zwarte i hermitowskie. Rozpatrzmy problem wartości własnych

$$Ax_n \equiv (A_0+\varepsilon A_1)x_n = \lambda_n x_n \tag{9.27}$$

albo zakładając, że $\lambda_n \neq 0$,

$$\left(I - \frac{1}{\lambda_n} A_0\right) x_n = \frac{1}{\lambda_n} \varepsilon A_1 x_n .$$

Z dotychczasowych rozważań wiemy, że to liniowe równanie z niejednorodnością postaci $\varepsilon A_1 x_n/\lambda_n$ można rozwiązać pisząc

$$x_n = \left(I - \frac{1}{\lambda_n} A_0\right)^{-1} \frac{1}{\lambda_n} \varepsilon A_1 x_n .$$

Korzystając z (9.23) i (9.24) można to przepisać w postaci

$$x_n = \sum_{m=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\lambda_m^{(0)}}{\lambda_n}\right)^{-1} \frac{1}{\lambda_n} \varepsilon (x_m^{(0)}, A_1 x_n) x_m^{(0)} = \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty} (\lambda_n - \lambda_m^{(0)})^{-1} (x_m^{(0)}, A_1 x_n) x_m^{(0)}, \tag{9.28}$$

gdzie $x_m^{(0)}$ są wektorami własnymi operatora A_0, zaś $\lambda_m^{(0)}$ są odpowiadającymi im wartościami własnymi. Zakładamy, że λ_n nie równa się żadnej z wartości własnych A_0. Kiedy $\varepsilon \|A_1\|$ jest dostatecznie małe, taka sytuacja zajdzie na pewno z wyjątkiem wartości własnej $\lambda_n^{(0)}$, która dąży do λ_n wraz z $\varepsilon \to 0$. Zakładamy również dla prostoty, że widmo operatora A_0 jest niezwyrodniałe. Mając powyższą trudność w pamięci wydzielmy osobno możliwy rozbieżny mianownik w równaniu (9.28)

$$x_n = \frac{(x_n^{(0)}, \varepsilon A_1 x_n)}{\lambda_n - \lambda_n^{(0)}} x_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n)}{\lambda_n - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)}, \tag{9.29}$$

gdzie „prim" w sumie oznacza, że człon z $m = n$ powinien być opuszczony. Równanie (9.29) wygląda bardzo podobnie do zwyczajnego niejednorodnego równania liniowego. Zanim przystąpimy do rozwiązywania tego równania przy pomocy poznanych metod, powinniśmy coś powiedzieć najpierw o mogącym sprawiać kłopoty współczynniku mnożącym człon $x_n^{(0)}$ w równaniu (9.29). Obliczając iloczyn skalarny obu stron równania (9.27) mnożonych przez $x_n^{(0)}$ i korzystając z faktu, że

$$A_0 x_n^{(0)} = \lambda_n^{(0)} x_n^{(0)}$$

dostajemy

$$(x_n^{(0)}, \varepsilon A_1 x_n) = (\lambda_n - \lambda_n^{(0)})(x_n^{(0)}, x_n). \tag{9.30}$$

Z równania tego odczytujemy, że $\lambda_n^{(0)} \to \lambda_n$ i $(x_n^{(0)}, \varepsilon A_1 x_n) \to 0$ w taki sposób, że

$$\frac{(x_n^{(0)}, \varepsilon A_1 x_n)}{\lambda_n - \lambda_n^{(0)}} = (x_n^{(0)}, x_n) < \infty .$$

Pozwala to przepisać równanie (9.29) w postaci

$$x_n = (x_n^{(0)}, x_n) x_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n)}{\lambda_n - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)} . \tag{9.31}$$

Iloczyn skalarny $(x_n^{(0)}, x_n)$ mógłby być równy zeru tylko w bardzo szczególnych okolicznościach, a na pewno nie jest to możliwe przy dostatecznie małym ε, gdyż inaczej

moglibyśmy dojść do sprzeczności. Przyjmijmy, że $(x_n^{(0)}, x_n) = 0$, to wtedy równanie (9.31) przyjmuje postać

$$x_n = \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n)}{\lambda_n - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)}.$$

Wynika z niego, że

$$||x_n|| = \varepsilon \left[\sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{|(x_m^{(0)}, A_1 x_n)|^2}{(\lambda_n - \lambda_m^{(0)})^2} \right]^{1/2} \leqslant \frac{\varepsilon}{\Delta_n} \left[\sum_{m=1}^{\infty}{}' |(x_m^{(0)}, A_1 x_n)|^2 \right]^{1/2},$$

gdzie Δ_n jest minimalną wartością $|\lambda_n - \lambda_m^{(0)}|$, gdy $\lambda_m^{(0)}$ przebiega wszystkie wartości własne A_0 z wyjątkiem wartości $\lambda_n^{(0)}$. Dla dostatecznie małych ε wartość Δ_n dąży do liczby niezależnej od ε. Z warunku zupełności dostajemy

$$||x_n|| \leqslant \frac{\varepsilon}{\Delta_n} (A_1 x_n, A_1 x_n)^{1/2} = \frac{\varepsilon}{\Delta_n} ||A_1 x_n||,$$

a więc

$$||x_n|| \leqslant \frac{\varepsilon ||A_1||}{\Delta_n} ||x_n|| \quad \text{lub} \quad 1 \leqslant \frac{\varepsilon ||A_1||}{\Delta_n}.$$

Dla dostatecznie małych ε ostatnia nierówność jest na pewno sprzeczna.

Ponieważ równanie na x_n jest jednorodne, więc x_n może być wyznaczone co najwyżej z dokładnością do dowolnej stałej multiplikatywnej; przyjmując $(x_n^{(0)}, x_n) = 1$ ustalamy tę stałą w wygodny sposób. Przy takiej normalizacji równanie (9.31) przyjmuje prostszą postać

$$x_n = x_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n)}{\lambda_n - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)}. \tag{9.32}$$

Również zgodnie z równaniem (9.30)

$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} + \varepsilon (x_n^{(0)}, A_1 x_n). \tag{9.33}$$

Równania (9.32) i (9.33) są punktem wyjścia do perturbacyjnego badania widm zwartych operatorów hermitowskich.

Oczywiście najbardziej obiecującym podejściem do rozwiązania tych równań w przypadku małego, lecz skończonego $\varepsilon ||A_1||$ wydaje się metoda iteracji. Będziemy jednak musieli wprowadzić tu pewne modyfikacje w porównaniu z paragrafami 8.1 i 8.3, gdyż operator po prawej stronie równania (9.32) zawiera nieznaną wielkość λ_n. Z drugiej jednak strony dysponujemy równaniem (9.33) na wielkość λ_n zawierającym z kolei nieznany wektor x_n. Mamy więc do czynienia z parą sprzężonych równań nieliniowych na x_n i λ_n. Przekonaliśmy się, że norma operatora po prawej stronie równania (9.32) jest równa lub mniejsza od $\varepsilon ||A_1||/\Delta_n$. Jeśli ta wielkość jest mniejsza niż 1, to możemy iterować równania (9.32) otrzymując

$$x_n = x_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{\lambda_n - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)} +$$

$$+ \varepsilon^2 \sum_{l=1}^{\infty}{}' \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_l^{(0)})(x_l^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{(\lambda_n - \lambda_m^{(0)})(\lambda_n - \lambda_l^{(0)})} x_m^{(0)} + \ldots . \tag{9.34}$$

Po obliczeniu x_n z wystarczającą dokładnością wstawimy równanie (9.34) do równania (9.33) dostając równanie na λ_n. Na ogół równanie to będzie niezmiernie skomplikowane.

Inna możliwość rozwiązania może polegać na podstawieniu równania (9.33) do równania (9.34). Otrzymujemy w ten sposób

$$x_n = x_n^{(0)} + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}) x_m^{(0)}}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)} + \varepsilon (x_n^{(0)}, A_1 x_n)} +$$

$$+ \varepsilon^2 \sum_{m=1}^{\infty}{}' \sum_{l=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_l^{(0)}) (x_l^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{[\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)} + \varepsilon (x_n^{(0)}, A_1 x_n)][\lambda_n^{(0)} - \lambda_l^{(0)} + \varepsilon (x_n^{(0)}, A_1 x_n)]} x_m^{(0)} + \ldots . \tag{9.35}$$

Jeśli $\varepsilon ||A_1||$ jest na tyle małe, że

$$\left| \frac{\varepsilon (x_n^{(0)}, A_1 x_n)}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} \right| < 1 \tag{9.36}$$

dla wszystkich $m \neq n$, to możemy każdy z mianowników występujących w równaniu (9.35) rozwinąć w szereg potęgowy względem potęgi ε w sposób następujący:

$$[\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)} + \varepsilon (x_n^{(0)}, A_1 x_n)]^{-1} = (\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)})^{-1} \sum_{\mu=0}^{\infty} (-1)^{\mu} \varepsilon^{\mu} \frac{(x_n^{(0)}, A_1 x_n)^{\mu}}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)})^{\mu}} . \tag{9.37}$$

Wstawiając to do (9.35) dostajemy dla kilku pierwszych członów połączonego szeregu iteracyjnego i rozwinięcia mianowników

$$x_n = x_n^{(0)} + \sum_{m=1}^{\infty}{}' \sum_{\mu=0}^{\infty} (-1)^{\mu} \varepsilon^{\mu+1} \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{[\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}]^{\mu+1}} (x_n^{(0)}, A_1 x_n)^{\mu} x_m^{(0)} +$$

$$+ \sum_{m=1}^{\infty}{}' \sum_{l=1}^{\infty}{}' \sum_{\mu=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^{\mu+\nu} \varepsilon^{\mu+\nu+2} \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_l^{(0)}) (x_l^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{[\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}]^{\mu+1} [\lambda_n^{(0)} - \lambda_l^{(0)}]^{\nu+1}} (x_n^{(0)}, A_1 x_n)^{\mu+\nu} x_m^{(0)} + \ldots . \tag{9.38}$$

Jeśli ε jest dostatecznie małe, dostajemy zbieżny szereg potęgowy dla x_n pisząc

$$x_n = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l f_n^{(l)} \tag{9.39}$$

i wstawiając to wyrażenie do obu stron równania (9.38) oraz porównując współczynniki przy tych samych potęgach ε, wtedy możemy wyznaczyć kolejne $f_n^{(l)}$

$$f_n^{(0)} = x_n^{(0)},$$

$$f_n^{(1)} = \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)},$$

i

$$f_n^{(2)} = \sum_{m=1}^{\infty}{}' \sum_{l=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_l^{(0)}) (x_l^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}) (\lambda_n^{(0)} - \lambda_l^{(0)})} x_m^{(0)} -$$

$$- (x_n^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}) \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{(\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)})^2} x_m^{(0)} . \tag{9.40}$$

Wstawiając te wartości do równania (9.39) otrzymujemy wyrażenie na x_n z dokładnością do ε^2. Mając ten wynik możemy skorzystać z równania (9.33) do obliczenia λ_n z dokładnością do ε^3. Wartości własne λ_n mogą być również przedstawione w postaci szeregu potęgowego, którego pierwszym członem jest $\lambda_n^{(0)}$. Mamy

$$\lambda_n = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l \lambda_n^{(l)}. \tag{9.41}$$

Korzystając z postaci x_n danej równaniami (9.39) i (9.40) znajdujemy

$$\lambda_n^{(1)} = (x_n^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}), \qquad \lambda_n^{(2)} = \sum_{m=1}^{\infty}{}' \frac{|(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})|^2}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} \tag{9.42}$$

i podobnie dla członów wyższych rzędów.

Wyniki te zgadzają się dokładnie z wynikami otrzymanymi w teorii zaburzeń Rayleigha–Schrödingera (paragraf 4.11). Udało się nam uzasadnić więc teorię zaburzeń Rayleigha-Schrödingera, przynajmniej dla przypadku bez degeneracji. Pokazaliśmy ponadto, że jeśli ε jest dostatecznie małe, to szereg perturbacyjny dla x_n jest zbieżny. Trudno jest podać dokładniejsze kryterium zbieżności, ale jest dość oczywiste na podstawie powyższych rozważań, że jeśli różnica między $\lambda_n^{(0)}$ i najbliższą wartością własną A_0 jest dużo większa co do wartości bezwzględnej od $(\lambda_n - \lambda_n^{(0)})$, to metoda ta ma duże szanse być zbieżną. Kryterium powyższe, mimo że nie jest ścisłe, często jest bardzo użyteczne w praktyce.

Wyniki zawarte w równaniach (9.39), (9.40), (9.41) i (9.42) są o tyle niedogodne, że wymagają znajomości wszystkich wektorów własnych i wszystkich wartości własnych operatora A_0. Istnieje parę sposobów ominięcia tej trudności. Jedna z nich opiera się na udowodnionym istnieniu szeregu potęgowego dla λ_n i x_n; zakładając takie rozwinięcie szuka się sprzężonych równań na wektory $f_n^{(l)}$ i liczby $\lambda_n^{(l)}$ tak, jak to zrobiono w paragrafie 4.11. W ten sposób otrzymuje się na przykład

$$\begin{aligned}
(A_0 - \lambda_n^{(0)}) f_n^{(1)} &= -(A_1 - \lambda_n^{(1)}) x_n^{(0)}, \\
(A_0 - \lambda_n^{(0)}) f_n^{(2)} &= -(A_1 - \lambda_n^{(1)}) f_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)} x_n^{(0)}, \\
(A_0 - \lambda_n^{(0)}) f_n^{(3)} &= -(A_1 - \lambda_n^{(1)}) f_n^{(2)} + \lambda_n^{(2)} f_n^{(1)} + \lambda_n^{(3)} x_n^{(0)}
\end{aligned} \tag{9.43}$$

itd., dokładnie tak jak w paragrafie 4.11. Równania te zawierają jedynie wartości $x_n^{(0)}$ i $\lambda_n^{(0)}$ jako punkt wyjścia, ponadto ma się do rozwiązania układ niejednorodnych równań. Układ tego rodzaju został dość szczegółowo omówiony w paragrafie 4.11.

Inne podejście polega na bezpośrednim zaatakowaniu operatora A korzystając z zasady maksimum i minimum zawartej w twierdzeniu 9.5. Wiedząc, że dla dowolnego $y \in H$, takiego że $||y|| = 1$, zachodzi

$$(y, Ay) \leqslant \lambda_1^+,$$

możemy brać „wektor próbny" y_t zawierający wiele parametrów, a następnie maksymalizować wartość (y_t, Ay_t) ze względu na te parametry przy spełnieniu warunku $||y_t|| = 1$. Jeśli parametry, względem których szukamy maksimum, wchodzą liniowo do wektora y_t, to okazuje się (patrz zad. 5), że dochodzimy w ten sposób do układu zwyczajnych równań liniowych na te parametry. Wprowadzając kolejno coraz więcej parametrów uzyskujemy

coraz większą wartość wyrażenia (y_t, Ay_t), ale nigdy nie możemy w ten sposób przekroczyć wartości λ_1^+. Jeśli funkcje próbne y_t wybrane są w racjonalny sposób, to bardzo szybko można otrzymać doskonałą aproksymację λ_1^+ oraz x_1^+ (czyli funkcję dającą dobre przybliżenie dla λ_1^+).

Jako przykład na zastosowanie tej metody rozpatrzymy równanie

$$Ax = \int_0^1 t_<(1-t_>)x(t')dt' = \lambda x(t),$$

gdzie A określone jest w przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie na odcinku $[0, 1]$. Wiemy już (patrz paragraf 7.1), że równanie to przy warunkach brzegowych $x_n(0) = 0 = x_n(1)$, ma następujące funkcje własne

$$x_n(t) = \sqrt{2}\sin(n\pi t)$$

i wartości własne

$$\lambda_n = 1/n^2\pi^2.$$

Najprostszą unormowaną funkcją próbną znikającą dla $t = 0$ i $t = 1$ jest

$$y_t(t) = \sqrt{30}\,t(1-t).$$

Jeśli obliczymy (y_t, Ay_t), dostaniemy

$$(y_t, Ay_t) = 17/168 = 0{,}10119,$$

co jest mniejsze od $1/\pi^2 = 0{,}10132$, ale nie o wiele! Tak więc przy najbardziej oczywistym wyborze funkcji próbnej dostajemy wynik niezwykle bliski wartości ścisłej. Nie trzeba chyba mówić, że w wielu problemach nie jesteśmy w tak szczęśliwym położeniu. Możemy również obliczyć wartość $||x_1^+ - y_t||$.

$$||x_1^+ - y_t|| = ||\sqrt{2}\sin(\pi t) - \sqrt{30}\,t(1-t)|| = [2(1-4\sqrt{60}/\pi^3]^{1/2} = 0{,}038,$$

a zatem y_t jest również dobrym przybliżeniem x_1^+ w sensie normy. Gdybyśmy wymagali jeszcze większej dokładności, to moglibyśmy wziąć funkcję próbną zawierającą kilka parametrów, na przykład

$$y_t = at(1-t) + bt^2(1-t)^2,$$

a następnie szukać maksimum wartości (y_t, Ay_t) ze względu na a i b przy warunku ubocznym $||y_t|| = 1$. W praktyce wygodnie jest uwzględnić warunek unormowania funkcji próbnej y_t przez wprowadzenie mnożnika Lagrange'a. Oczywiście $\lambda_2^+, \lambda_3^+, \ldots$ można obliczać w podobny sposób wprowadzając więcej warunków ubocznych zapewniających odpowiednie własności ortogonalności.

9.3. METODY PRZYBLIŻEŃ SKOŃCZONEGO RZĘDU DLA ZAGADNIEŃ WŁASNYCH

Dla większości konkretnych zagadnień fizycznych szanse otrzymania rozwiązania w skończonej, zwartej postaci są całkowicie nierealne. Stwierdzenie to jest szokujące dla kogoś, kto zapoznał się dotychczas jedynie z problemami typu atomu wodoru czy oscylatora harmonicznego, które zarówno w mechanice klasycznej, jak i kwantowej mają piękne, ścisłe rozwiązania. Sytuacja taka jest jednak w fizyce raczej wyjątkiem niż regułą,

mimo to wyjątkiem o wielkim znaczeniu, gdyż pozwala uzyskać wgląd w istotę rzeczy niezbędny dla zrozumienia bardziej złożonych problemów. W przypadku potencjału kulombowskiego wystarczy na przykład uwzględnić, że ładunek protonu nie jest ściśle punktowy, a ma pewien rozkład przestrzenny, by natychmiast pożegnać się ze ścisłym rozwiązaniem i być zmuszonym do jakiegoś postępowania przybliżonego. Jednakże we wspomnianym dopiero co problemie efekt skończonych rozmiarów protonu może być traktowany jako małe zaburzenie, można więc z powodzeniem stosować metody omówione w paragrafie 9.2. W tym paragrafie zajmiemy się innego typu problemami, a mianowicie takimi, dla których idea małego zaburzenia dobrze rozumianego układu fizycznego jest nieadekwatna. Dla rozwiązywania takich problemów będziemy zmuszeni stosować przybliżenie innego rodzaju, a mianowicie przybliżenie przez operatory skończonego rzędu, które omawialiśmy w paragrafie 8.7.

Chcemy więc rozpatrzyć zagadnienie własne w postaci równania (9.27) w przypadku, kiedy $\varepsilon||A_1||$ dąży do zera, to znaczy w przypadku, kiedy przybliżamy A niezwykle dokładnie przez A_0, w zasadzie dowolnie dokładnie (patrz twierdzenie 8.4). W tym przypadku zgodnie z wynikami ostatniego paragrafu

$$x_n^{(0)} \to x_n$$

i

$$\lambda_n^{(0)} \to \lambda_n.$$

Skupimy naszą uwagę na operatorze hermitowskim z jądrem $a(t, t')$, gdzie t i t' leżą w przedziale $[a, b]$. Z problemami takimi zetknęliśmy się już w rozdziale 7, kiedy dyskutowaliśmy całkowe równanie Schrödingera. Podstawowa idea, którą się posłużymy, będzie polegać na rozbiciu przedziału $[a, b]$ na N małych odcinków o długości $(b-a)/N$ i zdefiniowaniu zbioru funkcji ortogonalnych

$$\phi_n^{(N)}(t) = \begin{cases} 1, & a+\dfrac{n-1}{N}\,l \leqslant t \leqslant a+\dfrac{n}{N}\,l, \\ 0, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases}$$

gdzie $l = b-a$, zaś $n = 1, 2, \ldots, N$. Można w razie potrzeby unormować $\phi_n^{(N)}(t)$ do jedności mnożąc przez czynnik $(N/l)^{1/2}$. Mając taki zbiór funkcji możemy przy ich pomocy aproksymować każde jądro w L_2, a jeśli jądro jest określone na odcinku nieograniczonym, to obcinamy go zastępując przez zero, gdy t lub t' leżą na zewnątrz pewnego dużego, lecz skończonego odcinka. Sensowny punkt obcięcia można wybrać przyglądając się dokładniej postaci jądra. A zatem dla dowolnie małego ε możemy znaleźć takie N i takie jądro $a_N(t, t')$ zbudowane z funkcji $\phi_n^{(N)}$, by

$$||a(t, t')-a_N(t, t')|| < \varepsilon.$$

Operator odpowiadający jądru $a_N(t, t')$ nazwiemy A_N, więc mamy

$$||A-A_N|| < \varepsilon.$$

Zgodnie z twierdzeniem 9.8 wartości własne A_N dążą do wartości własnych operatora A, a zgodnie z równaniem (9.32) wektory własne operatora A_N dążą w sensie normy do wektorów własnych operatora A. Problem sprowadza się więc do rozwiązania równania

$$A_N x_n^{(0)}(t) = \lambda_n^{(0)} x_n^{(0)}(t) \tag{9.44}$$

dla dostatecznie dużego N. Przy pomocy $\phi_n^{(N)}$ jądro operatora A_N można przedstawić w postaci

$$a_N(t, t') = \sum_{\mu,\nu=1}^{N} M_{\mu\nu}\phi_\mu^{(N)}(t)\phi_\nu^{(N)}(t'), \tag{9.45}$$

gdzie

$$M_{\mu\nu} = (N/l)^2 \int dt \int dt' \phi_\mu^{(N)}(t)\phi_\nu^{(N)}(t')a(t, t'). \tag{9.46}$$

Dla prostoty założymy, że $a(t, t')$ jest rzeczywiste. Zauważmy, że $M_{\mu\nu}$ jest po prostu wartością średnią funkcji $a(t, t')$ w kwadracie $\mu\nu$ dwuwymiarowej siatki, na którą podzieliliśmy płaszczyznę tt'. Korzystając z wyrażenia (9.45) zapisujemy równanie (9.44) w postaci

$$\sum_{\mu,\nu=1}^{N} \phi_\mu^{(N)}(t)M_{\mu\nu} \int \phi_\nu^{(N)}(t')x_n^{(0)}(t')dt' = \lambda_n^{(0)}x_r^{(0)}(t).$$

Wprowadzając symbol

$$C_\nu^{(n)} \equiv N/l \int \phi_\nu^{(N)}(t')x_n^{(0)}(t')dt'$$

na oznaczenie wartości średniej funkcji $x_n^{(0)}$ na ν-tym odcinku przedziału $[a, b]$ możemy zapisać nasze równanie w taki sposób

$$\sum_{\mu,\nu=1}^{N} \phi_\mu^{(N)}(t)M_{\mu\nu}C_\nu^{(n)} \frac{l}{N} = \lambda_n^{(0)}x_n^{(0)}(t). \tag{9.47}$$

Zagadnienie sprowadziło się więc do rozwiązania równania (9.47) względem liczb $C_\nu^{(n)}$. Mnożąc obie strony równania (9.47) przez $\phi_{\nu'}^{(N)}(t)$ i całkując dostajemy

$$\frac{l}{N} \sum_{\nu=1}^{N} M_{\nu'\nu}C_\nu^n = \lambda_n^{(0)}C_{\nu'}^{(n)} \tag{9.48}$$

dla $\nu' = 1, 2, \ldots, N$. Równanie (9.48) sprowadza więc nasz problem do zagadnienia własnego dla skończenie wymiarowej macierzy M. Rozwiązując równanie (9.48) względem $\lambda_n^{(0)}$ i $C_\nu^{(n)}$ ($\nu = 1, 2, \ldots, N$) możemy na podstawie równania (9.47) podać wektory własne $x_n^{(0)}(t)$ w następującej postaci

$$x_n^{(0)}(t) = \sum_{\nu=1}^{N} C_\nu^{(n)}\phi_\nu^{(N)}(t). \tag{9.49}$$

Istotę tego wyniku można zrozumieć w prosty sposób rozpatrując równanie

$$Ax_n = \lambda_n x_n = \int_a^b a(t, t')x_n(t')dt'$$

z punktu widzenia prostej teorii całki Riemanna. Jeśli podzielimy przedział całkowania na N części, każda o długości l/N, gdzie l jest długością przedziału, to równanie nasze można przepisać w postaci

$$\sum_{\nu=1}^{N} a(t, t_\nu)x_n(t_\nu)\left(\frac{l}{N}\right) = \lambda_n x_n(t),$$

gdzie t_ν jest pewnym punktem wewnątrz ν-tego przedziału. Jeśli N jest dostatecznie duże, wyrażenie to będzie dowolnie dokładnie aproksymować początkową całkę, o ile występujące funkcje są ciągłe, a zatem

$$\sum_{\nu=1}^{N} a(t_{\nu'}, t_\nu) x_n(t_\nu)\left(\frac{l}{N}\right) = \lambda_n x_n(t_{\nu'}).$$

Definiując

$$\tilde{M}_{\nu'\nu} \equiv a(t_{\nu'}, t_\nu), \qquad \tilde{C}_\nu^{(n)} \equiv x_n(t_\nu)$$

dostajemy po prostu

$$\frac{l}{N} \sum_{\nu=1}^{N} \tilde{M}_{\nu'\nu} \tilde{C}_\nu^{(n)} = \lambda_n \tilde{C}_{\nu'}^{(n)}, \tag{9.50}$$

co jest bardzo bliskie równaniu (9.48). A zatem podstawowa idea praktycznego rozwiązywania równań całkowych nie jest bardziej skomplikowana od podstawowej idei zawartej w obliczaniu całki Riemanna.

Gdy $\|A_1\| \ll 1$, to przybliżone wartości własne operatora A są dane wzorem (9.48), a odpowiednie wektory własne wzorami (9.48) i (9.49). Aby oszacować rozmiary popełnionego błędu w tym przybliżeniu, możemy zastosować wyniki teorii zaburzeń zawarte we wzorach (9.39), (9.40), (9.41) i (9.42). W związku z tym szczególnie ważny jest fakt, że jeśli $x_m^{(0)}$ i $x_n^{(0)}$ są dowolnymi przybliżonymi rozwiązaniami o postaci

$$x_m^{(0)} = \sum_{\nu=1}^{N} C_\nu^{(m)} \phi_\nu^{(N)}, \qquad x_n^{(0)} = \sum_{\nu=1}^{N} C_\nu^{(n)} \phi_\nu^{(N)}, \tag{9.51}$$

to wtedy

$$(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}) = (x_m^{(0)}, (A - A_N) x_n^{(0)}) = 0, \tag{9.52}$$

co znacznie upraszcza wyniki teorii zaburzeń. Rzeczywiście, na pierwszy rzut oka może się nawet wydawać, że jest to uproszczenie zbyt daleko idące, a mianowicie że oznacza ono, iż

$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} \quad \text{oraz} \quad x_n = x_n^{(0)},$$

gdyż wszystkie człony wnoszące wkład do $f_n^{(1)}, f_n^{(2)}, \ldots$ itd. we wzorze (9.40) oraz do $\lambda_n^{(1)}, \lambda_n^{(2)}, \ldots$ itd. we wzorze (9.42) wydają się znikać. Jednakże nie jest to prawdą. Wektory postaci (9.51) nie są jedynymi wektorami własnymi operatora A_N. Dowolny wektor ortogonalny do wszystkich N wektorów $\phi_n^{(N)}$ jest wektorem własnym operatora A_N z wartością własną zero. Istnieje nieskończenie wiele takich wektorów, a my nie wyznaczyliśmy ani jednego z nich. Jeśli umówimy się oznaczać te wektory wskaźnikami zaczynającymi się od $N+1$, tzn. $x_{N+1}^{(0)}, x_{N+2}^{(0)}, \ldots$, to poprawki do x_n i λ_n można przedstawić w postaci

$$\begin{aligned} x_n &= x_n^{(0)} + \frac{1}{\lambda_n^{(0)}} \sum_{\nu=N+1}^{\infty} (x_\nu^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}) x_n^{(0)} + \ldots, \\ \lambda_n &= \lambda_n^{(0)} + \frac{1}{\lambda_n^{(0)}} \sum_{\nu=N+1}^{\infty} |(x_\nu^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})|^2 + \ldots. \end{aligned} \tag{9.53}$$

Ponieważ $A_0 x_\nu^{(0)} = 0$ dla $\nu > N$, to można to również zapisać tak

$$x_n = x_n^{(0)} + \frac{1}{\lambda_n^{(0)}} \sum_{\nu=N+1}^{\infty} (x_\nu^{(0)}, Ax_n^{(0)}) x_\nu^{(0)} + \dots ,$$
$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} + \frac{1}{\lambda_n^{(0)}} \sum_{\nu=N+1}^{\infty} |(x_\nu^{(0)}, Ax_n^{(0)})|^2 + \dots . \tag{9.54}$$

Zauważmy w szczególności, że wiodąca poprawka do $\lambda_n^{(0)}$, tj. $(x_n^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})$, znika. Wzory (9.53) wskazują, że pierwsza nieznikająca poprawka do $\lambda_n^{(0)}$ jest dodatnia, jeśli $\lambda_n^{(0)}$ jest dodatnie i ponadto, że jest ona mniejsza lub równa wielkości $\|A_1\|^2/\lambda_n^{(0)}$. Jednakże $\|x_n - x_n^{(0)}\| \leqslant \|A_1\|/\lambda_n^{(0)}$, tak więc metoda nasza daje lepsze przybliżenie dla λ_n niż dla x_n. W obu wypadkach poprawki będą tym większe, im mniejsze wartości własne rozpatrujemy.

Jako typowy przykład rozpatrzmy całkowe równanie Schrödingera dla stanów związanych cząstki w zadanym centralnie symetrycznym polu o potencjale $V(|\mathbf{r}|)$. Z rozważań symetrii wiemy, że część kątowa funkcji falowej jest dana przez funkcję kulistą $Y_{lm}(\theta, \phi)$, gdzie l jest momentem pędu rozpatrywanej cząstki, a m rzutem momentu pędu na oś z. Funkcja radialna spełnia równanie (7.94), które tu przypominamy

$$\phi_l(r) = \frac{2m\varkappa}{\hbar^2} \int_0^\infty j_l(i\varkappa r_<) h_l^{(1)}(i\varkappa r_>) V(r') \phi_l(r') r'^2 \, dr', \tag{9.55}$$

gdzie $\varkappa$ wyraża się przez energię wiązania wzorem

$$\varkappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2},$$

a $r_>$ i $r_<$ oznaczają odpowiednio większą i mniejszą z wielkości r i r'. W postaci równania (9.55) jądro całkowe nie jest samosprzężone, gdyż

$$k(r, r') \neq k^*(r', r).$$

Stosując jednak metodę symetryzacji przedstawioną w zadaniu 8.5 możemy łatwo dojść do jądra hermitowskiego. Definiujemy

$$\psi_l(r) \equiv r V^{1/2}(r) \phi_l(r).$$

Równanie (9.55) przyjmuje wtedy postać

$$\psi_l(r) = \frac{2m\varkappa}{\hbar^2} \int_0^\infty r V^{1/2}(r) j_l(i\varkappa r_<) h_l^{(1)}(i\varkappa r_>) V^{1/2}(r') r' \psi_l(r') \, dr'. \tag{9.56}$$

Jądro tego równania jest już funkcją symetryczną

$$k_l(r, r') = \frac{2m\varkappa}{\hbar^2} r V^{1/2}(r) j_l(i\varkappa r_<) h_l^{(1)}(i\varkappa r_>) V^{1/2}(r') r'.$$

Spełnione jest $k_l(r, r') = k_l^*(r', r)$, gdyż jak łatwo można wykazać w oparciu o równanie (7.86a) i (7.86c), iloczyn $j_l(i\varkappa r_<) h_l^{(1)}(i\varkappa r_>)$ jest zawsze rzeczywisty.

Dla ilustracji rozpatrzmy znany potencjał kulombowski

$$V(r) = -Ze^2/r$$

dla stanów z $l = 0$ (przypadek $l \neq 0$ nie jest dużo trudniejszy). Wybieramy potencjał kulombowski po to, by móc porównać nasze wyniki ze ścisłymi wzorami, które w tym wy-

padku istnieją; z numerycznego punktu widzenia inny potencjał — na przykład potencjał Yukawy — byłby nawet prostszy ze względu na wykładnicze obcięcie.

Z wzorów (7.86a) i (7.86c) mamy

$$j_0(i\varkappa r_<) = \frac{\sinh(\varkappa r_<)}{\varkappa r_<}, \quad h_0^{(1)}(i\varkappa r_>) = -\frac{e^{-\varkappa r_>}}{\varkappa r_>},$$

a zatem

$$k_0(r, r') = \frac{2me^2Z}{\hbar^2\varkappa}\left[\frac{\sinh(\varkappa r_<)e^{-\varkappa r_>}}{r_>^{1/2}r_<^{1/2}}\right], \tag{9.57}$$

a równanie całkowe przyjmuje postać

$$\psi_0(r) = \frac{2Z}{\varkappa a_0}\int_0^\infty \frac{1}{r_>^{1/2}r_<^{1/2}}\, e^{-\varkappa r_>}\sinh(\varkappa r_<)\psi(r')dr'.$$

Wielkość $a_0 \equiv \hbar^2/me^2$ ma wymiar długości i nazywa się promieniem Bohra.

Wygodnie jest pozbyć się wymiarowych stałych definiując

$$\varrho \equiv r/a_0, \quad q \equiv \varkappa a_0 \equiv \left[-E/\left(\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\right)\right]^{1/2}, \tag{9.58}$$

gdzie $\alpha \equiv e^2/\hbar c$ jest bezwymiarową „stałą subtelnej struktury". W tych jednostkach mamy

$$\psi_0(\varrho) = \frac{2Z}{q}\int_0^\infty \frac{1}{\varrho_>^{1/2}\varrho_<^{1/2}}\, e^{-q\varrho_>}\sinh(q\varrho_<)\psi(\varrho')d\varrho'. \tag{9.59}$$

Zanim przystąpimy do rozwiązywania tego równania metodą przybliżenia skończonego rzędu, powinniśmy się upewnić, że jądro jest zwarte, co jest równoważne jego całkowalności w kwadracie. Mamy

$$I = \int_0^\infty d\varrho \int_0^\infty d\varrho' |k_0(\varrho, \varrho')|^2 = \frac{4Z^2}{q^2}\int_0^\infty d\varrho \int_0^\infty d\varrho' \frac{e^{-2q\varrho_>}[\sinh(q\varrho_<)]^2}{\varrho_>\varrho_<}.$$

Przyjmując, że q jest dodatnie, dostajemy w wyniku całkowania

$$I = \frac{\pi^2Z^2}{6q^2}, \tag{9.60}$$

tak więc jądro jest rzeczywiście całkowalne w kwadracie.

Problemem tkwiącym w równaniu (9.59) jest wyznaczenie wartości własnych energii wiązania q przy danym Z. Wydaje się jednak, że jądro zależy w skomplikowany, nieliniowy sposób od q. W rzeczywistości, w tym konkretnie przypadku, skomplikowana zależność od q jest pozorna, gdyż zamiana zmiennych

$$x = q\varrho \quad \text{i} \quad x' = q\varrho' \tag{9.61}$$

prowadzi do równania własnego

$$2Z\int_0^\infty \frac{e^{-x_>}\sinh(x_<)}{x_>^{1/2}x_<^{1/2}}\psi_0(x')dx' = q\psi_0(x). \tag{9.62}$$

Zauważmy, że przy zamianie zmiennych według wzorów (9.61) zakładamy, że q jest dodatnie, ja[1] to już zresztą przyjmowaliśmy przy dowodzie, że jądro w równaniu (9.59) jest

całkowalne w kwadracie. W wielu jednak przypadkach, na przykład jeśli $V(r) = g^2 e^{-\mu r}/r$, usunięcie zależności od q nie będzie w ten sposób możliwe — w takich sytuacjach często pożądane jest traktowanie q jako ustalonego, a Z jako wielkości do określenia. Innymi słowy zmienimy nieco problem pytając, jaka „siła" potencjału jest potrzebna do wytworzenia zadanej energii wiązania.

Zilustrujemy sposób otrzymywania rozwiązań równania całkowego rozwiązując równanie (9.62) dla atomu wodoru, kiedy $Z = 1$. Jeśli obetniemy jądro dla $x > 7$ oraz $x' > 7$ i podzielimy przedział $[0, 7]$ na 35 równych części, to procedura zawierająca się w równaniach (9.47) i (9.48) doprowadzi nas do zagadnienia wyznaczenia wartości własnych macierzy o wymiarach 35×35. Przy użyciu współczesnych maszyn cyfrowych jest to problem elementarny. Dla pierwszych kilku wartości własnych znajdujemy

$$q_1 = 0{,}994, \quad q_2 = 0{,}495, \quad q_3 = 0{,}326, \quad q_4 = 0{,}233.$$

Ścisłe wartości można otrzymać posługując się wzorem dla energii stanów związanych atomu wodoru

$$E_n = -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 / n^2.$$

Zgodnie z wzorem (9.58) oznacza to, że

$$q_1 = 1 = 1{,}000, \quad q_2 = \frac{1}{2} = 0{,}500, \quad q_3 = \frac{1}{3} = 0{,}333, \quad q_4 = \frac{1}{4} = 0{,}250.$$

Jak to już sugeruje wzór (9.53), wartości przybliżone leżą zawsze poniżej wartości ścisłych. Im mniejsze wartości własne, tym zgodność się pogarsza, co też pokrywa się z przewidywaniami wynikającymi z wzoru (9.53). Zauważmy, że

$$\sum_{n=1}^{\infty} q_n^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6},$$

co pokrywa się z całką z kwadratu jądra występującego w równaniu (9.62), o czym można przekonać się patrząc na wynik (9.60). Zgadza się to z ogólnym wynikiem zawartym we wzorze (9.15). Ponieważ znane są funkcje falowe atomu wodoru, możemy również podać ścisłe rozwiązanie równania (9.62). Uwzględniając zamianę zmiennych (9.58) i (9.61) oraz definicję funkcji ψ_0 poprzez ϕ_0, dostajemy dla pierwszych trzech wektorów własnych (patrz L. I. Schiff *Quantum Mechanics* McGraw-Hill, New York 1969).

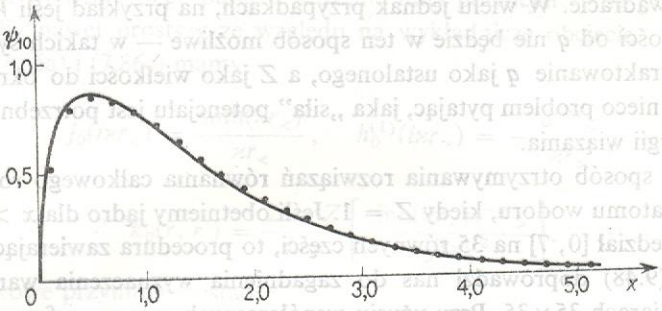
$$\psi_{10} = 2\sqrt{x}\, e^{-x},$$

$$\psi_{20} = 2\sqrt{2x}(1-x)e^{-x},$$

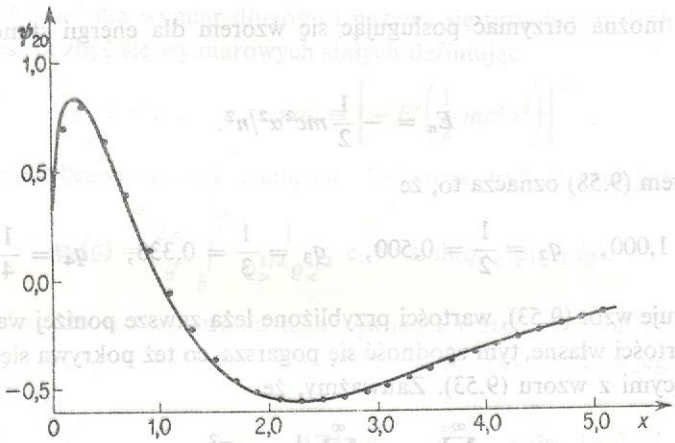
$$\psi_{30} = 2\sqrt{3x}\left(1 - 2x + \frac{2}{3}x^2\right)e^{-x}.$$

Wszystkie one są ortogonalne do siebie i unormowane dla wygody do jedności.

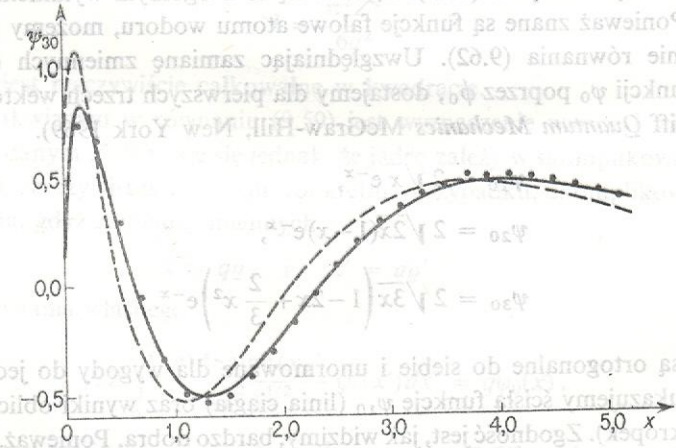
Na rys. 9.1 ukazujemy ścisłą funkcję ψ_{10} (linia ciągła) oraz wyniki obliczeń przybliżonych (w postaci kropek). Zgodność jest, jak widzimy, bardzo dobra. Ponieważ, ściśle mówiąc przybliżenie dla funkcji ψ_{10} składa się z ciągu płaskich segmentów w każdym podprzedziale, dokonaliśmy interpolacji zastępując te odcinki przez punkty w środku przedziału. Jest to



Rys. 9.1 Linia ciągła przedstawia wykres ścisłej funkcji własnej ψ_{10}, punkty na wykresie odpowiadają wartościom obliczonym w sposób przybliżony.



Rys. 9.2 Ścisła funkcja własna ψ_{20} (linia ciągła) oraz ta sama funkcja wyznaczona w sposób przybliżony (linia kropkowana).



Rys. 9.3 Ścisła funkcja własna ψ_{30} (linia ciągła) w zestawieniu z wynikami przybliżonymi obliczonymi z równania (9.48) (linia kropkowana) i obliczonymi z równania (9.50) (linia przerywana).

dobre przybliżenie, jeśli funkcja zmienia się powoli, a trochę gorsze, jeśli krzywa zmienia się szybciej, np. blisko początku układu na rys. 9.1. W obszarze szybkich zmian należałoby wybrać mniejsze podprzedziały dla otrzymania lepszej dokładności. Można to łatwo zrobić w ramach przedstawionego przez nas formalizmu. Na rys. 9.2 i 9.3 przedstawione jest podobne porównanie dla drugiego i trzeciego wektora własnego. Zwróćmy uwagę, że odstępstwa od ścisłego wyniku są nieco bardziej zauważalne w tych wypadkach, chociaż zgodność jest w dalszym ciągu bardzo dobra.

Obliczenia byłyby prostsze, gdybyśmy obliczali odpowiednią macierz w duchu całki Riemanna, tak jak to powyżej omawialiśmy. Przy takim sposobie każdy element macierzowy otrzymuje się po prostu obliczając jądro w punkcie na płaszczyźnie xx'. Dla porównania zamieściliśmy na rys. 9.3 krzywą otrzymaną w ten sposób dla funkcji ψ_{30}. Odpowiadająca jej wartość własna wynosi $q_3 = 0{,}353$. Jasne jest, że przy takim dość grubym podziale, jaki tu zastosowaliśmy, pierwsza metoda jest dokładniejsza, przy podziale dostatecznie subtelnym przedziału całkowania obie metody są zasadniczo równoważne.

9.4. ALTERNATYWA FREDHOLMA DLA OPERATORÓW ZWARTYCH

Przejdźmy teraz do rozważań nad ogólnym przypadkiem operatorów zwartych. Dysponujemy w tym wypadku mniejszą ilością informacji, niż gdy zajmujemy się operatorami hermitowskimi. Nie mamy teraz na przykład gwarancji, że istnieje zupełny układ funkcji własnych, nie dysponujemy również zasadą minimum i maksimum. Jednakże mamy na swym koncie pewne postępy, jeśli chodzi o operatory niehermitowskie; umiemy mianowicie rozwiązywać równania z operatorami o małej normie albo z operatorami skończonego rzędu. Powiązanie między tymi dwoma typami operatorów polega na tym, że dowolny operator zwarty w przestrzeni Hilberta może być zapisany w postaci

$$K = K_F + \Delta, \tag{9.63}$$

gdzie K_F jest operatorem skończonego rzędu, a $||\Delta||$ może być dowolnie małe. Korzystając z tego podstawowego rozkładu pokażemy w tym paragrafie, że dla dowolnego odwzorowania zwartego ma miejsce alternatywa Fredholma. Przy okazji uzyskamy również pewne użyteczne rezultaty pomocne przy rozwiązywaniu pojawiających się w praktyce problemów.

Przypuśćmy, że chcemy rozwiązać równanie

$$f = g + \lambda K f \tag{9.64}$$

albo korzystając z (9.63)

$$(I - \lambda K_F - \lambda\Delta) f = g.$$

Problem polega na obliczeniu operatora odwrotnego do $I - \lambda K_F - \lambda\Delta$. Potrafimy już obliczać $(I - \lambda\Delta)^{-1}$, jeśli $||\Delta|| < 1/\lambda$ oraz $(I - \lambda K_F)^{-1}$, jeśli K_F jest dowolnym jądrem skończonego rzędu, a λ nie pokrywa się z odwrotnością żadnej wartości własnej K_F. Chcielibyśmy więc przedstawić $(I - \lambda K_F - \lambda\Delta)^{-1}$, o ile ten operator istnieje, wyrażony poprzez znane nam operatory odwrotne. W tym celu skorzystamy z pewnej tożsamości dla operatorów (patrz zadanię 3.26)

$$(A - B)^{-1} \equiv A^{-1} + A^{-1} B (A - B)^{-1} \tag{9.65}$$

słusznej, jeśli tylko $(A-B)^{-1}$ oraz A^{-1} istnieją. W zastosowaniu do naszego problemu identyfikujemy $(I-\lambda\Delta)$ z A, zaś λK_F z B. Zakładając $||\Delta|| < 1/\lambda$ wiemy, że operator $(I-\lambda\Delta)^{-1}$ istnieje i może być przedstawiony w postaci szeregu Neumanna

$$(I-\lambda\Delta)^{-1} = I+\lambda\Delta+\lambda^2\Delta^2+\lambda^3\Delta^3+\ldots. \tag{9.66}$$

Jeśli wyrażenie $(I-\lambda K_F-\lambda\Delta)^{-1}$ istnieje, to

$$(I-\lambda K_F-\lambda\Delta)^{-1} = (I-\lambda\Delta)^{-1}+\lambda(I-\lambda\Delta)^{-1}K_F(I-\lambda K_F-\lambda\Delta)^{-1}. \tag{9.67}$$

Jeśli jednak K_F jest operatorem skończonego rzędu, to i operator $(I-\lambda\Delta)^{-1}K_F$ ma tę własność, gdyż jeśli K_F jest zdefiniowany dla wszystkich $f \in H$ wzorem

$$K_F f \equiv \sum_{i=1}^{N} \phi_i(\psi_i, f),$$

to

$$(I-\lambda\Delta)^{-1}K_F f = \sum_{i=1}^{N}(I-\lambda\Delta)^{-1}\phi_i(\psi_i, f) \equiv \sum_{i=1}^{N}\phi_i^{(\Delta)}(\psi_i, f). \tag{9.68}$$

W powyższym wzorze wprowadziliśmy funkcje $\phi_i^{(\Delta)}$ zdefiniowane następująco

$$\phi_i^{(\Delta)} \equiv (I-\lambda\Delta)^{-1}\phi_i = \phi_i+\lambda\Delta\phi_i+\lambda^2\Delta^2\phi_i+\ldots. \tag{9.69}$$

Zdefiniujmy nowy operator skończonego rzędu zależny jawnie od λ następująco:

$$\tilde{K}_F(\lambda) \equiv (I-\lambda\Delta)^{-1}K_F. \tag{9.70}$$

Ponieważ $||\Delta|| < 1/\lambda$, zatem zależność od λ może być przedstawiona w postaci zbieżnego szeregu potęgowego. Wprowadzając definicje

$$G_K(\lambda) \equiv (I-\lambda K)^{-1}, \quad G_\Delta(\lambda) \equiv (I-\lambda\Delta)^{-1} \tag{9.71}$$

można równanie (9.67) przepisać w postaci

$$G_K(\lambda) = G_\Delta(\lambda)+\lambda\tilde{K}_F(\lambda)G_K(\lambda). \tag{9.72}$$

W tej notacji równanie (9.70) można zapisać

$$\tilde{K}_F(\lambda) = G_\Delta(\lambda)K_F. \tag{9.73}$$

Równanie (9.72) można zapisać w znanej postaci

$$[I-\lambda\tilde{K}_F(\lambda)]G_K(\lambda) = G_\Delta(\lambda),$$

cały więc problem sprowadził się do obliczenia odwrotności operatora $[I-\lambda\tilde{K}_F(\lambda)]$, gdzie $\tilde{K}_F$ jest odwzorowaniem skończonego rzędu. Jeśli ten operator odwrotny istnieje, to

$$G_K(\lambda) = [I-\lambda\tilde{K}_F(\lambda)]^{-1}G_\Delta(\lambda) \tag{9.74}$$

i rozwiązaniem naszego wyjściowego równania jest

$$f = G_K(\lambda)g.$$

Z równania (9.74) wynika, że jeśli $|\lambda| \cdot ||\Delta|| < 1$ (tzn., jeśli istnieje $G_\Delta(\lambda)$), to wtedy $G_K(\lambda)$ istnieje wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje $[I-\lambda\tilde{K}_F(\lambda)]^{-1}$. Z praktycznego punktu widzenia podstawowe znaczenie ma fakt, że równanie (9.74) pozwala przedstawić $G_K(\lambda)$ w postaci iloczynu dwóch operatorów, z których każdy może być w zasadzie obliczony jedną z metod

już omówionych: $G_\Delta(\lambda)$ jest dane przez najzwyklejszą iterację równania (9.66), zaś $[I-\lambda\tilde{K}_F(\lambda)]^{-1}$ może być otrzymane metodami paragrafu 8.6. Zgodnie z równaniem (9.68) i (9.70)

$$\tilde{K}_F(\lambda)f = \sum_{i=1}^{N} \phi_i^{(\Delta)}(\psi_i, f)$$

dla dowolnego $f \in H$, gdzie $\phi_i^{(\Delta)}$ wyraża się poprzez elementy ϕ_i jądra aproksymującego K_F wzorem

$$\phi_i^{(\Delta)} = G_\Delta(\lambda)\phi_i.$$

Korzystając z równań (8.87) i (8.88) można napisać

$$[I-\lambda\tilde{K}_F(\lambda)]^{-1} = I+\lambda R_{\tilde{K}_F}(\lambda), \tag{9.75}$$

gdzie

$$R_{\tilde{K}_F}(\lambda)f \equiv \sum_{m=1}^{N}\sum_{n=1}^{N}[(I-\lambda A)^{-1}]_{mn}\phi_m^{(\Delta)}(\psi_n, f), \tag{9.76}$$

a elementy macierzy A o wymiarach $N\times N$ są dane przez

$$A_{mn} = (\psi_m, \phi_n^{(\Delta)}) = (\psi_m, G_\Delta\phi_n). \tag{9.77}$$

Zgodnie z wzorem (9.69) każdy element macierzy A może być przedstawiony jako szereg względem potęg λ, który jest zbieżny, jeśli $|\lambda| < ||\Delta||^{-1}$. A zatem nasz wyjściowy problem może być sprowadzony do zagadnienia odwrócenia macierzy o skończonych wymiarach, tym samym możemy uważać go w zasadzie za rozwiązany.

Często okazuje się możliwe wybrać odwzorowanie skończonego rzędu zawierające jedynie parę członów, a mimo to otrzymać Δ, którego norma jest bardzo mała. Często nawet ze zwykłym jądrem separowalnym o postaci

$$k_s(x, y) = \alpha(x)\beta(y)$$

można w wielu problemach otrzymać Δ, którego norma jest dużo mniejsza niż wyjściowego operatora K. W specyficznych przypadkach redukcja taka może być niezwykle przydatna. Należy jednak podkreślić, że niezależnie od tego, jak mała będzie norma $||\Delta||$, to dla dostatecznie dużych λ iloczyn $|\lambda|\cdot||\Delta|| \geqslant 1$ i nie możemy już być pewni, że operator $(I-\lambda\Delta)^{-1}$ istnieje.

Jeśli λ jest dowolną liczbą zespoloną, to w dowolnym kole wokół zera w płaszczyźnie zespolonej może być jedynie skończona liczba punktów, w których $(I-\lambda K)^{-1}$ nie istnieje. Staje się to najwyraźniej widoczne, jeśli zapiszemy to wszystko przy pomocy rezolwent

$$G_K(\lambda) \equiv (I-\lambda K)^{-1} \equiv I+\lambda R_K(\lambda),$$

$$G_\Delta(\lambda) \equiv (I-\lambda\Delta)^{-1} \equiv I+\lambda R_\Delta(\lambda).$$

Korzystając z tych związków oraz z (9.75) i (9.74) dostajemy

$$I+\lambda R_K(\lambda) = \big(I+\lambda R_{\tilde{K}_F}(\lambda)\big)\big(I+\lambda R_\Delta(\lambda)\big),$$

a zatem

$$R_K(\lambda) = R_\Delta(\lambda)+R_{\tilde{K}_F}(\lambda)\big(I+\lambda R_\Delta(\lambda)\big). \tag{9.78}$$

Zauważmy jednak, że ze względu na (9.69) i (9.77) wyznacznik $\det(I-\lambda A)$ jest analityczną funkcją λ, która nie jest tożsamościowo równa zeru (na przykład $\det(I-\lambda A) = 1$ dla

$\lambda = 0$). Jeśli więc λ_0-jest dowolnym punktem w płaszczyźnie zespolonej λ, dla którego $\det(I-\lambda_0 A) = 0$, to musi istnieć otoczenie punktu λ_0, w którym $(\det I-\lambda A) \neq 0$ wszędzie poza samym punktem λ_0. W przeciwnym wypadku wszystkie pochodne funkcji $\det(I-\lambda A)$ względem zmiennej λ znikałyby w punkcie $\lambda = \lambda_0$, a zatem znikałby tożsamościowo szereg Taylora wokół λ_0. Zgodnie więc z twierdzeniem Bolzano–Weierstrassa oznacza to, że dowolne skończone koło w płaszczyźnie zespolonej zawiera jedynie skończoną liczbę biegunów rezolwenty $R_K(\lambda)$, gdyż zgodnie z (9.76) i (9.78) zera wyznacznika $\det(I-\lambda A)$ odpowiadają biegunom rezolwenty $R_K(\lambda)$. A zatem $R_K(\lambda)$ jest meromorficzną funkcją λ.

Innym ważnym rezultatem, jaki się otrzymuje rozważając rozbicie K na operator skończonego rzędu K_F i operator Δ o małej normie, jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 9.9. Dla dowolnego operatora zwartego w przestrzeni Hilberta zachodzi alternatywa Fredholma.

Dowód. Wykazanie powyższego rezultatu nie jest trudne, ale dość długie. Dlatego dowód rozbijemy na kilka lematów.

Lemat 1. Równania

$$f = g+\lambda Kf \tag{9.79}$$

i

$$\tilde{f} = \tilde{g}+\lambda^* K^\dagger \tilde{f} \tag{9.80}$$

są równoważne, odpowiednio równaniom

$$f = g_\Delta+\lambda(I+\lambda R_\Delta)K_F f, \tag{9.81}$$

$$\tilde{f} = \tilde{g}_\Delta+\lambda^*(I+\lambda^* R_\Delta^\dagger)K_F^\dagger \tilde{f}, \tag{9.82}$$

gdzie

$$g_\Delta = (I+\lambda R_\Delta)g \quad \text{oraz} \quad \tilde{g}_\Delta = (I-\lambda^* R_\Delta^\dagger)\tilde{g},$$

a R_Δ jest rezolwentą zdefiniowaną poprzednio. Operator Δ spełnia warunek $||\Delta|| < 1/\lambda$, a K_F jest operatorem skończonego rzędu.

Dowód. Wynik ten wynika natychmiast z naszych poprzednich rozważań. Piszemy

$$f = g+\lambda Kf = g+\lambda K_F f+\lambda\Delta f,$$

gdzie Δ jest takie, że $||\Delta|| < 1/|\lambda|$. Zgodnie z twierdzeniem 8.4 istnieje zawsze takie K_F, dla którego jest to prawdą, zatem

$$(I-\lambda\Delta)f = g+\lambda K_F f$$

lub, ponieważ $(I-\lambda\Delta)^{-1}$ istnieje oraz z definicji

$$(I-\lambda\Delta)^{-1} \equiv I+\lambda R_\Delta,$$

mamy

$$f = g_\Delta+\lambda(I+\lambda R_\Delta)K_F f,$$

gdzie

$$g_\Delta = (I+\lambda R_\Delta)g.$$

Identyczne argumenty w zastosowaniu do równania

$$\tilde{f} = \tilde{g}+\lambda^* K^\dagger \tilde{f}$$

prowadzą do

$$\tilde{f} = \tilde{g}_\Delta+\lambda^*(I+\lambda^* R_\Delta^\dagger)K_F^\dagger \tilde{f}.$$

Odwracając rozumowanie widzimy natychmiast, że równania (9.81) i (9.82) implikują równania (9.79) i (9.80), co kończy dowód równoważności.

Lemat 2. Każda wartość λ jest albo wartością regularną albo osobliwą operatora K. Jeśli jest ona wartością regularną, to wtedy równanie

$$f = g + \lambda K f \tag{9.83}$$

ma jednoznaczne rozwiązanie dane wzorem

$$f = (I - \lambda K)^{-1} g,$$

natomiast operator $(I - \lambda K)^{-1}$ istnieje. Jeśli λ jest wartością osobliwą, to równanie (9.83) ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy g jest ortogonalne do każdego z rozwiązań równania

$$\lambda^* K^\dagger \tilde{h} = \tilde{h}.$$

Dowód. Rezultat ten wynika z lematu 1 i twierdzenia 8.1. Zgodnie z lematem 1 równanie (9.83) jest równoważne równaniu

$$f = g_\Delta + \lambda (I + \lambda R_\Delta) K_F f \tag{9.84}$$

dla odpowiedniego Δ i K_F. Ale dowiedliśmy już, że

$$(I + \lambda R_\Delta) K_F$$

jest odwzorowaniem skończonego rzędu, ponieważ K_F jest takim odwzorowaniem. A zatem na mocy twierdzenia 8.1 równanie (9.84) ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy g jest ortogonalne do każdego rozwiązania sprzężonego równania jednorodnego

$$\lambda^* [(I + \lambda R_\Delta) K_F]^\dagger \tilde{\phi} = \lambda^* K_F^\dagger (I + \lambda R_\Delta)^\dagger \tilde{\phi} = \tilde{\phi}. \tag{9.85}$$

Jeśli oznaczymy

$$\tilde{h} \equiv (I + \lambda R_\Delta)^\dagger \tilde{\phi} = (I + \lambda^* R_\Delta^\dagger) \tilde{\phi},$$

to żądanie, by równanie (9.84) miało rozwiązanie, można zapisać jako

$$(g_\Delta, \phi) = 0 = (g_\Delta, [I + \lambda^* R_\Delta^\dagger]^{-1} \tilde{h}). \tag{9.86}$$

Ponieważ $g_\Delta = (I + \lambda R_\Delta) g$, oznacza to po prostu, że musi być

$$(g, \tilde{h}) = 0.$$

Ale $(I + \lambda^* R_\Delta^\dagger)^{-1}$ istnieje i z definicji jest równe $(I - \lambda^* \Delta^\dagger)$ (patrz lemat 1). Co więcej, $K^\dagger = K_F^\dagger + \Delta^\dagger$, zatem zgodnie z równaniem (9.85) $\tilde{h}$ musi spełniać następujące równanie:

$$\lambda^* K_F^\dagger \tilde{h} = \tilde{\phi} = (I + \lambda^* R_\Delta^\dagger)^{-1} \tilde{h} = (I - \lambda^* \Delta^\dagger) \tilde{h} = \tilde{h} + \lambda^* K_F^\dagger \tilde{h} - \lambda^* K^\dagger \tilde{h}$$

albo inaczej

$$\lambda^* K^\dagger \tilde{h} = \tilde{h}.$$

A zatem równanie (9.84) ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy g jest ortogonalne do wszystkich rozwiązań równania

$$\lambda^* K^\dagger \tilde{h} = \tilde{h}.$$

Na mocy lematu 1 to samo odnosi się do równania (9.83), co kończy dowód tego lematu.

Wniosek. Każda wartość λ^* jest albo regularną, albo osobliwą wartością operatora $K^\dagger$. Jeśli jest wartością regularną, to równanie

$$\tilde{f} = \tilde{g} + \lambda^* K^\dagger \tilde{f} \tag{9.87}$$

ma jednoznaczne rozwiązania dane wzorem

$$\tilde{f} = (I - \lambda^* K^\dagger)^{-1} \tilde{g},$$

natomiast $(I - \lambda^* K^\dagger)^{-1}$ istnieje. Jeśli λ^* jest wartością osobliwą, to równanie (9.87) ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy $\tilde{g}$ jest ortogonalne do każdego rozwiązania równania $\lambda K h = h$.

Wreszcie mamy

Lemat 3. Równania

$$\lambda K h_i = h_i \quad \text{oraz} \quad \lambda^* K^\dagger \tilde{h}_i = \tilde{h}_i$$

mają tę samą liczbę liniowo niezależnych rozwiązań.

Dowód. Zgodnie z lematem 1 równania te są równoważne odpowiednio równaniom

$$\lambda(I + \lambda R_\Delta) K_F h_i = h_i \tag{9.88}$$

i

$$\lambda^*(I + \lambda^* R^\dagger) K_F^\ddagger \tilde{h}_i = \tilde{h}_i \tag{9.89}$$

dla pewnych Δ i K_f. Ostatnie równanie można przepisać w postaci

$$\lambda^* K_F^\ddagger (I + \lambda^* R_\Delta^\dagger) [(I + \lambda^* R_\Delta^\dagger)^{-1} \tilde{h}_i = [(I + \lambda^* R_\Delta^\dagger)^{-1} \tilde{h}_i], \tag{9.90}$$

ponieważ istnieje odpowiedni operator odwrotny. Definiując podobnie jak poprzednio

$$\tilde{\phi}_i = (I + \lambda^* R_\Delta^\dagger)^{-1} \tilde{h}_i$$

możemy równanie (9.90) przepisać w postaci

$$\lambda^* K_F^\ddagger (I + \lambda^* R_\Delta^\dagger) \tilde{\phi}_i = \tilde{\phi}_i,$$

a równanie (9.89) w postaci

$$\lambda^* [(I + \lambda R_\Delta) K_F]^\dagger \tilde{\phi}_i = \tilde{\phi}_i. \tag{9.91}$$

Zgodnie z drugim wnioskiem z twierdzenia 8.1 równania (9.88) i (9.91) mają tę samą liczbę rozwiązań liniowo niezależnych $\tilde{h}_i$ i $\tilde{\phi}_i$. Ale $\tilde{h}_i$ jest związane z $\tilde{\phi}_i$ zależnością

$$\tilde{h}_i = (I + \lambda^* R_\Delta^\dagger) \phi_i.$$

Ponieważ operator $(I + \lambda^* R_\Delta^\dagger)^{-1}$ istnieje, więc $\tilde{h}_i$ są liniowo niezależne, jeśli $\tilde{\phi}_i$ są niezależne. Równania (9.88) i (9.89) mają więc tę samą liczbę rozwiązań liniowo niezależnych; to samo odnosi się zatem do równań

$$\lambda K h_i = h_i \quad \text{i} \quad \lambda^* K^\dagger \tilde{h}_i = \tilde{h}_i.$$

Kończy to dowód lematu 3, a zarazem twierdzenia 9.9.

Zauważmy, że alternatywa Fredholma jest taka sama dla operatorów zwartych jak i dla operatorów skończonego rzędu. Staraliśmy się to uwypuklić zachowując te same oznaczenia przy omawianiu obu tych przypadków (patrz paragraf 8.6).

Skoro już upewniliśmy się, że istnieją rozwiązania równań liniowych z operatorami zwartymi, warto teraz wskazać, jak należy postępować, by rozwiązać w praktyce takie równania. Rzadko jest możliwe podanie rozwiązań w postaci skończonej, skupimy się więc w tym paragrafie na metodach przybliżonych, które mogą przynajmniej w zasadzie, zapewnić dowolnie dobrą dokładność. Wykorzystamy w tym celu sposoby omawiane w paragrafie 9.3. Zanim jednak do tego przystąpimy, musimy najpierw upewnić się, że wartości własne odpowiednich operatorów zachowują się w sensowny sposób, to znaczy że wartości własne jąder aproksymujących zbliżają się nieograniczenie do wartości własnych jąder aproksymowanych, w miarę jak przybliżenie staje się coraz dokładniejsze. W tym celu napiszmy

$$(I-\lambda K)^{-1} \equiv (I-\lambda K_F-\lambda \Delta)^{-1}$$

w postaci

$$(I-\lambda K)^{-1} = (I-\lambda K_F)^{-1}+\lambda(I-\lambda K_F)^{-1}\Delta(I-\lambda K)^{-1}. \tag{9.92}$$

Jeśli obliczymy $(I-\lambda K)^{-1}$, to rozwiązaniem równania

$$f = g+\lambda Kf \tag{9.93}$$

jest po prostu

$$f = (I-\lambda K)^{-1}g. \tag{9.94}$$

Chcemy teraz przybliżyć K tak dokładnie przez K_F, by pierwszy człon rozwiązania iteracyjnego równania (9.92) dał nam poprzez wzór (9.94) zadowalające rozwiązanie równania (9.93). Zauważmy po pierwsze, że tożsamość (9.92) jest słuszna wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje zarówno $(I-\lambda K)^{-1}$ jak i $(I-\lambda K_F)^{-1}$. Chcemy teraz pokazać, że czyniąc normę $||\Delta||$ wystarczająco małą uzyskujemy to, że wartości λ, dla których operator $(I-\lambda K)^{-1}$ traci sens, oraz wartości λ, dla których $(I-\lambda K_F)^{-1}$ traci sens, zbliżają się do siebie. (Dla operatorów hermitowskich mamy twierdzenie 9.8, które ustala powyższy fakt i to w bardzo dokładnej formie.)

Dla ogólnego przypadku operatorów zwartych przypuścimy najpierw, że λ jest wartością osobliwą operatora K, a mimo to niezależnie, jak mała by była norma $||\Delta||$, operator $(I-\lambda K_F)^{-1}$ pozostaje ograniczony, to znaczy

$$||(I-\lambda K_F)^{-1}|| < B$$

dla wszystkich Δ. Pokażemy, że założenia te są sprzeczne. W tym celu rozpatrzmy równanie

$$X = (I-\lambda K_F)^{-1}+\lambda(I-\lambda K_F)^{-1}\Delta X. \tag{9.95}$$

Na mocy znanych argumentów wiemy, że jeśli $|\lambda|\cdot||(I-\lambda K_F)^{-1}||\cdot||\Delta|| < 1$, to równanie powyższe może być rozwiązane metodą iteracji

$$X = (I-\lambda K_F)^{-1}+\lambda(I-\lambda K_F)^{-1}\Delta(I-\lambda K_F)^{-1}+\dots, \tag{9.96}$$

Ale $|\lambda|\cdot||(I-\lambda K_F)^{-1}||\cdot||\Delta|| < 1$ oznacza z założenia, że $|\lambda|\cdot||\Delta||\cdot B < 1$ lub że

$$||\Delta|| < 1/(|\lambda|\cdot B).$$

Na mocy twierdzenia 8.4 możliwe jest znalezienie takiego Δ, by powyższy warunek był spełniony. Operator X, jak widać, będzie miał normę skończoną

$$||X|| \leqslant \frac{B}{1-\lambda B||\Delta||} < \infty .$$

Ale mnożąc szereg (9.96) obustronnie przez $(I-\lambda K)$ znajdujemy, że

$$(I-\lambda K)X = X(I-\lambda K) = I.$$

A więc X jest ograniczoną odwrotnością operatora $(I-\lambda K)$. To jednak jest niemożliwe, gdyż założyliśmy, że λ jest wartością osobliwą operatora K. Zatem jeśli $||\Delta|| \to 0$, to $||(I-\lambda K_F)^{-1}|| \to \infty$, to znaczy λ jest coraz bliższe wartości osobliwej operatora K_F.

Ustaliliśmy już, że wartość osobliwa operatora K zbliża się dowolnie blisko do wartości osobliwej K_F, w miarę jak $||\Delta||$ maleje do zera, pozostaje jeszcze zbadać problem odwrotny. Przypuśćmy, że λ nie jest wartością osobliwą K; czy mimo to λ może być wartością osobliwą K_F? Odpowiedź brzmi, że jeśli $||\Delta||$ jest wystarczająco małe, to λ również nie jest wartością osobliwą K_F. Oczywiście dla pewnej skończonej wartości $||\Delta||$ może się zdarzyć, że λ jest wartością osobliwą K_F, jeśli jednak zaczniemy ulepszać nasze przybliżenie ($||\Delta|| \to 0$), to w końcu możemy być pewni, że λ nie jest wartością osobliwą K_F. Aby się przekonać, że jest to prawda zauważmy, iż równanie (9.92) implikuje z istnienia $(I-\lambda K)^{-1}$ istnienie $(I-\lambda K_F)^{-1}$, o ile tylko istnieje

$$[I+\lambda\Delta(I-\lambda K)^{-1}]^{-1};$$

w tym przypadku

$$(I-\lambda K_F)^{-1} = (I-\lambda K)^{-1}[I+\lambda\Delta(I-\lambda K)^{-1}]^{-1}$$

Ale jeśli $||(I-\lambda K)^{-1}|| < C$, to o ile tylko $||\Delta|| < 1/|\lambda| \cdot C$, to wielkość $[I+\lambda\Delta(I-\lambda K)^{-1}]^{-1}$ może być obliczona przez iterację. Jeśli więc λ nie jest wartością osobliwą K, to dla wartości $||\Delta||$ dostatecznie małej nie może być również wartością osobliwą K_F. Jeśli więc $||\Delta||$ jest dostatecznie małe, a λ nie jest wartością osobliwą operatora K, to równanie (9.92) jest dobrze określone i może być rozwiązane przez iterację

$$(I-\lambda K)^{-1} = (I-\lambda K_F)^{-1} + \lambda(I-\lambda K_F)^{-1}\Delta(I-\lambda K_F)^{-1} + \ldots . \tag{9.97}$$

Dla wartości $||\Delta||$ bardzo małych w porównaniu z $[|\lambda| \cdot ||(I-\lambda K_F)^{-1}||]^{-1}$ możemy zaniedbać wszystkie człony z wyjątkiem pierwszego w szeregu (9.97) i napisać

$$(I-\lambda K)^{-1} \cong (I-\lambda K_F)^{-1}$$

w sensie normy operatorów. Wzór (9.94) może być napisany jako

$$f = (I-\lambda K_F)^{-1}g + \mathcal{O}(\Delta),$$

gdzie $\mathcal{O}(\Delta)$ oznacza człon dążący do zera w sensie normy wraz z $||\Delta||$ dążącym do zera. Oczywiście sens stwierdzenia, że $||\Delta||$ jest małe zależy zgodnie z wzorem (9.97) od wartości $||(I-\lambda K_F)^{-1}||$. Jeśli jesteśmy w pobliżu wartości osobliwej K, a więc i K_F, to $||(I-\lambda K)^{-1}||$ oraz $||(I-\lambda K_F)^{-1}||$ są duże i $||\Delta||$ musi być odpowiednio małe.

Jesteśmy już gotowi rozwiązywać równania liniowe w taki sam sposób, jak rozwiązaliśmy zagadnienia własne dla odwzorowań samosprzężonych. Zakładając, że K jest operatorem całkowym, obcinamy w taki sposób jądro $k(x, y)$, by zapewnić żądaną dokładność, a następnie dzielimy powstały obszar na osi x lub y na małe podobszary. Definiując nieunormowane funkcje $\phi_n^{(N)}(x)$ tak jak w paragrafie 9.3 otrzymujemy jądro skończonego

rzędu $k_N(x, y)$, które aproksymuje jądro $k(x, y)$ tak dokładnie, jak tylko sobie życzymy. Postępując w ten sposób znajdujemy, że

$$f = \sum_{n=1}^{N} a_n \phi_n^{(N)}, \tag{9.98}$$

gdzie a_n jest dane przez

$$a_n = \frac{N}{l} \sum_{m=1}^{N} [(I - \lambda A)^{-1}]_{nm} b_m, \tag{9.99}$$

a b_m jest po prostu

$$b_m = (\phi_m^{(N)}, g). \tag{9.100}$$

Macierz A określona jest następująco:

$$A_{\mu\nu} = \frac{N}{l} \int dx \int dy k(x, y) \phi_\mu^{(N)}(x) \phi_\nu^{(N)}(y). \tag{9.101}$$

W powyższych wzorach l jest długością przedziału, poza którym obcięliśmy jądro $k(x, y)$, a N jest liczbą podobszarów, na które został podzielony główny odcinek. W wyprowadzeniu wzoru (9.101) założyliśmy, że wielkość

$$\left[||g||^2 - \frac{N}{l} \sum_{m=1}^{N} |b_m|^2 \right]^{1/2}$$

jest mała w porównaniu z f; gdyby $\phi_n^{(N)}$ tworzyły układ zupełny, to wielkość ta byłaby ściśle zero. Czytelnik powinien uzyskać te rezultaty stosując metodę, przy pomocy której otrzymaliśmy wzory (9.48) i (9.49); wyrażenie dla f może być również uzyskane przy pomocy podejścia wykorzystującego idee całki Riemanna, podobnie jak wyprowadziliśmy równanie (9.50) (patrz zadanie 9.25). Wzory (9.98) do (9.101) sprowadzają rozwiązanie równania całkowego z jądrem zwartym do zagadnienia odwracania macierzy.

Jako przykład równania z jądrem zwartym rozpatrzmy równanie Lippmanna–Schwingera omawiane w rozdziale 7. Pomijając wskaźnik $(\pm)$ w równaniu (7.68) napiszmy je w postaci

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{A}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q}_i \mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{iq_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \tag{9.102}$$

Rozwiązanie tego równania jest związane z amplitudą rozpraszania

$$f^s(\mathbf{q}_f) = -\frac{(2\pi)^{1/2} m}{\hbar^2 A} \int e^{-i\mathbf{q}_f \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \tag{9.103}$$

gdzie $\mathbf{q}_f$ jest wektorem w kierunku (θ, ϕ) o wartości równej $|\mathbf{q}_i|$. Jak wspomnieliśmy w paragrafie 7.4, wielkością o bezpośrednim znaczeniu fizycznym jest f^s. Wybierając kierunek fali padającej w kierunku osi z i przyjmując dla wygody normalizację $A = (2\pi)^{3/2}$ (oczywiście f^s jest niezależne od A), dostajemy

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iq_i z} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{iq_i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}',$$

$$f^s(\mathbf{q}_f) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}_f \mathbf{r}} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}.$$

Podobnie jak w paragrafie 7.5 rozwińmy wszystko na wielomiany Legendre'a. Piszemy

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\phi_l(r)P_l(\cos\theta),$$

$$f^s(\mathbf{q}_f) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)f_l^s(q_i)P_l(\cos\theta_f),$$

gdzie wykorzystaliśmy fakt, że $|\mathbf{q}_f| = q_i$, a kąt rozproszenia oznaczyliśmy literą θ_f. W ten sposób dostajemy natychmiast układ równań na wielkości ϕ_l i f_l^s. Dla przykładu rozpatrzymy przypadek $l = 0$. Mamy wtedy

$$\phi_0(r) = \frac{(\sin q_i r)}{q_i r} - \frac{2m}{\hbar^2 q_i}\int_0^{\infty} \frac{\sin(q_i r_<)e^{iq_i r_>}}{r_< r_>} V(r')\phi_0(r')r'^2 dr', \tag{9.104}$$

$$f_0^s(q_i) = -\frac{2m}{\hbar^2 q_i}\int_0^{\infty} \sin(q_i r)V(r)\phi_0(r)r\,dr. \tag{9.105}$$

W równaniu (9.104) $r_<$ i $r_>$ oznaczają odpowiednio mniejszą spośród liczb r i r' oraz większą spośród liczb r i r'.

Dla konkretności przyjmijmy potencjał wykładniczy

$$V(r) = V_0 e^{-\mu r}.$$

Równania (9.104) i (9.105) przyjmują postać

$$\phi_0(r) = \frac{\sin(q_i r)}{q_i r} - \frac{2mV_0}{\hbar^2 q_i}\int_0^{\infty} \frac{1}{r}\sin(q_i r_<)e^{iq_i r_>}e^{-\mu r'}r'\phi_0(r')dr', \tag{9.106}$$

$$f_0^s(q_i) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q_i}\int_0^{\infty} \sin(q_i r)e^{-\mu r}r\phi_0(r)dr. \tag{9.107}$$

W powyższym równaniu człon niejednorodny ani jądro operatora nie są całkowalne w kwadracie. Jednakże proces symetryzacji, który już stosowaliśmy w paragrafie 9.3, przekształci to równanie do żądanej postaci. Definiujemy

$$\xi_0(r) \equiv re^{-\mu r/2}\phi_0(r).$$

Równanie nasze przyjmuje kształt

$$\xi_0(r) = \frac{1}{q_i}e^{-\mu r/2}\sin(q_i r) - \frac{2mV_0}{\hbar^2 q_i}\int_0^{\infty} e^{-\mu r/2}\sin(q_i r_<)e^{iq_i r_>}e^{-\mu r'/2}\xi_0(r')dr', \tag{9.108}$$

$$f_0^s(q_i) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q_i}\int_0^{\infty} \sin(q_i r)e^{-\mu r/2}\xi_0(r)dr. \tag{9.109}$$

Łatwo stwierdzić, że człon niejednorodny jest całkowalny w kwadracie. Sprawdźmy, czy to samo dotyczy jądra

$$k_0(r,r') = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q_i}e^{-\mu(r+r')/2}\sin(q_i r_<)e^{iq_i r_>}.$$

Przekonujemy się, że

$$I(q_i) = \int_0^\infty dr \int_0^\infty dr' k_0|(r,r')|^2 = \frac{2m^2V_0^2}{\hbar^4\mu^2(\mu^2+q_i^2)}.$$

Norma operatora K_0 o jądrze $k_0(r,r')$ spełnia nierówność

$$||K_0|| \leqslant \sqrt{2}\,\frac{mV_0}{\mu\hbar^2}(\mu^2+q_i^2)^{-1/2}. \tag{9.110}$$

A zatem operator jest zwarty, a jego norma dąży do zera, gdy $q_i \to \infty$. A zatem przy dostatecznie dużych q_i równanie (9.108) może być zawsze rozwiązane metodą iteracji. Można nawet mieć nadzieję, że równanie to zawsze da się rozwiązać przez iterację. W typowych jednak sytuacjach, kiedy potencjał wykładniczy może być rzeczywiście przydatny (np. w fizyce jądrowej), wartości m, μ i V_0 leżą w takim zakresie, że otrzymuje się

$$||K_0|| \leqslant 2 \tag{9.111}$$

dla $q_i \ll \mu$. Do oszacowania tego użyliśmy wartości

$$1/\mu = 1{,}4 \cdot 10^{-13}\ \text{cm},$$
$$m = 1{,}66 \cdot 10^{-24}\ \text{g},$$
$$V_0 = 30\ \text{MeV} = 4{,}8 \cdot 10^{-5}\ \text{erg},$$

gdzie $1/\mu$ jest w przybliżeniu równe zasięgowi sił jądrowych, m jest masą protonu lub neutronu, $\hbar$ stałą Plancka, a V_0 rozsądnym oszacowaniem natężenia sił jądrowych. Dla $q_i \cong 2\mu$, norma $||K_0||$ staje się mniejsza od 1, ale niestety w ważnym zakresie wartości q_i nie jest bynajmniej $||K_0||$ zaniedbywalne w porównaniu z jednością. Oczywiście wzór (9.111) jest tylko jedynie nierównością; więc $||K||$ może być mniejsze od 1 nawet dla $q_i = 0$, ale nawet w takim przypadku niewielki będzie pożytek z metody iteracyjnej, gdyż dla jej praktycznego zastosowania trzeba, by $||K_0||$ było dużo mniejsze od jedności, a oszacowanie (9.111) wskazuje, że jest to mało prawdopodobne.

Pozostaje więc nam metoda zastosowana w ostatnim paragrafie przy rozwiązywaniu zagadnienia własnego dla operatora hermitowskiego. I w tym wypadku wygodnie jest zmienić skalę odległości przez wprowadzenie wygodnych jednostek. Definiujemy

$$x \equiv \mu r, \qquad p_i = q_i/\mu = (2mE/\mu^2\hbar^2)^{1/2},$$
$$\eta_0 = \mu\xi_0, \qquad F_0^s = \mu f_0^s.$$

Po uwzględnieniu tych zmian równania (9.108) i (9.109) przechodzą w

$$\eta_0(x) = \frac{1}{p_i}e^{-x/2}\sin(p_i x) - \frac{2mV_0}{\mu^2\hbar^2 p_i}\int_0^\infty e^{-x/2}\sin(p_i x_<)e^{ip_i x_>}e^{-x'/2}\eta_0(x')dx', \tag{9.112}$$

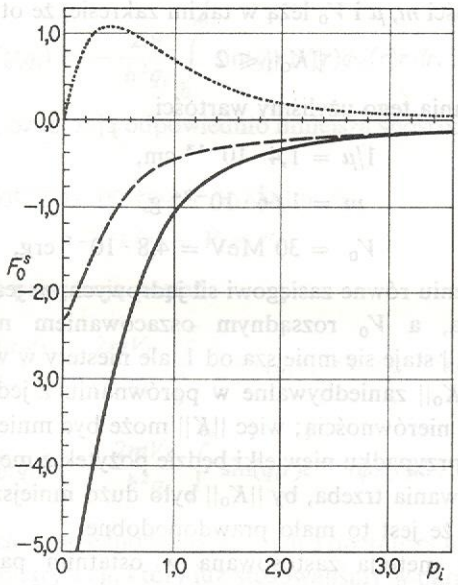
$$F_0^s(p_i) = -\frac{2mV_0}{\mu^2\hbar^2 p_i}\int_0^\infty \sin(p_i x)e^{-x/2}\eta_0(x)dx. \tag{9.113}$$

Aby rozwiązać numerycznie równanie (9.112), zaczynamy od obcięcia jądra dla x lub x' większych od 7, a pozostały odcinek $[0, 7]$ dzielimy na 35 równych części.

Definiując w zwykły sposób funkcje $\phi_n^{(N)}$ możemy skorzystać z równań (9.98) do (9.101) i sprowadzić problem do odwrócenia macierzy. Na rys. 9.4 ukazane są wyniki tych obliczeń dla części rzeczywistej i urojonej amplitudy F_0^s w funkcji zmiennej p_i przy ustalonej wartości $(mV_0/\mu\hbar^2) = 1{,}4$. Wartość tę otrzymuje się z realistycznych wartości stałych m, V_0 i μ podanych powyżej. Dla porównania zamieściliśmy na tym wykresie również pierwsze przybliżenie iteracyjne (przybliżenie Borna) amplitudy F_0^s otrzymanej następująco:

$$\eta_0^B(x) = \frac{1}{p_i} e^{-x/2} \sin(p_i x),$$

$$F_0^{sB} = -2\left(\frac{mV_0}{\mu^2\hbar^2}\right)\frac{1}{p_i}\int_0^\infty \sin(p_i x) e^{-x/2}\eta_0^B(x)dx = -4\left(\frac{mV_0}{\mu^2\hbar^2}\right)\frac{1}{4p_i^2+1}.$$



Rys. 9.4 Część rzeczywista amplitudy F_0^s (linia przerywana) i część urojona tej amplitudy (linia kropkowana) dla rozpraszania w fali s ($l = 0$) na potencjale wykładniczym. Dla porównania umieszczono również pierwsze przybliżenie iteracyjne F_{0B}^s, które jest czysto rzeczywiste (linia ciągła). Wszystkie amplitudy są mierzone w jednostkach zasięgu potencjału $(1/\mu)$ i wykreślone są jako funkcje bezwymiarowej zmiennej p_i, proporcjonalnej do pędu cząstki rozpraszanej $p_i = (2mE/\mu^2\hbar^2)^{1/2}$. Głębokość potencjału jest taka, że bezwymiarowy parametr $(mV_0/\mu^2\hbar^2)$ pojawiający się w równaniach (9.112) i (9.113) ma wartość 1,4; podobnie jak w tekście.

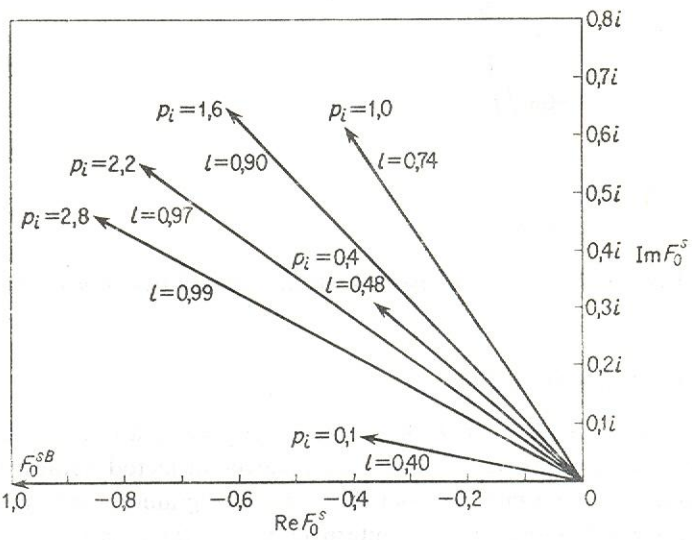
Zgodnie z oczekiwaniami wynikającymi z oszacowania (9.110) w zakresie $q_i \leqslant \mu$ i $p_i \leqslant 1$, pierwsze przybliżenie iteracyjne różni się znacznie od prawdziwej wartości amplitudy. Dla $p_i = 1$ część rzeczywista i urojona amplitudy F_0^s są tego samego rzędu, podczas gdy F_0^{sB} jest czysto rzeczywiste. Jednakże w miarę wzrostu p_i część urojona amplitudy F_0^s spada szybciej niż część rzeczywista, która jak widać na rys. 9.4, zbliża się coraz bardziej do F_0^{sB}. Tym niemniej nawet dla $p_i \cong 3$ rozbieżność jest jeszcze uderzająco duża, co wyjątkowo wyraźnie widać na rys. 9.5. Na rysunku tym przedstawiliśmy amplitudy F_0^s,

podzielone dla wygody przez $|F_0^{sB}|$, jako „wektory" w płaszczyźnie zespolonej. „Wektor" F_0^{sB} jest w tym przedstawieniu równy -1 dla wszystkich wartości p_i i odłożyliśmy go dla porównania wzdłuż ujemnej osi rzeczywistej. Koniec każdego wektora opisany jest wartością p_i, której odpowiada. Widzimy, że w miarę wzrostu p_i wektory $F_0^s(p_i)$ dążą do F_0^{sB}, ale jeszcze dla $p_i = 2{,}8$ jesteśmy daleko od tej granicy, co wskazuje na dużą niedokładność przybliżenia Borna. Nie powinno to nas zaskakiwać, gdyż nawet dla $p_i = 2{,}8$ z oszacowania (9.110) dostajemy $||K_0|| = 0{,}66$, co jest wprawdzie liczbą mniejszą od jedności, jednak niezbyt małą. Przy każdym z wektorów podana jest również jego długość l i uderzający jest fakt, że długości zespolonych „wektorów" przedstawiających $F_0^s(p_i)$ dążą bardzo szybko do długości amplitudy F_0^{sB}, to znaczy przy $p_i \to \infty$

$$|F_0^s| \to |F_0^{sB}|$$

znacznie szybciej niż

$$|F_0^s - F_0^{sB}| \to 0.$$

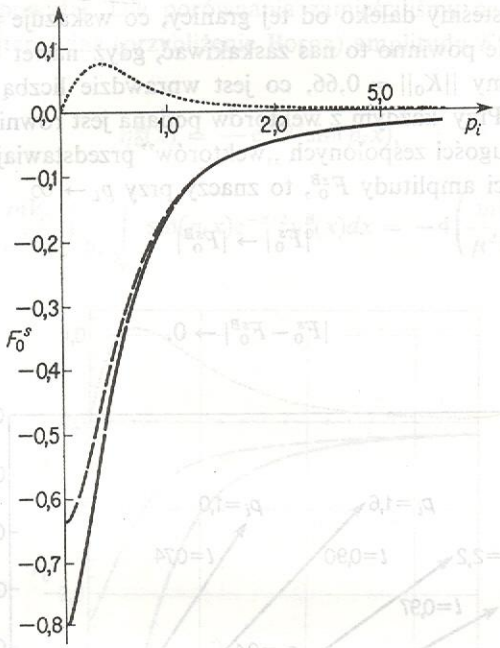


Rys. 9.5 Zbieżność amplitudy F_0^s do pierwszego przybliżenia iteracyjnego widziana w płaszczyźnie zespolonej.

Oznacza to, że najważniejsza obserwowalna wielkość, jaką jest przekrój czynny, który zależy tylko od modułu F_0^s, będzie zwodniczo dobrze odtwarzany przez przybliżenie Borna. Jednakże wielkości mierzalne, zależne od fazy amplitudy F_0^s, będą znacznie gorzej przewidywane przez to przybliżenie.

Podejście iteracyjne jest znacznie skuteczniejsze przy $(mV_0/\mu^2\hbar^2) = 0{,}2$. Na rys. 9.6. przedstawiona jest część rzeczywista i urojona F_0^s z pierwszym przybliżeniem iteracyjnym. Nawet dla $p_i \leqslant 1$ część urojona F jest znacznie mniejsza od części rzeczywistej, a jednocześnie dla $p_i = 1$ F_0^{sB} różni się od części rzeczywistej tylko o 3%. Dla $p_i = 3$ część urojona F_0^s jest mniejsza od części rzeczywistej więcej niż o rząd wielkości, a część rzeczywista F_0^s i przybliżenie Borna F_0^{sB} są już praktycznie identyczne. W tym więc

przypadku metoda iteracyjna jest prosta i skuteczna. Niestety w wielu praktycznych problemach nie będzie tak dobrze i trzeba będzie stosować bardziej skuteczne sposoby zawierające w tej czy innej formie przybliżenie przez operatory skończonego rzędu.



Rys. 9.6 To samo co na rys. 9.4, ale dla wartości $(mV_0/\mu^2\hbar^2) = 0{,}2$.

9.6. ODWZOROWANIA UNITARNE

Jak dotychczas większość naszych szczególnych rozważań dotyczyła odwzorowań zwartych w przestrzeni Hilberta, chociaż przy omawianiu metod iteracyjnych udało nam się ustalić twierdzenie dotyczące ogólniej odwzorowań ograniczonych. W tym paragrafie chcemy wspomnieć o odwzorowaniach unitarnych w przestrzeni Hilberta ważnych bardzo w fizyce teoretycznej ze względu na swój związek z teorią reprezentacji grup i mechaniką kwantową, mimo że odwzorowania te nigdy nie są zwarte (por. paragraf 9.1).

Na wstępie musimy zwrócić uwagę na rozróżnienie między odwzorowaniami unitarnymi i izometrycznymi, które nie ma miejsca w przestrzeniach wektorowych skończenie wymiarowych. W przestrzeni wektorowej o dowolnej liczbie wymiarów izometria zdefiniowana jest jako odwzorowanie liniowe U spełniające warunek

$$(Uf, Ug) = (f, g)$$

dla wszystkich f i g należących do przestrzeni wektorowej. Z warunku tego wynika, że odwzorowanie $U^\dagger$ jest lewostronnie odwrotne do odwzorowania U, tzn.

$$U^\dagger U = I.$$

W przestrzeniach skończenie wymiarowych istnienie odwzorowania lewostronnie odwrotnego zapewnia nam istnienie odwzorowania prawostronnie odwrotnego, ale w przestrzeni

o nieskończenie wielu wymiarach nie musi to być prawdą. Jeśli istnieje również odwzorowanie prawostronnie odwrotne do U, to mówimy, że U jest unitarne. Oczywiście to odwzorowanie prawostronnie odwrotne (jeśli istnieje) musi być równe odwzorowaniu odwrotnemu lewostronnie, gdyż z równości $BA = I = AC$ mamy $BAC = C$, czyli $B = C$. A zatem dla odwzorowań unitarnych piszemy

$$U^\dagger = U^{-1}.$$

Aby pokazać, że nie wszystkie izometrie są odwzorowaniami unitarnymi, rozpatrzmy zupełny, ortonormalny zbiór w przestrzeni Hilberta H i zdefiniujmy U w działaniu na dowolne $f \in H$

$$Uf = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_{i+1}(\phi_i, f).$$

Odwzorowanie sprzężone $U^\dagger$ dane jest przez

$$U^\dagger g = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_i(\phi_{i+1}, g)$$

dla dowolnego $g \in H$. Zupełność zbioru ϕ_i zapewnia, że

$$(Uf, Ug) = (f, g)$$

zachodzi dla dowolnych $f, g \in H$. A zatem $U^\dagger$ jest lewostronną odwrotnością odwzorowania U. Przypuśćmy teraz, że istnieje również odwrotność prawostronna; musielibyśmy w takim przypadku mieć

$$(U^\dagger f,\ U^\dagger g) = (f,\ UU^\dagger g) = (f, g)$$

dla dowolnego $f, g \in H$, a więc $U^\dagger$ musiałoby też być izometrią. Ale dla naszego $U^\dagger$

$$(U^\dagger f, U^\dagger g) = \sum_{i=1}^{\infty} (f, \phi_{i+1})(\phi_{i+1}, g) \neq (f, g),$$

a więc $U^\dagger$ nie jest izometrią, a w konsekwencji U nie jest odwzorowaniem unitarnym. Polecamy czytelnikowi sprawdzenie, że analogiczna konstrukcja operatora U nie prowadzi do nieunitarnej izometrii, jeśli rozpatrywana przestrzeń jest skończenie wymiarowa.

W przestrzeni L_2 funkcji całkowalnych w kwadracie można podać jawną charakterystykę wszystkich operatorów unitarnych. Doprowadzi to nas do bardziej eleganckiego przedstawienia transformacji Fouriera, którą w sposób intuicyjny omawialiśmy już w paragrafie 5.7. Posłużymy się metodą Bochnera w sformułowaniu Riesza i Nagy'ego.

Twierdzenie 9.10. Niech U będzie unitarnym odwzorowaniem przestrzeni L_2 funkcji całkowalnych w kwadracie. Dla każdego $f \in L_2$ takiego, że $g = Uf$, istnieją dwie funkcje $k(\xi, x)$ i $h(\xi, x)$ spełniające następujące związki:

$$\int_0^{\xi} g(x)\,dx = \int k^*(\xi, x) f(x)\,dx, \tag{9.114a}$$

$$\int_0^{\xi} f(x)\,dx = \int h^*(\xi, x) g(x)\,dx. \tag{9.114b}$$

Dowód. Definiujemy funkcję $e_\xi(x)$, która równa się znakowi x, jeśli x leży pomiędzy zero a ξ; a zeru w przeciwnym przypadku. Dla dowolnego odwzorowania unitarnego U wprowadźmy funkcje

$$h(\xi, x) \equiv Ue_\xi(x), \qquad k(\xi, x) \equiv U^{-1}e_\xi(x) = U^\dagger e_\xi(x).$$

Rozpatrzmy równanie $g = Uf$. Mamy

$$(e_\xi, g) \equiv (e_\xi, Uf) = (U^\dagger e_\xi, f) = (k(\xi, x), f(x)).$$

Rozpisując jawnie to równanie dostajemy

$$\int_0^\xi g(x)\,dx = \int k^*(\xi, x)f(x)\,dx,$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że dla $e_\xi(x) \neq 0$ mamy

$$e_\xi(x) = \operatorname{sgn} x,$$

a nie po prostu

$$e_\xi(x) = 1.$$

Podobnie

$$(e_\xi, f) = (e_\xi, U^{-1}g) = (e_\xi, U^\dagger g) = (Ue_\xi, g) = (h(\xi, x), g(x)),$$

a więc

$$\int_0^\xi f(x)\,dx = \int h^*(\xi, x)g(x)\,dx.$$

Twierdzenie 9.10 zostało więc udowodnione.

Funkcje k i h mają pewne szczególne własności. Przypuśćmy, że w równaniu 9.114b położyliśmy $f = U^{-1}e_\eta = k(\eta, x)$, co oznacza, że $g = Uf = e_\eta$. Dostajemy w takim przypadku

$$\int_0^\xi k(\eta, x)\,dx = \int_0^\eta h^*(\xi, x)\,dx. \tag{9.115a}$$

Postępując podobnie z równaniem (9.114a) znajdujemy, że

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)\,dx = \int_0^\xi e_\eta(x)\,dx.$$

Oczywiście, jeśli ξ i η są przeciwnego znaku, to ostatnia całka równa się zeru. Jeśli $\xi > 0$ oraz $\eta > 0$, to wtedy

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)\,dx = \min(\xi, \eta).$$

Jeśli $\xi < 0$ i $\eta < 0$, to

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)\,dx = -\max(\xi, \eta) = \min(-\xi, -\eta) = \min(|\xi|, |\eta|).$$

Zbierając powyższe wyniki możemy napisać

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)\,dx = \begin{cases} \min(|\xi|, |\eta|), & \text{jeśli } \xi\eta > 0, \\ 0, & \text{jeśli } \xi\eta \leqslant 0, \end{cases} \tag{9.115b}$$

i podobnie

$$\int h^*(\xi, x)h(\eta, x)\,dx = \begin{cases} \min(|\xi|, |\eta|), & \text{jeśli } \xi\eta > 0, \\ 0, & \text{jeśli } \xi\eta \leqslant 0. \end{cases} \tag{9.115c}$$

Twierdzenie odwrotne do twierdzenia 9.10 jest niezwykle ważne z praktycznego punktu widzenia.

Twierdzenie 9.11. Przypuśćmy, że zadane są dwie funkcje $k(\xi, x)$ i $h(\xi, x)$ należące do L_2 dla wszystkich ξ i spełniające związki (9.115a), (9.115b) i (9.115c). Wtedy równania

$$\int_0^{\xi} g(x)\,dx = \int k^*(\xi, x) f(x)\,dx,$$

$$\int_0^{\xi} f(x)\,dx = \int h^*(\xi, x) g(x)\,dx$$

wyznaczają odwzorowanie unitarne U przestrzeni L_2 i odwzorowanie doń odwrotne, przy czym $g = Uf$ i $f = U^{-1} g$.

Dowód. W dowodzie powyższego twierdzenia zastosujemy pewną technikę matematyczną, z której jeszcze nie korzystaliśmy. Idea polega na użyciu funkcji k i h do zdefiniowania operatorów V i U działających na funkcje $e_{\xi}(x)$ wprowadzone przy dowodzie twierdzenia 9.10. Definiujemy

$$Ue_{\xi}(x) \equiv h(\xi, x), \qquad Ve_{\xi}(x) \equiv k(\xi, x).$$

Dla dowolnych funkcji e_{ξ}, e_{η} należących do rozpatrywanej klasy mamy zgodnie z warunkiem (9.115a)

$$(Ve_{\xi}, e_{\eta}) = (e_{\xi}, Ue_{\eta}).$$

Z warunku (9.115b) wynika, że

$$(Ue_{\xi}, Ue_{\eta}) = (e_{\xi}, e_{\eta}),$$

a z warunku (9.115c)

$$(Ve_{\xi}, Ve_{\eta}) = (e_{\xi}, e_{\eta}).$$

Chcielibyśmy teraz rozciągnąć definicję operatorów U i V na szerszą klasę funkcji. Pierwszym oczywistym uogólnieniem jest klasa tych elementów przestrzeni L_2, które mogą być przedstawione jako kombinacje liniowe funkcji $e_{\xi}(x)$. Będziemy mieli na przykład

$$U\Big[\sum_{n=1}^{N} a_n e_{\xi_\eta}(x)\Big] = \sum_{n=1}^{N} a_n h(\xi_n, x),$$

$$V\Big[\sum_{n=1}^{N} a_n e_{\xi_\eta}(x)\Big] = \sum_{n=1}^{N} a_n k(\xi_n, x).$$

Z własności addytywności iloczynu skalarnego wynika, że dla dowolnych ϕ i ψ należących do tej szerszej klasy, zachodzą związki

$$(V\phi, \psi) = (\phi, U\psi), \qquad (V\phi, V\psi) = (\phi, \psi), \qquad (U\phi, U\psi) = (\phi, \psi).$$

Wśród funkcji tej rozszerzonej klasy mamy między innymi funkcje schodkowe, które na odcinkach $I_n (n = 1, 2, \ldots, N)$ przyjmują stałe wartości $C_n (n = 1, 2, \ldots, N)$, a są równe zeru na pozostałym obszarze. Ale dowolna funkcja $f \in L_2$ może w sensie zbieżności średniej być przybliżana dowolnie dokładnie przez takie funkcje schodkowe, to znaczy możemy znaleźć taki ciąg funkcji schodkowych $\{\phi_n\}$, że dla dowolnej funkcji $f \in L_2$ zachodzi

$$\|\phi_n - f\| \to 0$$

przy $n \to \infty$. Ponieważ U jest unitarne, przynajmniej w klasie funkcji schodkowych, więc

$$||U\phi_m - U\phi_n|| < \varepsilon,$$

jeśli

$$||\phi_m - \phi_n|| < \varepsilon.$$

A zatem, gdy ciąg ϕ_n jest zbieżny do pewnego elementu f, to i ciąg $U\phi_n$ musi być zbieżny. Funkcję, do której ten ciąg jest zbieżny, definiujemy jako Uf. W ten sposób przy pomocy zasady ciągłości rozszerzyliśmy U do całej przestrzeni. Pozostaje jeszcze dowieść, że jeśli $f, g \in L_2$, to nadal zachodzi

$$(Uf, Ug) = (f, g), \quad (Vf, Vg) = (f, g), \quad (Vf, g) = (f, Ug).$$

Udowodnimy pierwszy z tych związków pozostawiając pozostałe czytelnikowi. Rozpatrzmy różnicę

$$(Uf, Ug) - (f, g) \equiv (Uf, Ug) - (U\phi_n, Ug) + (U\phi_n, Ug) - (U\phi_n, U\psi_m) + (U\phi_n, U\psi_m) - \\ - (\phi_n, g) + (\phi_n, g) - (f, g),$$

gdzie $\phi_n \to f$ i $\psi_m \to g$. Dla funkcji schodkowych

$$(U\phi_n, U\psi_m) = (\phi_n, \psi_m),$$

a zatem

$$|(Uf, Ug) - (f, g)| \leqslant |(Uf, Ug) - (U\phi_n, Ug)| + |(U\phi_n, Ug) - (U\phi_n, U\psi_m)| + \\ + |(\phi_n, \psi_m) - (\phi_n, g)| + |(\phi_n, g) - (f, g)| \leqslant \\ \leqslant |(Uf - U\phi_n, Ug)| + |(U\phi_n, Ug - U\psi_m)| + |(\phi_n, \psi_m - g)| + |(\phi_n - f, g)| \leqslant \\ \leqslant ||Uf - U\phi_n|| \cdot ||Ug|| + ||Ug - U\psi_m|| \cdot ||U\phi_n|| + ||\psi_m - g|| \cdot ||\phi_n|| + \\ + ||\phi_n - f|| \cdot ||g||.$$

Ale ponieważ $\phi_n \to f$ i $\psi_m \to g$ oraz z definicji $U\phi_n \to Uf$ i $U\psi_m \to Ug$, to prawą stronę powyższego oszacowania możemy uczynić dowolnie małą. Oznacza to, że

$$(Uf, Ug) = (f, g).$$

Podobnie

$$(Vf, Vg) = (f, g), \quad (Vf, g) = (f, Ug).$$

Dochodzimy więc do wniosku, że

$$U^\dagger U = I, \quad V^\dagger V = I, \quad V = U^\dagger.$$

Oznacza to, że U ma zarówno lewostronną, jak i prawostronną odwrotność

$$U^{-1} = U^\dagger = V,$$

czyli że U jest odwzorowaniem unitarnym, którego odwrotność wyznaczona jest przez V. Zgodnie z poprzednim twierdzeniem, jeśli $g = Uf$, to U i V można przedstawić następująco:

$$\int_0^\xi g(x)\,dx = \int k^*(\xi, x) f(x)\,dx,$$

$$\int_0^\xi f(x)\,dx = \int h^*(\xi, x) g(x)\,dx.$$

A zatem twierdzenie nasze zostało udowodnione.

Zauważmy, że równanie (9.114a) i (9.114b) można zapisać w wygodniejszej formie, a mianowicie

$$g(x) = \frac{d}{dx}\int k^*(x, y)f(y)dy, \tag{9.116a}$$

$$f(x) = \frac{d}{dx}\int h^*(x, y)g(y)dy. \tag{9.116b}$$

Niezwykle użyteczne wnioski dostajemy, jeśli rozpatrzymy szczególny przypadek powyższego twierdzenia, któremu odpowiadają funkcje

$$k(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{e^{-ixy}-1}{-iy},$$

$$h(x, y) = k^*(x, y).$$

Pokażemy teraz, że powyższe funkcje spełniają założenia twierdzenia 9.11. Rozpatrzmy na początku całkę

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(e^{i\xi x}-1)(e^{-i\eta x}-1)}{x^2}dx =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{x^2}[e^{i(\xi-\eta)x}-e^{-i\xi x}-e^{-i\eta x}+1]dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{x^2}[\cos(\xi-\eta)x-\cos\xi x-$$

$$-\cos\eta x+1]dx+\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{x^2}[\sin(\xi-\eta)x-\sin\xi x+\sin\eta x]dx.$$

Część urojona znika jako całka z funkcji nieparzystej po obszarze symetrycznym. Zauważmy, że całka jest dobrze określona, gdyż jest zbieżna dla $x = \pm\infty$ i nie jest osobliwa dla $x = 0$, a zatem

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{x^2}[\cos(\xi-\eta)x-\cos\xi x-\cos\eta x+1]dx =$$

$$= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\sin^2\frac{1}{2}|\xi|x+\sin^2\frac{1}{2}|\eta|x-\sin^2\frac{1}{2}|\xi-\eta|x\right]\frac{dx}{x^2}.$$

Dokonując w każdym z członów zamiany zmiennych, dostajemy

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)dx = \frac{1}{2\pi}[|\xi|+|\eta|-|\xi-\eta|]\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 z}{z^2}dz.$$

Całkę powyższą można łatwo obliczyć metodą całkowania w płaszczyźnie zespolonej (rozdział 6) i wynik wynosi π. Tak więc

$$\int k^*(\xi, x)k(\eta, x)dx = \frac{1}{2}(|\xi|+|\eta|-|\xi-\eta|) = \begin{cases}\min(|\xi|, |\eta|), & \text{jeśli } \eta\xi > 0,\\ 0, & \text{jeśli } \eta\xi \leqslant 0.\end{cases}$$

Podobnie

$$\int h^*(\xi, x)h(\eta, x)dx = \begin{cases}\min(|\xi|,|\eta|), & \text{jeśli } \eta\xi > 0,\\ 0, & \text{jeśli } \eta\xi \leqslant 0.\end{cases}$$

Wreszcie

$$\int_0^{\eta} k(\xi, x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\eta} \frac{e^{-i\xi x}-1}{-ix}\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\xi\eta} \frac{e^{-iz}-1}{-iz}\,dz$$

oraz

$$\int_0^{\xi} h^*(\eta, x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\xi} \frac{e^{-i\eta x}-1}{-ix}\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\xi\eta} \frac{e^{-iz}-1}{-iz}\,dz,$$

a zatem

$$\int_0^{\xi} h^*(\eta, x)\,dx = \int_0^{\eta} k(\xi, x)\,dx.$$

Przekonaliśmy się więc, że k i h spełniają założenia twierdzenia 9.11, możemy więc tezę tego twierdzenia sformułować dla tych konkretnych funkcji.

Wniosek. Wzory

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ixy}-1}{iy} f(y)\,dy, \tag{9.117a}$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixy}-1}{-iy} g(y)\,dy \tag{9.117b}$$

wyznaczają unitarne odwzorowanie przestrzeni L_2 oraz odwzorowanie do niego odwrotne.

Zauważmy, że przestawiając kolejność całkowania i różniczkowania dostajemy klasyczne wyniki Fouriera

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} f(y)\,dy \tag{9.118a}$$

i

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} g(y)\,dy. \tag{9.118b}$$

Jeśli odpowiednio interpretować całkę niewłaściwą w powyższych wzorach, to powyższa zamiana kolejności całkowania i różniczkowania może być łatwo uzasadniona. Zauważmy po pierwsze, że każda funkcja $f \in L_2$ może być dowolnie dokładnie aproksymowana w sensie normy przez funkcję znikającą na zewnątrz odpowiednio dużego przedziału $[-L, L]$; aproksymantą tą może być, np., funkcja f_L równa $f(x)$ w przedziale $[-L, L]$ oraz równa zeru na zewnątrz tego przedziału. Rozpatrzmy transformatę g_L tej aproksymanty f_L. Mamy

$$g_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-L}^{L} \frac{e^{ixy}-1}{iy} f(y)\,dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-L}^{L} \frac{e^{i(x+\varepsilon)y} - e^{ixy}}{iy\varepsilon} f(y)\,dy =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-L}^{L} \frac{\sin(\varepsilon y/2)}{(\varepsilon y/2)} e^{i\varepsilon y/2} e^{ixy} f(y)\,dy. \tag{9.119}$$

Funkcja podcałkowa jest co do wartości bezwzględnej mniejsza niż $|f(y)|$, gdyż

$$\left|\frac{\sin(\varepsilon y/2)}{(\varepsilon y/2)}\,e^{i\varepsilon y/2}e^{ixy}\right| = \left|\frac{\sin(\varepsilon y/2)}{(\varepsilon y/2)}\right| \leqslant 1$$

dla wszystkich wartości εy. Ale oczywiście funkcja $|f(y)|$ jest całkowalna na dowolnym skończonym odcinku, ponieważ

$$\int_{-L}^{L} |f(y)|\,dy = \int_{-\infty}^{\infty} [e_L(y)-e_{-L}(y)]^*|f(y)|\,dy = (e_L,|f|)-(e_{-L},|f|) < \infty,$$

gdyż funkcje e_L, e_{-L} oraz $|f|$ wszystkie należą do L_2. A zatem dla wszystkich wartości ε funkcja podcałkowa w wyrażeniu (9.119) jest ograniczona przez funkcję całkowalną, możemy więc zamienić kolejność całkowania i przejścia do granicy; dostajemy

$$g_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-L}^{L} e^{ixy}f(y)\,dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{d}{dx}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ixy}-1}{iy}f_L(y)\,dy.$$

Ponieważ ostatnie odwzorowanie jest unitarne, więc $Uf_L \to Uf = g$ wraz z $f_L \to f$ w sensie normy. Możemy więc napisać

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}f(y)\,dy,$$

jeśli całkę od $-\infty$ do $+\infty$ rozumiemy jako granicę w sensie normy całki od $-L$ do L przy L dążącym do nieskończoności. Całkowanie w transformacji odwrotnej

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}g(y)\,dy$$

należy interpretować w ten sam sposób. A zatem całka Fouriera prowadzi do odwzorowania unitarnego przestrzeni Hilberta. Odwzorowanie to oraz jego odwrotność dane są jawnie znanymi wzorami (9.118a) i (9.118b).

ZADANIA

1. Wykazać, że jeśli A jest zwartym operatorem hermitowskim ze skończoną liczbą różnych od zera wartości własnych, to można tak wybrać jego wektory własne, by tworzyły one zupełny ortonormalny układ w przestrzeni Hilberta.

2. Wykazać, że jeśli zmodyfikujemy jądro $k(x, y)$ na zbiorze miary zero, to nowe jądro $\tilde{k}(x, y)$ ma zasadniczo te same wektory własne i wartości własne co $k(x, y)$, i że rozwiązanie równania

$$f(x) = g(x)+\lambda\int k(x, y)f(y)\,dy$$

jest zasadniczo takie samo jak rozwiązanie równania

$$\tilde{f}(x) = g(x)+\lambda\int \tilde{k}(x, y)\tilde{f}(y)\,dy.$$

Co w powyższym sformułowaniu oznacza słowo „zasadniczo"?

3. Wykazać, że jeśli $\{\lambda_n\}$ i $\{x_n(t)\}$ są odpowiednio wartościami własnymi i wektorami własnymi pewnego zwartego, hermitowskiego operatora całkowego, to suma

$$S(t, t') = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n x_n(t) x_n^*(t')$$

jest zbieżna w sensie zbieżności średniej.

4. Dowieść, że jeśli $\{\lambda_n\}$ i $\{x_n(t)\}$ są odpowiednio wartościami własnymi i wektorami własnymi hermitowskiego operatora całkowego A z całkowalnym w kwadracie jądrem $a(t, t')$, to

$$\int dt \int dt' |a(t, t')|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2.$$

5. Rozpatrzmy hermitowski operator całkowy A z jądrem $a(t, t')$ całkowalnym w kwadracie i załóżmy dla uproszczenia, że wszystkie jego wartości własne są dodatnie.

a) Wykázać, że jeśli wybierzemy „próbny wektor własny" operatora A w postaci

$$\psi^t = \sum_{n=1}^{N} a_n f_n(t),$$

gdzie $\{f_n(t)$ dla $n = 1, 2, \ldots, \nu\}$ jest zadanym zbiorem funkcji, a następnie będziemy ekstremalizować $(\psi^t, A\psi^t)$ względem współczynników a_n, przy warunku ubocznym $(\psi^t, \psi^t) = 1$, to na współczynniki a_n dostaniemy równanie

$$Mv = \lambda N v. \tag{1}$$

W równaniu powyższym λ jest mnożnikiem Lagrange'a wprowadzonym dla spełnienia warunku ubocznego, a v jest przedstawionym w postaci kolumny wektorem, którego i-tą składową jest a_i. M i N są macierzami, których elementy i, j są dane wyrażeniami

$$M_{ij} = \int f_i^*(t) a(t, t') f_j(t') dt\, dt', \quad i, j = 1, 2, \ldots, \nu,$$

$$N_{ij} = \int f_i^*(t) f_j(t) dt, \quad i, j = 1, 2, \ldots, \nu.$$

b) Wykazać, że M i N są macierzami hermitowskimi.

c) Wykazać, że wartości λ spełniające równanie (1) muszą być rzeczywiste.

d) Czy wektory własne odpowiadające różnym wartościom λ będą ortogonalne?

e) Jaki jest związek między największą wartością λ spełniającą równanie (1) a największą wartością własną operatora A? Można sobie wyobrazić, że wybierając rozsądnie zbiór $\{f_n(t)\}$ możemy uzyskać bardzo dobre przybliżenie tej największej wartości własnej.

6. a) Oznaczmy przestrzeń funkcji całkowalnych w kwadracie na odcinku [0, 1] symbolem $L_2[0, 1]$. Wykazać, że operator P określony na $L_2[0, 1]$ wzorem

$$Pf(t) \equiv f(1-t)$$

komutuje z operatorem całkowym działającym na $L_2[0, 1]$, którego jądrem jest $a(t, t') = t_<(1-t_>)$.

b) Wykazać, że P jest samosprzężony i ograniczony. Ile wynosi norma operatora P?

c) Jakie są możliwe wartości własne operatora P? Czy P jest operatorem zwartym? Odpowiedź uzasadnij.

d) Czy można zgodnie z twierdzeniem 4.22 (zakładając, że jest ono słuszne w tym nieskończenie wymiarowym przypadku) poklasyfikować wektory własne operatora A [patrz punkt (a) tego zadania] według wartości własnych operatora P?

7. a) Czy posługując się operatorem P z zadania 9.6 można podać argument przemawiający za tym, że funkcja próbna

$$\psi_1^t = at(1-t)+bt^2(1-t)^2$$

będzie lepsza, jeśli chodzi o dokładniejsze przybliżenie największej wartości własnej operatora A, od funkcji

$$\psi_2^t = at(1-t)+bt^2(1-t).$$

A jest tu hermitowskim operatorem całkowym w przestrzeni $L_2[0, 1]$, którego jądrem jest $a(t, t') = t_<(1-t_>)$. Zwróćcie uwagę, że w paragrafie 9.2 wykazaliśmy, iż $\psi_0^t = at(1-t)$ jest bardzo dobrym punktem wyjścia.

b) Wyjaśnij, dlaczego zarówno ψ_1^t, jak i ψ_2^t muszą dla największej wartości własnej operatora A dać wartość co najmniej tak bliską rzeczywistej, jak to daje funkcja ψ_0^t (wynikające z niej oszacowanie wartości własnej przeprowadziliśmy w paragrafie 9.2).

c) Posługując się operatorem P podaj bez żadnych dodatkowych obliczeń (posługując się jednak obliczeniami przeprowadzonymi w paragrafie 9.2), jakie oszacowanie największej wartości własnej operatora A da funkcja próbna ψ_2^t z punktu (a).

8. a) Wykazać, że funkcja $\psi^t = at(1-t)(1-2t)$ jest ortogonalna do $\sin \pi t$ na odcinku [0,1], a zatem jest to właściwa funkcja próbna do podjęcia wysiłku oszacowania drugiej kolejnej największej wartości własnej (i odpowiadającego jej wektora własnego) operatora A o jądrze $a(t, t') = t_<(1-t_>)$ działającego w przestrzeni $L_2[0, 1]$.

Wskazówka: Można to stwierdzić brutalnym całkowaniem, ale o wiele prościej jest skorzystać z argumentów opartych na istnieniu operatora P z zadania 9.6.]

b) Posługując się funkcją ψ^t podaną w punkcie (a), znajdź oszacowanie drugiej kolejnej największej wartości własnej operatora A i porównaj to oszacowanie ze ścisłą wartością $\lambda_2 = 1/(4\pi^2)$.

9. Rozpatrzmy atom wodoru składający się z protonu i związanego z nim elektronu. Zaniedbując zarówno istnienie spinu protonu jak i elektronu można pokazać w oparciu o nierelatywistyczne równanie Schrödingera

$$H_0\phi_n = \lambda_n^{(0)}\phi_n,$$

że istnieje nieskończona liczba stanów związanych, gdzie H_0 jest liniowym operatorem hermitowskim, którego dokładna postać jest tu dla nas nieistotna. Stan o najniższej energii jest niezdegenerowany, a jego wartość własna $\lambda_1^{(0)} \doteq -13{,}6$ eV, funkcją własną jest zaś ϕ_1. Następny stan o wartości własnej $\lambda_2^{(0)} = -3{,}4$ eV jest czterokrotnie zdegenerowany. Wektory własne należące do tej zdegenerowanej wartości własnej możemy oznaczyć symbolami ϕ_{2s}, ϕ_{2p+}, ϕ_{2p0} i ϕ_{2p-}, gdzie 2 odnosi się do $\lambda_2^{(0)}$, s i p oznaczają odpowiednio, że jeden stan ma moment pędu 0 (stan s), a pozostałe trzy mają moment pędu $\hbar$ (stan p), wreszcie znaczki $+$, 0 oraz $-$ oznaczają, że składowa momentu pędu na oś z w stanie p jest odpowiednio $\hbar$, 0 lub $-\hbar$. W pierwszym przybliżeniu stany te są zdegenerowane, lecz dokładniejsza analiza pozwala stwierdzić, że wskutek elektromagnetycznych efektów samooddziaływania stan $2s$ leży nieco powyżej stanu $2p$, przy czym różnica energii

L wynosi w przybliżeniu $4 \cdot 10^{-6}$ eV. Stanami leżącymi najbliżej tego bardzo słabo oddzielonego dubletu $2s$ i $2p$ są stany $3s$, $3p$ i $3d$ (odległe o ok. 2 eV).

a) Przypuśćmy teraz, że do atomu wodoru przyłożono zewnętrzne pole elektryczne, a zatem stany układu (atomu w polu elektrycznym) będą opisane wektorami własnymi równania

$$H\psi_n = \lambda_n \psi_n,$$

gdzie $H = H_0 + H_1$, a H_0 jest poprzednio wprowadzonym operatorem i $H_1 = eEz$ oraz E jest natężeniem pola elektrycznego i e ładunkiem elektronu. Zakładamy dalej, że natężenie pola E jest takie, że zmiana energii atomu wodoru jest rzędu wielkości L. Opierając się na teorii zaburzeń wyłożonej w paragrafie 9.2, o której zakładamy, że jest słuszna dla tego problemu, należy wyjaśnić, dlaczego obliczając wpływ pola elektrycznego na stan $2s$ możemy, nie popełniając znaczącego błędu, zapomnieć o wszystkich stanach z wyjątkiem stanów $2p$.

b) Wykazać, że przy obliczaniu funkcji ψ_{2s} (jest to funkcja, która redukuje się do ϕ_{2s}, jeśli wyłączamy pole elektryczne) z wzoru (9.34) nie znikają w nim tylko dwa pierwsze człony. Wykazać, że nie byłoby tak, gdybyśmy korzystali z analogicznego wzoru Rayleigha–Schrödingera (9.40). Należy skorzystać z faktu, że

$$(\phi_{2s}, H_1\phi_{2p+}) = (\phi_{2s}, H_1\phi_{2p-}) = (\phi_{2p}, H_1\phi_{2p+}) = (\phi_{2p}, H_1\phi_{2p-}) = 0,$$

a jedynym nieznikającym elementem macierzowym, którego wartość możemy oznaczyć przez M, jest

$$(\phi_{2s}, H_1\phi_{2p0}) = M.$$

c) Korzystając z wyniku punktu (b) oraz z wzorów (9.33) i (9.34) wyrazić ψ_{2s} i λ_{2s} poprzez ϕ_{2s}, ϕ_{2p0}, L i M.

d) Zbadać przejście graniczne $L \to 0$ przy ustalonym E (tzn. M). Przedyskutować otrzymany w granicy prosty wynik dla ψ_{2s} i λ_{2s}.

10. Rozpatrzmy wielkość

$$\Phi = (f, (A_0 - \lambda_1^{(0)})f) + 2(f, (A_1 - \lambda_1^{(1)})x_1^{(0)}),$$

gdzie $\lambda_1^{(0)}$ jest największą wartością własną operatora A_0 odpowiadającą wektorowi własnemu $x_1^{(0)}$ oraz A_1 jest małą poprawką do operatora A_0, zaś $\lambda_1^{(1)} = (x_1^{(0)}, A_1 x_1^{(0)})$. Zakładamy, że widmo operatora A_0 jest niezdegenerowane. A_0 i A_1 są oba zwartymi operatorami hermitowskimi w rzeczywistej przestrzeni Hilberta. Wykazać, że dla każdego $f \in H$ zachodzi

$$\Phi \leqslant \lambda_1^{(2)}, \tag{1}$$

gdzie $\lambda_1^{(2)}$ jest dane wzorem (9.42). Wykazać, że znak równości obowiązuje w (1) wtedy i tylko wtedy, gdy f jest równe $f_1^{(1)}$ danemu wzorem (9.40). Zauważmy, że założenie, iż $\lambda_1^{(0)}$ jest największą wartością własną operatora A_0, jest decydujące, a założenie o rzeczywistości przestrzeni Hilberta jest również bardzo ważne. Jak należałoby zmodyfikować Φ, gdybyśmy powyższy wynik chcieli rozszerzyć na zespoloną przestrzeń Hilberta?

W ten sposób wyprowadziliśmy *zasadę wariacyjną* (zasadę maksimum) dla $\lambda_1^{(2)}$ pozwalającą wyznaczyć $\lambda_1^{(2)}$ i $f_1^{(1)}$ metodą konstruowania funkcji próbnych w sposób przedstawiony w paragrafie 9.2. Można więc uniknąć konieczności obliczania nieskończo-

nych sum we wzorach (9.40) i (9.42), przynajmniej dla $f_1^{(1)}$ i $\lambda_1^{(2)}$. Można pokazać, że sumowania tego dzięki użyciu odpowiednich zasad wariacyjnych można uniknąć dla wszystkich $f_i^{(n)}$ i $\lambda_i^{(n)}$.

11.a) Korzystając z reguły Simpsona obliczania całek rzeczywistych należy podać wyrażenie macierzowe pozwalające rozwiązywać w przybliżony sposób równanie

$$f(x) = g(x) + \lambda \int_a^b k(x, y) f(y)\, dy,$$

gdzie $g(x)$ i $k(x, y)$ są funkcjami ciągłymi. (Regułę Simpsona i jej wyprowadzenie można znaleźć w dowolnym podręczniku rachunku różniczkowego i całkowego, np. R. Courant *Differential and Integral Calculus*.) Wykazać w szczególności, że jeśli przedział całkowania $[a, b]$ podzielić przy pomocy $2n+1$ równoodległych punktów ($n > 1$), $a = x_1, x_2, \ldots, x_{2n}$, $b = x_{2n+1}$, to równanie całkowe sprowadza się do

$$a = (I - \lambda MD)^{-1} b,$$

gdzie $a_i = f(x_i)$, $b_i = g(x_i)$, $M_{ij} = k(x_i, x_j)$, a D jest macierzą diagonalną, której elementami są liczby $D_{11} = \frac{1}{3}$, $D_{22} = \frac{4}{3}$, $D_{33} = \frac{2}{3}$, $\ldots$, $D_{2n-1,2n-1} = \frac{2}{3}$, $D_{2n,2n} = \frac{4}{3}$, $D_{2n+1,2n+1} = \frac{1}{3}$.

b) Pokazać, jak przy pomocy tej metody można rozwiązywać jednorodne zagadnienie własne [tj. $g(x) \equiv 0$].

c) Wykazać, że jeśli $k(x, y)$ jest rzeczywistym symetrycznym jądrem, to operatorowe zagadnienie własne można sprowadzić do macierzowego równania własnego z jedną rzeczywistą, symetryczną macierzą.

12. Dla równania całkowego

$$f(x) = 1 + 4 \int_0^{1/2} \sqrt{1 - xy}\, f(y)\, dy \tag{1}$$

porównać ze sobą funkcje $f_1(x)$, $f_2(x)$ i $f_3(x)$ otrzymane przy pomocy kolejnych przybliżeń jądra w równaniu (1) przez jądra skończonego rzędu:

a) $\sqrt{1 - xy} \cong 1$, b) $\sqrt{1 - xy} \cong 1 - \frac{1}{2} xy$,

c) $\sqrt{1 - xy} \cong 1 - \frac{1}{2} xy - \frac{1}{8} x^2 y^2$.

Przybliżenia te otrzymuje się w oczywisty sposób rozwijając pierwiastek kwadratowy w szereg Taylora.

13. Celem tego zadania i następnych trzech jest dalsze rozwinięcie metody Fredholma rozwiązywania liniowych równań całkowych z jądrem $k(x, y)$. Zaczniemy od zdefiniowania wyznacznika Δ, będącego funkcją $2n$ zmiennych:

$$\Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2, \ldots, x_n \\ y_1, y_2, \ldots, y_n \end{bmatrix} \equiv \begin{vmatrix} k(x_1, y_1), k(x_1, y_2), \ldots, k(x_1, y_n) \\ k(x_2, y_1), k(x_2, y_2), \ldots, k(x_2, y_n) \\ \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\ k(x_n, y_1), k(x_n, y_2), \ldots, k(x_n, y_n) \end{vmatrix}.$$

W dalszym ciągu będziemy zakładali, że $k(x, y)$ jest funkcją ciągłą w kwadracie $a \leqslant x \leqslant b$ i $a \leqslant y \leqslant b$ oraz $|k(x, y)| \leqslant M$. Sposób uogólnienia na przypadek np. nieskończonych przedziałów i jądra całkowalnego w kwadracie jest dość oczywisty.

a) Rozpatrzmy nieskończony szereg

$$D(\lambda) = 1 - \lambda \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x_1 \\ x_1 \end{bmatrix} dx_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \int_a^b \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2 \\ x_1, x_2 \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 + \ldots$$

$$+ (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} \int_a^b \int_a^b \ldots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2, \ldots, x_n \\ x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix} dx_1 dx_2 \ldots dx_n + \ldots .$$

Udowodnić, korzystając z nierówności Hadamarda (patrz paragraf 4.3), że współczynnik w rozwinięciu stojący przy $\frac{\lambda^n}{n!}$ jest co do wartości bezwzględnej mniejszy od $M^n n^{n/2}$, a co za tym idzie, szereg $D(\lambda)$ jest zbieżny dla wszystkich λ. Funkcję $D(\lambda)$ nazywa się *wyznacznikiem Fredholma.*

b) Rozpatrzmy teraz inny szereg nieskończony

$$N(x, y, \lambda) = k(x, y) - \lambda \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x, x_1 \\ y, x_1 \end{bmatrix} dx_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \int_a^b \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2 \\ y, y_1, x_2 \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 + \ldots +$$

$$+ (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} \int_a^b \int_a^b \ldots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2, \ldots, x_n \\ y, x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 \ldots dx_n + \ldots .$$

Udowodnić, stosując metody, z których korzystaliśmy już w punkcie (a), że szereg ten jest zbieżny dla wszystkich λ do funkcji zmiennych x i y ciągłej w kwadracie $a \leqslant x \leqslant b$, $a \leqslant y \leqslant b$. (Motywację dla wprowadzenia do rozważań funkcji N i D znaleźć można na przykład w książce F. Smithiesa, *Integral Equations*, rozdział 5.)

14.a) Rozwijając wyznacznik

$$\Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2, \ldots, x_n \\ y, x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix}$$

względem pierwszego wiersza wykazać, że

$$\Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2, \ldots, x_n \\ y, x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix} = k(x, y) \Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2, \ldots, x_n \\ x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix} +$$

$$+ \sum_{i=1}^{n} k(x, x_i) \Delta \begin{bmatrix} x_i, x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_n \\ y, x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_n \end{bmatrix};$$

a zatem, że

$$\int_a^b \int_a^b \ldots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2, \ldots, x_n \\ y, x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 \ldots dx_n =$$

$$= k(x, y) \int_a^b \int_a^b \ldots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2, \ldots, x_n \\ x_1, x_2, \ldots, x_n \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 \ldots dx_n -$$

$$- n \int_a^b \int_a^b \ldots \int_a^b k(x, z) \Delta \begin{bmatrix} z, x_1, x_2, \ldots, x_{n-1} \\ y, x_1, x_2, \ldots, x_{n-1} \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 \ldots dx_{n-1}\, dz.$$

b) Rozwijając Δ względem pierwszej kolumny wykazać podobnie jak w punkcie (a), że

$$\int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2, \dots, x_n \\ y, x_1, x_2, \dots, x_n \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 \dots dx_n =$$

$$= k(x, y) \int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2, \dots, x_n \\ x_1, x_2, \dots, x_n \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 \dots dx_n -$$

$$-n \int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b \Delta \begin{bmatrix} x, x_1, x_2, \dots, x_{n-1} \\ z, x_1, x_2, \dots, x_{n-1} \end{bmatrix} k(z, y) dx_1\, dx_2 \dots dx_{n-1}\, dz.$$

15.a) Korzystając z wyników zadania 9.14(a) dla wyrażenia $N(x, y, \lambda)$ wprowadzonego w zadaniu 9.13(b) wykazać, że

$$N(x, y, \lambda) = k(x, y) D(\lambda) + \lambda \int_a^b k(x, z) N(z, y, \lambda)\, dz.$$

Podobnie korzystając z wyniku zadania 9.14(b) wykazać, że

$$N(x, y, \lambda) = k(x, y) D(\lambda) + \lambda \int_a^b N(x, z, \lambda) k(z, y) dz.$$

b) Definiując

$$R(x, y, \lambda) \equiv \frac{N(x, y, \lambda)}{D(\lambda)}$$

wykazać, że dwa równania punktu (a) można przepisać w postaci

$$(I - \lambda K)\,(I + \lambda R(\lambda)) = I \quad \text{i} \quad (I + \lambda R(\lambda))\,(I - \lambda K) = I,$$

gdzie $R(\lambda)$ jest operatorem całkowym o jądrze $R(x, y, \lambda)$, a K jest operatorem całkowym o jądrze $k(x, y)$. Widzimy więc, że operator $I + \lambda R(\lambda)$ jest odwrotnością operatora $(I - \lambda K)$, to znaczy że w terminologii tego rozdziału $R(\lambda)$ jest rezolwentą operatora K. A zatem równanie

$$f = g + \lambda K f$$

można rozwiązać dla wszystkich wartości λ, dla których istnieje $R(\lambda)$, i rozwiązanie dane jest przez

$$f = g + \lambda R(\lambda) g.$$

Wyrażone przez znane jądra rozwiązanie to może być zapisane w następujący sposób:

$$f(x) = g(x) + \lambda \int_a^b R(x, y, \lambda) g(y) dy = g(x) + \frac{\lambda}{D(\lambda)} \int_a^b N(x, y, \lambda) g(y) dy.$$

16. Jedyne co pozostało do rozstrzygnięcia to zbadanie, dla jakich wartości λ nie istnieje rezolwenta $R(\lambda)$. Oczywiście ponieważ $N(x, y, \lambda)$ i $D(\lambda)$ są, jak to widać z zadania 9.13, funkcjami analitycznymi zmiennej λ, to $R(\lambda)$ nie istnieje tylko dla takich λ, dla których

$D(\lambda)$ znika, a zarazem oczywiście $N(x, y, \lambda)$ nie ma zera kompensującego zero mianownika. W rzeczywistości takie skracanie się zer nie może zachodzić dla naszego przypadku.

a) Korzystając z wyników zadania 9.13 wykazać, że

$$\frac{dD(\lambda)}{d\lambda} = -\int_a^b N(x, x, \lambda)\,dx.$$

b) Korzystając z powyższego rezultatu dowieść, że jeśli $D(\lambda)$ ma zero w punkcie $\lambda = \lambda_0$, to $N(x, y, \lambda)$ nie może mieć zera w tym punkcie. Dowód należy przeprowadzić metodą sprowadzenia do niedorzeczności. Piszemy najpierw $D(\lambda) = (\lambda - \lambda_0)d(\lambda)$, gdzie $d(\lambda)$ jest funkcją analityczną, następnie zakładamy, że $N(x, y, \lambda)$ można również zapisać w tej postaci, tzn. jako $N(x, y, \lambda) = (\lambda - \lambda_0)\,n(x, y, \lambda)$, gdzie $n(x, y, \lambda)$ jest również analityczną funkcją λ, i wreszcie wykazujemy, że przy tych założeniach równanie punktu (a) nie może być prawdziwe. Tak więc zera funkcji $D(\lambda)$ są dokładnie tymi wartościami λ, dla których $R(\lambda)$ nie istnieje. Dla tych wartości będą natomiast istniały rozwiązania równania jednorodnego $f = \lambda Kf$.

17. Niech K będzie operatorem całkowym z jądrem ciągłym i niech widmo tego operatora będzie niezdegenerowane. Korzystając z wyników ustalonych w zadaniach 9.15(a) i 9.16(a) wykazać, że residuum funkcji $R(x, y, \lambda)$ w biegunie λ_n jest równe

$$-\frac{\phi_n(x)\psi_n^*(y)}{\int \phi_n(x)\psi_n^*(x)\,dx},$$

gdzie ϕ_n spełnia równanie $\lambda_n K\phi_n = \phi_n$, a ψ_n spełnia równanie sprzężone $\lambda_n^* K^\dagger \psi_n = \psi_n$. Zwróćmy uwagę, że dla jąder hermitowskich wynik ten jest zawarty implicite w rozwinięciu rezolwenty na funkcje własne danym wzorem (9.22).

18. Wykazać, że jeśli $k(x, y) = \phi(x)\psi^*(y)$, to metoda Fredholma sprowadza się do

$$D(\lambda) = 1 - \lambda \int \phi(x)\psi^*(x)dx, \qquad N(x, y, \lambda) = k(x, y) = \phi(x)\psi^*(y),$$

to znaczy, że wszystkie wyższe człony szeregów Fredholma dla $D(\lambda)$ i $N(x, y, \lambda)$ znikają. Wykazać, że prowadzi to do rozwiązania równania $f = g + \lambda Kf$ zgodnego z wzorem (8.57).

19. Zakładając, że λ jest dostatecznie małe, rozwinąć $[D(\lambda)]^{-1}$ względem potęg λ i wykazać z dokładnością do λ^2, że $R(x, y, \lambda)$ jest identyczne z szeregiem Neumanna dla rezolwenty wziętym w tym samym przybliżeniu. Można wykazać, że równość ta jest słuszna we wszystkich rzędach, czego oczywiście oczekujemy.

20. Przypuśćmy, że chcemy rozszerzyć metodę Fredholma na jądra całkowalne w kwadracie. Najpoważniejsza trudność polega na pojawieniu się w rozważaniach stanowiących treść zadań od 9.13 do 9.16 członów takich jak

$$I = \int_a^b k(x, x)\,dx.$$

Nawet jeśli $k(x, y)$ jest całkowalne w kwadracie, całka I może być rozbieżna, a zatem metoda upada. Zdarza się to na przykład w przypadku jąder postaci $k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')V(\mathbf{r})$, gdzie $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ jest dane wzorem (7.66), nawet jeśli dokonać odpowiednich modyfikacji z wprowadzeniem funkcji wagowej w sposób przedstawiony w paragrafie 8.3.

a) Podać argumenty sugerujące, że możemy zawsze zmodyfikować $k(x, y)$ w taki sposób, by $k(x, x) = 0$ bez zmiany w istotny sposób rozwiązań równania

$$f(x) = g(x) + \lambda \int k(x, y) f(y)\, dy, \tag{1}$$

gdzie o $k(x, y)$ zakładamy, że jest całkowalne w kwadracie.

[*Wskazówka*: Porównaj z zadaniem 9.2.]

b) Z części (a) tego zadania wypływa sugestia, by usunąć trudności z całkami takimi jak

$$\int_a^b k(x, x)\, dx$$

po prostu przez następujące definicje:

$$\tilde{D}(\lambda) = 1 - \lambda \int \tilde{\Delta} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_1 \end{bmatrix} dx_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \int\int \tilde{\Delta} \begin{bmatrix} x_1, x_2 \\ x_1, x_2 \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 + \ldots.$$

$$\tilde{N}(x, y, \lambda) = k(x, y) - \lambda \int \tilde{\Delta} \begin{bmatrix} x, x_1 \\ y, x_1 \end{bmatrix} dx_1 + \frac{\lambda^2}{2!} \int\int \tilde{\Delta} \begin{bmatrix} x, x_1, x_2 \\ y, x_1, x_2 \end{bmatrix} dx_1\, dx_2 + \ldots,$$

gdzie $\tilde{\Delta}$ jest takim samym wyznacznikiem jak Δ, z wyjątkiem tego, że gdziekolwiek w Δ pojawi się człon $k(x_i, x_i)$, tam zastępujemy go przez 0. A zatem

$$\Delta \begin{bmatrix} x_1 \\ x_1 \end{bmatrix} = k(x_1, x_1), \qquad \tilde{\Delta} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_1 \end{bmatrix} = 0,$$

$$\Delta \begin{bmatrix} x_1, x_2 \\ x_1, x_2 \end{bmatrix} = k(x_1, x_1) k(x_2, x_2) - k(x_1, x_2) k(x_2, x_1),$$

$$\tilde{\Delta} \begin{bmatrix} x_1, x_2 \\ x_1, x_2 \end{bmatrix} = -k(x_1, x_2) k(x_2, x_1),$$

gdzie $\tilde{\Delta}$ jest wyznacznikiem otrzymanym z Δ przez zastąpienie w nim zerami członów postaci $k(x_i, x_i)$ w każdym miejscu, gdzie człony takie się pojawiają. Kładąc

$$\tilde{R}(x, y, \lambda) \equiv \frac{\tilde{N}(x, y, \lambda)}{\tilde{D}(\lambda)}$$

i rozwijając $[\tilde{D}(\lambda)]^{-1}$ (przy założeniu, że λ jest dostatecznie małe) w szereg wykazać, że $\tilde{R}(x, y, \lambda)$ jest do rzędu λ^2 równe rozwinięciu Neumanna rezolwenty operatora K. Można pokazać, że równość ta zachodzi we wszystkich rzędach. W istocie, modyfikacja sugerowana przez to zadanie jest poprawna, to znaczy $\tilde{N}(x, y, \lambda)$, $\tilde{D}(\lambda)$ i $\tilde{R}(x, y, \lambda)$ zdefiniowane powyżej wyznaczają rzeczywiście rozwiązanie równania (1).

21. Znaleźć funkcję $\tilde{D}(\lambda)$ zdefiniowaną w zadaniu 20 z dokładnością do członów λ^2 dla jądra równania całkowego (9.102), jeśli $V(\mathbf{r}) = g^2 e^{-\mu r}/r$. Użyteczne będzie wprowadzenie zmiennych s, t, u zdefiniowanych w paragrafie 8.3. Zauważmy, że całka, którą trzeba wykonać, jest bardzo podobna do całki, na którą natknęliśmy się przy obliczaniu normy tego jądra w paragrafie 8.3. Jaka jest różnica między tymi dwoma przypadkami dla q_i rzeczywistych?

22. Wykazać, korzystając z równań (9.104) i (9.105), że dla dowolnego rzeczywistego potencjału $V(r)$ zachodzi

$$\mathrm{Im} f_0^{s\,2B}(q_i) = q_i [f_0^{sB}(q_i)]^2,$$

gdzie $f_0^{s\,2B}(q_i)$ jest drugim przybliżeniem iteracyjnym amplitudy rozpraszania.

23. Oblicz drugie przybliżenie Borna dla amplitudy $F_0^s(p_i)$ rozpraszania w fali s, zdefiniowanej równaniami (9.112) i (9.113). Porównaj wynik z krzywymi na rysunkach 9.4, 9.5 i 9.6, i poczyń, jeśli to jest niezbędne, odpowiednie komentarze.

24. Można pokazać, że wielkość $f_0^s(q_i)$ zdefiniowana w paragrafie 9.5 daje się przedstawić w postaci

$$f_0^s(q_i) = \frac{1}{q_i} e^{i\delta_0} \sin \delta_0,$$

gdzie δ_0 jest funkcją q_i i zwie się przesunięciem fazowym fali s. Wykorzystując rys. 9.4 sporządź wykres funkcji $\delta_0(q_i)$ w funkcji q_i. Czy wyniki otrzymane dla $\delta_0(q_i)$ z dwóch różnych krzywych na rys. 9.4 są zgodne? W jakim stopniu δ_0 jest określone jednoznacznie?

25.a) Wyprowadź równania od (9.98) do (9.101) korzystając z metody zastosowanej w paragrafie 9.3 do dyskusji problemu jednorodnego.

b) Wyprowadź równanie, które „rozwiązuje" równanie całkowe $f = g + \lambda K f$ w duchu całki Riemanna [patrz równanie (9.50)].

c) Jeśli masz dostęp do elektronicznej maszyny cyfrowej, wybierz kilka równań całkowych i rozwiąż je numerycznie korzystając z wyników punktu (a) lub (b). Można na przykład rozpatrzyć równania (9.112) i (9.113), ale z potencjałem przeciwnego znaku (tzn. $mV/\mu^2\hbar^2 = -1{,}4$). Przekonacie się, że amplituda rozpraszania wygląda całkiem inaczej dla dodatniego V, a w szczególności zupełnie inaczej zachowuje się δ_0 jako funkcja q_i (patrz zadanie 9.24). Zmiana ta spowodowana jest istnieniem dla potencjału przyciągającego (ujemne V) stanu związanego w fali s, który oczywiście nie występuje dla potencjału odpychającego.

26. Przypuśćmy, że $\{\phi_n\}$ i $\{\psi_m\}$ są ciągami funkcji schodkowych, i że $\phi_n \to f$, $\psi_m \to g$. Wykazać, że jeśli dla dowolnych funkcji schodkowych ϕ i ψ mamy

$$(V\phi, \psi) = (\phi, U\psi),$$

$$(V\phi, V\psi) = (\phi, \psi)$$

oraz

$$(U\phi, U\psi) = (\phi, \psi),$$

to ciągi $\{V\phi_n\}$ i $\{U\psi_m\}$ są zbieżne do pewnych granic w przestrzeni Hilberta, i jeśli granice te oznaczymy odpowiednio przez Vf i Ug, to

$$(Vf, g) = (f, Ug).$$

Jest to uzupełnienie dowodu twierdzenia 9.11.

27.a) Funkcje Hermite'a $\mathscr{H}_n(x)$ definiujemy w następujący sposób:

$$\mathscr{H}_n(x) \equiv H_n(x) e^{-x^2/2},$$

gdzie $H_n(x)$ jest n-tym wielomianem Hermite'a spełniającym równanie (5.105). Wykazać, że funkcje Hermite'a spełniają równanie różniczkowe

$$\mathscr{H}_n''(x) - x^2 \mathscr{H}_n(x) + (2n+1)\mathscr{H}_n(x) = 0.$$

Zauważmy, że zgodnie z równaniem (5.100) funkcje $\mathscr{H}_n(x)$ i $\mathscr{H}_m(x)$ są do siebie ortogonalne na odcinku $[-\infty, \infty]$.

b) Wykazać, że $\mathscr{H}_n(x)$ są funkcjami własnymi operatora U_F unitarnej transformacji Fouriera. Dowód sprowadza się do wykazania, że transformata $\hat{\mathscr{H}}_n(x)$ funkcji Hermite'a $\mathscr{H}_n(x)$ spełnia to samo równanie różniczkowe co $\mathscr{H}_n(x)$, a więc że funkcje $\mathscr{H}_n(x)$ i $\hat{\mathscr{H}}_n(x)$ muszą być równe z dokładnością do czynnika multiplikatywnego. W języku operatorów zapiszemy ten fakt jako

$$U_F \mathscr{H}_n = \lambda_n \mathscr{H}_n,$$

gdzie λ_n nie zostało na razie wyznaczone.

[*Wskazówka*: $x^2 e^{ixy} = -(d^2/dy^2)e^{ixy}$, całkowanie przez części również będzie przydatne.]

c) Wykazać, że jeśli $f(x)$ jest dowolną funkcją całkowalną w kwadracie, to $U_F^2 f(x) = f(-x)$. W oparciu o to dowieść, że jedynymi wartościami własnymi operatora U_F mogą być liczby 1, -1, i oraz $-i$. Istnieje nieskończenie wiele funkcji Hermite'a należących do każdej z tych czterech wartości własnych. Podaj prostą charakterystykę funkcji Hermite'a o rzeczywistych wartościach własnych oraz funkcji Hermite'a o urojonych wartościach własnych.

LITERATURA POMOCNICZA

J. W. Dettman *Mathematical Methods in Physics and Engineering*. McGraw-Hill. New York 1962.
M. L. Goldberger i K. M. Watson *Collision Theory*. Wiley. New York 1964.
R. G. Newton *Scattering Theory of Waves and Particles*. McGraw-Hill. New York 1966.
F. Riesz i B. Sz. Nagy *Functional Analysis*. Ungar. New York 1955.
F. Smithies *Integral Equations*. Cambridge University Press. New York 1958.

WSTĘP DO TEORII GRUP

WSTĘP

Dotychczas w tej książce zajmowaliśmy się obiektami (wektorami), które można było składać w sposób zasadniczo addytywny, a zatem przemienny. Rozpatrując te obiekty doszliśmy w sposób naturalny do odwzorowań przekształcających jeden wektor w drugi. Przekonaliśmy się, że same te odwzorowania mogą być traktowane jako elementy przestrzeni wektorowej. Ponieważ jednak odwzorowania przekształcają jeden wektor w drugi, to możemy wykonywać nad tymi odwzorowaniami operację składania o charakterze *multiplikatywnym*; w tym przypadku jednak nie jest na ogół spełnione prawo przemienności W ostatnim rozdziale tej książki chcemy wprowadzić pewne metody badania zbioru obiektów scharakteryzowanych poprzez ich własności multiplikatywne. Zbiór taki nazywa się *grupą*.

10.1. PODEJŚCIE INDUKCYJNE

Przypomnijmy najpierw definicję grupy podaną już w rozdziale 3.

Definicja 10.1. Grupa G jest to zbiór obiektów zamknięty ze względu na operację składania, którą oznaczać będziemy kropką. Słowo zamknięty oznacza, że jeśli $a, b \in G$, to i $a \cdot b \in G$. Operacja składania musi spełniać następujące aksjomaty:

1) $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$ (prawo łączności)

2) istnieje element e, zwany jedynką, taki że $a \cdot e = a$ dla wszystkich $a \in G$.

3) dla każdego $a \in G$ istnieje element odwrotny a^{-1}, taki że $a \cdot a^{-1} = e$.

Zauważmy, że w tej definicji zażądaliśmy jedynie, by jedynka była jedynką prawostronną, a odwrotność prawą odwrotnością. Jednakże ze względu na inne własności grupy pociąga to za sobą fakt, że e jest również jedynką lewostronną ($e \cdot a = a$) oraz że a^{-1} jest również lewostronną odwrotnością ($a^{-1} \cdot a) = e$.

Aby tego dowieść, zauważmy, że ponieważ element $a^{-1} \in G$, to musi on mieć element odwrotny, który oznaczymy $(a^{-1})^{-1}$. Zgodnie z aksjomatem (3) zachodzi

$$(a^{-1}) \cdot (a^{-1})^{-1} = e. \tag{10.1}$$

Korzystając z aksjomatów (1), (2) i (3) możemy powyższą tożsamość (10.1) przepisać w postaci

$$e = a^{-1} \cdot (a^{-1})^{-1} = (a^{-1} \cdot e) \cdot (a^{-1})^{-1} = [a^{-1} \cdot (a \cdot a^{-1})] \cdot (a^{-1})^{-1} =$$
$$= [(a^{-1} \cdot a) \cdot a^{-1}] \cdot (a^{-1})^{-1} = (a^{-1} \cdot a) \cdot [a^{-1} \cdot (a^{-1})^{-1}].$$

Korzystając jeszcze raz z tożsamości (10.1) mamy

$$e = (a^{-1} \cdot a) \cdot e = a^{-1} \cdot (a \cdot e).$$

Aksjomat (2) mówi, że $a \cdot e = a$, dostajemy więc ostatecznie

$$e = a^{-1} \cdot a. \tag{10.2}$$

A zatem a^{-1} jest nie tylko prawostronną, ale i lewostronną odwrotnością. Należy zauważyć, że wynik ten różni się bardzo od sytuacji, z którą spotykamy się po badaniu ogólnych operatorów liniowych; dla nich istnienie prawostronnej odwrotności nie pociąga koniecznie istnienia odwrotności lewostronnej.

Opierając się na powyższym rezultacie możemy natychmiast dowieść, że e musi być jedynką lewostronną. Z aksjomatu (2) wynika, że e jest jedynką prawostronną, to znaczy

$$a \cdot e = a,$$

ale zgodnie z wzorem (10.2) jest to równoważne relacji

$$a \cdot (a^{-1} \cdot a) = a.$$

Korzystając z aksjomatów (1) i (3) otrzymujemy

$$a = a \cdot (a^{-1} \cdot a) = (a \cdot a^{-1}) \cdot a = e \cdot a,$$

to znaczy

$$a = e \cdot a,$$

a więc e jest rzeczywiście również lewostronną jedynką.

Definicja 10.2. Grupa G nazywa się grupą abelową, jeśli $a \cdot b = b \cdot a$ dla wszystkich $a, b \in G$.

Definicja 10.3. Grupa zawierająca n elementów nazywa się grupą rzędu n.

W najbliższych trzech paragrafach będziemy się zajmowali wyłącznie grupami skończonymi ($n < \infty$), dążąc do wyrobienia pewnego poglądu na najbardziej podstawowe aspekty teorii grup. W dalszych paragrafach będziemy mieli okazję wspomnieć o grupach nieskończonych, ilekroć nasze rozważania będą dotyczyły takiego przypadku, zawsze będziemy to wyraźnie zaznaczali.

Zapoznajmy się teraz z kilkoma grupami poczynając od najprostszych.

Przykład 10.1. Najmniej skomplikowaną grupą, jaką sobie można wyobrazić, jest grupa jednoelementowa $\{e\}$. Spełnia ona oczywiście wszystkie wymagania definicji 10.1. Grupa ta nie jest zbyt interesująca.

Przykład 10.2. Dalej możemy mieć grupę z dwoma różnymi elementami $\{e, a\}$. Ale $a \cdot a$ musi zgodnie z definicją 10.1 należeć do tej grupy. Musi więc zachodzić jedna z możliwości $a \cdot a = a$ albo $a \cdot a = e$. Pierwsza możliwość natychmiast odpada, gdyż ze związku $a \cdot a = a$ i faktu istnienia odwrotności elementu a^{-1} wynika natychmiast, że $a = e$, co przeczy założeniu, że grupa ma dwa różne elementy, a zatem $a \cdot a = e$. Liczby całkowite $\{1, -1\}$, dla których operacja grupowa jest zwykłym mnożeniem, tworzą grupę o tej właśnie strukturze (przy czym $e = 1$, $a = -1$). Również liczby całkowite $\{0, 1\}$ tworzą taką grupę, jeśli jako operację grupową przyjąć dodawanie tych liczb *modulo dwa*, tzn. $0+0 = 0$, $0+1 = 1$, $1+0 = 1$, $1+1 = 0$. W tym przypadku musimy utożsamić $e = 0$, $a = 1$. Inną jeszcze strukturą tego typu jest grupa permutacji dwóch elementów,

gdzie e jest permutacją nie zmieniającą kolejności elementów, natomiast a jest permutacją przestawiającą te elementy.

Powyższy przykład prowadzi w sposób naturalny do pojęcia *izomorfizmu.*

Definicja 10.4. Dwie grupy nazywamy izomorficznymi, jeśli istnieje jednojednoznaczna odpowiedniość między elementami tych grup, odpowiedniość zachowująca działanie grupowe. To znaczy przypuśćmy, że G składa się z elementów $a, b, c, \ldots$, a G' z elementów $a', b', c', \ldots$. Jeśli $(a \cdot b)' = a' \times b'$ dla wszystkich $a, b \in G$ i $a', b' \in G'$, to mówimy, że grupy $\{G, \cdot\}$ i $\{G', \times\}$ są izomorficzne.

Oczywiście wszystkie trzy grupy wymienione w przykładzie 10.2 są wzajemnie izomorficzne; jeśli znamy wszystkie własności jednej z tych grup, to tym samym wiemy wszystko o każdej z pozostałych.

Przykład 10.3. Przejdźmy teraz do rozpatrzenia grup składających się z trzech różnych elementów, które oznaczymy $\{e, a, b\}$. Na podstawie aksjomatów grupy wnioskujemy natychmiast, że $a \cdot b = e$, gdyż jeśliby $a \cdot b = a$ lub $a \cdot b = b$, to z istnienia elementów odwrotnych dostalibyśmy natychmiast albo $b = e$, albo $a = e$, co przeczy założeniu, że wszystkie trzy elementy są różne. A czemu równa się $a \cdot a$? Oczywiście $a \cdot a = a$ implikuje $a = e$, a więc musi być albo $a \cdot a = e$, albo $a \cdot a = b$. Ale

$$a \cdot a = e \Rightarrow a \cdot (a \cdot b) = b \Rightarrow a = b,$$

gdyż $a \cdot b = e$. Ostatni wniosek też jest niedopuszczalny, gdyż musimy mieć trzy różne elementy. Pozostaje więc możliwość $a \cdot a = b$. Podobnie wykazuje się, że $b \cdot b = a$. Przyjmując oczywistą notację dla elementów takich jak $a \cdot a$ możemy zapisać naszą trójelementową grupę jako $\{e, a, a^2\}$, przy czym $a^3 = e$. Jest to jedyna możliwość dla grupy trójelementowej. Postulaty podane w definicji 10.1 ograniczają nas po prostu do tej jedynej możliwości. Prostym przykładem tej grupy jest zbiór pierwiastków trzeciego stopnia z jedności z operacją grupową polegającą na zwykłym mnożeniu liczb zespolonych.

Jest oczywiste, że zawsze można utworzyć grupę postaci $\{e, a, a^2, a^3, \ldots, a^{n-1}\}$ dla dowolnej liczby n; podstawowym modelem takiej grupy jest zbiór n pierwiastków n-tego stopnia z jedności. W ogólności dla dowolnej grupy $\{G, \cdot\}$ możemy wziąć jeden z jej elementów $a \in G$ i utworzyć ciąg $a^0 = e, a, a^2, \ldots, a^i, \ldots$. Jeśli istnieje taka najmniejsza liczba całkowita, wyłączając zero, dla której $a^n = e$, to mówimy, że element a jest rzędu n (jeśli nie ma skończonego n o tej własności, to mówimy, że element a jest rzędu nieskończonego). Łatwo pokazać, że wszystkie elementy $a^0, a^1, a^2, \ldots, a^{n-1}$ są różne. Istotnie, gdyby $a^i = a^j$ dla jakichś liczb $i < n$ oraz $j < n$, to musiałoby być $a^{||i-j||} = e$. Gdyby było $0 \leqslant i < n$ oraz $0 \leqslant j < n$, to $|i-j| < n$, a zatem wbrew założeniu n nie byłoby najmniejszą liczbą całkowitą, dla której $a^n = e$.

Definicja 10.5. Grupa, której elementy mogą być zapisane w postaci $\{e, a, a^2, \ldots, a^{n-1}\}$, nazywa się grupą *cykliczną* rzędu n. Jak dotychczas, wszystkie nasze grupy były grupami typu cyklicznego, powstaje więc pytanie, czy wszystkie w ogóle grupy są cykliczne? Odpowiedzi dostarcza następujący przykład.

Przykład 10.4. Zastosujemy używaną dotychczas metodę do zbadania możliwych grup rzędu czwartego, których elementy oznaczymy $\{e, a, b, c\}$. Zacznijmy od założenia $a^2 = b$; grupę można więc zapisać w postaci $\{e, a, a^2, c\}$. Na podstawie argumentów używanych już poprzednio dochodzimy do wniosku, że $a \cdot c$ musi się równać albo, e albo a^2. Gdyby $a \cdot c = a^2$, to mielibyśmy $a = c$, co przeczy założeniu, że wszystkie cztery elementy są różne.

A zatem $a \cdot c = e$ i zaczyna się wydawać, że znów dochodzimy do grupy cyklicznej. Zbadajmy więc czemu równa się a^3. Przypuśćmy, że $a^3 = e$; wtedy $a^3 = a \cdot c$, czyli $a^2 = c$, co jest niemożliwe. Gdyby $a^3 = a$, to mielibyśmy $a^2 = e$, co również jest niemożliwe. Gdyby $a^3 = a^2$, to oznaczałoby, że $a = e$, co znów jest niemożliwe. Musi więc być $a^3 = c$ i nasze przypuszczenie potwierdza się, otrzymana grupa jest grupą cykliczną rzędu czwartego $\{e, a, a^2, a^3\}$, gdzie $a^4 = e$.

Do tego samego wyniku doszlibyśmy zakładając na początku, że $a^2 = c$; jedyna różnica polegałaby na tym, że teraz byłoby $b = a^3$. Jak już wspominaliśmy, $a^2 = a$ jest wykluczone. Jeśli więc nie chcemy mieć grupy cyklicznej, to pozostaje tylko jeszcze jedna możliwość, a mianowicie $a^2 = e$. Oczywiście w tym wypadku albo $a \cdot b = e$, albo $a \cdot b = c$. Jeśli $a \cdot b = e$, to $a^2 \cdot b = a$, ale $a^2 = e$, więc $a = b$, co jest wykluczone, a zatem $a \cdot b = c$. Kontynuując ten proces eliminacji różnych możliwości dochodzimy do wniosku, że $b \cdot a = c$, $a \cdot c = b$ i $c \cdot a = b$. Ponieważ $a \cdot b = c$ i $b \cdot a = c$, więc mamy

$$(b \cdot a) \cdot (a \cdot b) = c \cdot c \Rightarrow b \cdot a^2 \cdot b = c^2.$$

Ale $a^2 = e$, więc dostajemy od razu $b^2 = c^2$, co oznacza, że c^2 nie może być równe ani b, ani c, zatem albo $c^2 = e$, albo $c^2 = a$. Zbadajmy najpierw przypadek $c^2 = a$, wtedy $a \cdot c^2 = a^2 = e$, a ponieważ $a \cdot c = b$, więc mamy $b \cdot c = e$. Mamy już wszystkie reguły mnożenia w tym przypadku. Zbierzmy je wszystkie razem

$$a^2 = e, \quad b^2 = c^2 = a,$$
$$b \cdot c = c \cdot b = e,$$
$$a \cdot b = b \cdot a = c, \quad a \cdot c = c \cdot a = b. \tag{10.3}$$

Chcemy teraz się dowiedzieć, czy uzyskana grupa rzędu czwartego jest różna od grupy cyklicznej rzędu czwartego, do której już parokrotnie dochodziliśmy. Bardzo wygodnym sposobem badania prostych grup skończonych jest sporządzenie tabelki mnożenia grupowego. Sporządźmy taką tabelkę dla grupy cyklicznej rzędu czwartego

	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	b	c	e
b	b	c	e	a
c	c	e	a	b

(10.4)

Znaczenie tej tabelki jest bardzo proste; w miejscu o wskaźnikach i, j wpisany jest wynik mnożenia i-tego elementu grupy przez element j-ty. Czytelnik może łatwo sprawdzić, że tabelka ta przedstawia dokładnie grupę cykliczną rzędu czwartego, na którą natknęliśmy się na początku przykładu 10.4. A co z grupą, której własności mnożenia dane są wzorami (10.3)? Tabelka mnożenia dla tej grupy ma postać

	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	e	c	b
b	b	c	a	e
c	c	b	e	a

(10.5)

Tabelka ta wygląda zupełnie inaczej niż dla grupy cyklicznej rzędu czwartego. Mimo to możliwość izomorfizmu tych grup nie jest jeszcze wykluczona. Musimy sprawdzić, czy nie uda nam się tak pozamieniać oznaczenia elementów, by tabelki mnożenia stały się dla tych dwóch grup identyczne. Jeśli w tabelce grupowej (10.5) zmienimy oznaczenia w następujący sposób:

$$e \to e', \quad a \to b',$$
$$b \to a' \quad c \to c',$$

to przyjmie ona wygląd

	e'	a'	b'	c'
e'	e'	a'	b'	c'
a'	a'	b'	c'	e'
b'	b'	c'	e'	a'
c'	c'	e'	a'	b'

(10.6)

Ale tabelka mnożenia (10.6) jest teraz identyczna z tabelką (10.4), a więc przekonujemy się, że w dalszym ciągu nie udało nam się znaleźć grupy rzędu czwartego różnej od grupy cyklicznej.

Jednakże dla klasy grup czteroelementowych pozostaje jeszcze jedna niezbadana możliwość. Przypomnijmy, że zmuszeni byliśmy przyjąć następujące reguły mnożenia: $a^2 = e$, $a \cdot b = c$, $b \cdot a = c$, $a \cdot c = b$, $c \cdot a = b$ i $b^2 = c^2$. Kiedy przyjęliśmy, że $b^2 = c^2 = a$, to doszliśmy do grupy cyklicznej. Pozostaje nam jeszcze wybór $b^2 = c^2 = e$. W tym przypadku

$$a \cdot b = c \Rightarrow a \cdot b^2 = c \cdot b \Rightarrow c \cdot b = a$$

i podobnie

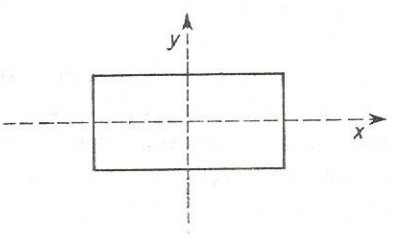
$$b \cdot a = c \Rightarrow b^2 \cdot a = b \cdot c \Rightarrow b \cdot c = a.$$

Możemy już napisać tabelkę grupową dla tego ostatniego przypadku

	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	e	c	b
b	b	c	e	a
c	c	b	a	e

(10.7)

Czytelnik może sprawdzić, że nie można tak poprzestawiać elementów w tabelce (10.7), aby otrzymać tabelkę (10.4). Udało nam się więc wreszcie znaleźć grupę różną od cyklicznej. Zauważmy jednak, że grupa ta jest *przemienna* czyli *abelowa* — odbiciem tego faktu jest symetria tabelki grupowej (10.7) względem głównej przekątnej. Otrzymana grupa nazywa się *czterogrupą*. Prostą realizacją tej grupy jest zbiór wszystkich przekształceń prostokąta niezmieniających jego położenia w przestrzeni (pamiętajmy, że w prostokącie prawy i lewy brzeg są nierozróżnialne, podobnie jak bok górny i dolny). Jeśli prostokąt umieścimy na płaszczyźnie x, y tak, że jego środek pokrywa się z początkiem układu współrzędnych, to czterema przekształceniami prostokąta, które nas interesują są: 1) przekształcenie tożsamościowe, 2) obrót o 180° wokół osi prostopadłej do prostokąta i przechodzącej przez jego środek, 3) odbicie względem osi x, 4) odbicie względem osi y. Zauważmy, że nie trzeba uwzględniać obrotów o 360°, 540° itp., gdyż są one identyczne z przekształceniami (1) lub (2). Na rysunku 10.1 przedstawiony jest nasz prostokąt i jego położenie względem osi. Pozostawiamy czytelnikowi do sprawdzenia, że zbiór rozpatrywanych przekształceń tworzy rzeczywiście grupę i że jej tabelka mnożenia jest identyczna z tabelką (10.7).



Rys. 10.1

Z tabelki grupowej (10.7) możemy również odczytać, że elementy $\{e, a\}$ czterogrupy same stanowią grupę ($e \cdot e = e$, $e \cdot a = a$, $a \cdot e = a$, $a \cdot a = e$), podobnie jak elementy $\{e, b\}$ i $\{e, c\}$. Obserwacja ta prowadzi nas do następującej definicji:

Definicja 10.6. Zbiór elementów H zawarty w G nazywa się *podgrupą* grupy G, eśli:

1) iloczyn dowolnej pary elementów należących do H należy znów do H,

2) jeśli $a \in H$, to $a^{-1} \in H$.

Każda podgrupa jest również grupą, gdyż jej elementy jako należące do G spełniają prawo łączności mnożenia, ponadto z tego, że a, $a^{-1} \in H$, wynika, że $a \cdot a^{-1} = e$

również należy do H. Oczywiście każda grupa jest swoją podgrupą, a element jednostkowy jest podgrupą każdej grupy. Jak już wspomnieliśmy, czterogrupa ma podgrupę $\{e, a\}$ oraz dwie inne, izomorficzne podgrupy $\{e, b\}$ i $\{e, c\}$. Oczywiście w każdej grupie G zbiór $\{e, a, a^2 \ldots a^{n-1}\}$, gdzie n jest rzędem elementu a oraz $a \in G$, stanowi *podgrupę abelową* grupy G.

Inną ciekawą własnością tabelki mnożenia grupowego (10.7) (oraz każdej innej tabelki grupowej) jest to, że w każdym jej wierszu lub kolumnie występuje każdy element grupy i to dokładnie jeden raz. Nie jest to bynajmniej przypadek, obowiązuje bowiem następujące twierdzenie:

Twierdzenie 10.1. Jeśli G jest grupą rzędu n składającą się z elementów $e, a_2, a_3, \ldots, a_n$, to w ciągu

$$ea_i, a_2a_i, \ldots, a_na_i$$

utworzonym dla dowolnego i każdy element grupy występuje raz i tylko raz. To samo dotyczy ciągu

$$a_ie, a_ia_2, \ldots, a_ia_n.$$

W sformułowaniu powyższego twierdzenia zaczęliśmy pomijać kropkę jako symbol mnożenia grupowego. Uproszczenie to będziemy stosować dalej w tym rozdziale, chyba że takie pominięcie mogłoby prowadzić do nieporozumień.

Dowód. Gdyby jakiś element wystąpił dwukrotnie w rozpatrywanym ciągu, to mielibyśmy $a_\mu a_i = a_\nu a_i$, czyli $a_\mu = a_\nu$ wbrew założeniu, że wszystkie elementy grupy są różne. Ponieważ ciąg składa się z n wyrazów, a żaden element grupy nie występuje w nim dwukrotnie, to każdy element musi wystąpić raz i tylko raz. Wyjaśnia to zaobserwowaną przez nas strukturę tabelki mnożenia grupowego. Twierdzenie 10.1 choć bardzo proste odgrywa decydującą rolę przy wyprowadzeniu większości wyników tego rozdziału.

Można by proces indukcyjnego badania grup kontynuować w ten sam sposób rozpatrując grupy rzędu piątego, rzędu szóstego itd., ale byłoby to mało pouczające. Warto tylko zaznaczyć, że nie wszystkie grupy są abelowe, jak by można sądzić z poznanych dotychczas przykładów grup najniższego rzędu. Po raz pierwszy na grupę nieabelową natknęlibyśmy się w szóstym rzędzie — jest nią grupa permutacji trzech przedmiotów. Trzeba również podkreślić, że nie wszystkie grupy mają skończoną liczbę elementów. Na przykład zbiór liczb całkowitych ze zwykłym dodawaniem jako operacją grupową ($e = 0$, $n^{-1} = -n$) tworzy grupę abelową nieskończonego rzędu; a zbiór wszystkich unitarnych macierzy $n \times n$ jest przykładem grupy nieskończonej nieabelowej.

10.2. GRUPY PERMUTACJI

Dla dalszej ilustracji struktur grupowych zajmiemy się obecnie jedną z najważniejszych grup zarówno w matematyce, jak i fizyce, a mianowicie grupą permutacji n przedmiotów zwaną również grupą *symetryczną* S_n. Struktura grup S_n jest niezmiernie bogata — w tym paragrafie zajmiemy się jedynie najprostszymi aspektami grup permutacji.

Liczba permutacji n przedmiotów wynosi $n!$, a zatem grupa S_n jest rzędu $n!$. Elementy grupy permutacji zapisywać będziemy w postaci

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \ldots & n \\ m_1 & m_2 & m_3 & \ldots & m_n \end{pmatrix},$$

gdzie zbiór $\{m_1\, m_2\, m_3 \ldots m_n\}$ jest pewnym ustawieniem pierwszych n liczb naturalnych. Symbol powyższy oznacza, że 1 jest zastąpione przez m_1, 2 przez m_2 itd. Na przykład permutacja

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

działając na ustawienie {1 2 3 4 5 6} prowadzi do ustawienia {6 5 4 3 2 1}; ta sama permutacja p działając na {2 5 3 4 6 1} daje ustawienie {5 2 4 3 1 6}. W rozpatrywanym przykładzie 1 i 6 przechodzą nawzajem w siebie — 1 jest zastąpiona przez 6, a 6 jest zastąpione przez 1. Struktura taka nazywa się *cyklem* i zapisywana jest w postaci (16). Powyższy przykład zawiera również inne cykle, a mianowicie (25) i (34). Możemy zatem napisać

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = (16)\,(25)\,(34).$$

Takie przedstawienie permutacji nazywa się rozbiciem permutacji na *rozłączne cykle*, rozłączne to znaczy nie mające wspólnych elementów.

Oczywiście nie wszystkie cykle składają się tylko z dwóch elementów. O cyklu zawierającym l elementów mówimy też, że ma on długość l. Na przykład permutacja

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 4 & 1 & 2 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

może być przedstawiona jako iloczyn trzech cykli o długościach trzy, dwa i jeden

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 4 & 1 & 2 & 5 & 3 \end{pmatrix} = (163)\,(24)\,(5).$$

Cykl (163) o długości 3 należy odczytywać następująco: 1 jest zastąpiona przez 6, 6 jest zastąpione przez 3, a 3 jest zastąpione przez 1. Struktura taka, podobnie jak cykl dwuelementowy jest również zamknięta w sobie. Zauważmy, że

$$(163) = (316) = (631),$$

ale

$$(163) \neq (136).$$

Gdybyśmy elementy cyklu zapisali na obwodzie koła zgodnie z kierunkiem ruchu wskazówek zegara (jak to sugeruje samo słowo „cykl"), to dokonywanie ciągu przestawień moglibyśmy zacząć od któregokolwiek elementu na tym obwodzie i po dokonaniu wszystkich przestawień doszlibyśmy do punktu wyjścia. Podkreślamy, że efekt permutacji nie zależy od tego, który element cyklu będzie początkowy. Dostaniemy natomiast inną permutację, jeśli cykl zaczniemy wykonywać w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara.

Cykle dwuelementowe, zwane zazwyczaj *transpozycjami*, są szczególnie ważne, gdyż dowolny cykl (a zatem i dowolna permutacja) może być przedstawiony jako iloczyn transpozycji (ale już nie będących rozłącznymi). Na przykład

$$(163) = (13)\,(16),$$

o czym się łatwo przekonać, gdyż (163) działając na ustawienie powiedzmy {136} prowadzi do ustawienia {613}, natomiast (16) działając na {136} daje {631}, które z kolei pod działaniem (13) przechodzi w {613}.

Przyjmujemy tu konwencję, że jeśli kilka cykli napisanych jest obok siebie, to najpierw działa cykl umieszczony na prawym końcu itd, a na końcu wykonujemy permutację odpowiadającą cyklowi stojącemu po lewej stronie. Jeśli cykle są rozłączne, to oczywiście nie ma znaczenia w jakiej kolejności one działają, ale jeśli nie są rozłączne, to ich kolejność jest bardzo istotna. Na przykład

$$(163)\,\{136\} = (13)\,(16)\,\{136\} = \{613\},$$

podczas gdy

$$(16)\,(13)\,\{136\} = \{361\} = (136)\,\{136\}.$$

Należy zauważyć, że rozkład na transpozycje nie jest jednoznaczny. W powyższym przykładzie

$$(163) = (13)\,(16)$$

i również

$$(163) = (316) = (36)\,(31).$$

W ogólności rozkład cyklu o długości n na transpozycje może być zapisany w postaci

$$(1\ 2\ 3\ \ldots\ n) = (1n)\,(1\ n-1)\ \ldots\ (13)\,(12),$$

co łatwo można sprawdzić. Parzystość permutacji definiujemy jako liczbę $(-1)^N$, gdzie N jest liczbą transpozycji, na które można rozłożyć daną permutację. Jeśli N jest nieparzyste, mówimy o permutacji nieparzystej, gdy N jest liczbą parzystą mówimy, że permutacja jest parzysta.

Jeśli teraz umówimy się, że przez iloczyn permutacji rozumiemy kolejne wykonanie dwóch permutacji, to oczywiście iloczyn dwóch permutacji jest znów permutacją. Wszystkie pozostałe aksjomaty grupowe są trywialnie spełnione, a zatem zbiór wszystkich permutacji n przedmiotów tworzy grupę składającą się z $n!$ elementów. Z poprzednich rozważań widać natychmiast, że jedynie S_1 i S_2 są grupami abelowymi. Dla $n \geqslant 3$ grupa S_n jest nieabelowa. Na przykład (12) i (13) należą do S_3, ale $(12)\,(13) \neq (13)\,(12)$.

Zwróćmy uwagę, że przy naszym zapisie permutacji mamy dużą swobodę w wyborze kolejności przedmiotów; w symbolu permutacji ważne są jedynie związki między przedmiotami umieszczonymi jeden nad drugim — ustawienie poziome nie ma żadnego znaczenia. Tak więc

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 6 & 3 & 1 & 5 \\ 3 & 5 & 1 & 4 & 6 & 2 \end{pmatrix}.$$

Również wybór liczb na oznaczenie przedmiotów podlegających permutowaniu jest jedynie sprawą wygody (jest ich po prostu nieskończenie wiele). Równie dobrze moglibyśmy zamiast liczb jeden, dwa, trzy,... permutować jabłko, gruszkę, pomarańczę,... albo Greka, Rosjanina, Francuza, ...

Przykład 10.5. Najprostszymi grupami symetrycznymi są S_1, która zawiera jeden tylko element e, oraz S_2 składająca się z e i (12). Bardziej interesująca jest grupa S_3. Składa się ona z sześciu elementów.

$$e,\ (12),\ (13),\ (23),\ (123),\ (321).$$

Jak łatwo można się przekonać, tabelka mnożenia dla tej grupy jest następująca:

	e	(12)	(13)	(23)	(123)	(321)
e	e	(12)	(13)	(23)	(123)	(321)
(12)	(12)	e	(321)	(123)	(23)	(13)
(13)	(13)	(123)	e	(321)	(12)	(23)
(23)	(23)	(321)	(123)	e	(13)	(12)
(123)	(123)	(13)	(23)	(12)	(321)	e
(321)	(321)	(23)	(12)	(13)	e	(123)

Jeśli dokonamy identyfikacji $e = I$, $(12) = A$, $(13) = B$, $(23) = C$, $(123) = D$, $(321) = F$, to przekonamy się, że tabelka ta jest identyczna z tabelką (3.4). Zauważmy również, że grupa ta ma sporo podgrup. Oczywiście $\{e, (12)\}$ jest podgrupą rzędu drugiego, a podgrupy $\{e, (13)\}$ i $\{e, (23)\}$ są z nią izomorficzne. $\{e, (123), (321)\}$ jest podgrupą rzędu trzeciego izomorficzną z grupą cykliczną rzędu trzeciego omawianą w przykładzie 10.3. Przyglądając się tabelce grupowej łatwo się przekonamy, że S_3 jest grupą nieabelową.

Jeden z najbardziej godnych uwagi faktów dotyczących S_n zawiera się w następującym *twierdzeniu Cayleya.*

Twierdzenie 10.2. Każda grupa G rzędu n jest izomorficzna z jakąś podgrupą grupy S_n.

Dowód. Dowód tego twierdzenia oparty jest na twierdzeniu 10.1. Nazwijmy elementy grupy G literami $a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n$. Niech a_i będzie jakimś dowolnym elementem G. Zgodnie z twierdzeniem 10.1 w zbiorze $\{a_i a_1, a_i a_2, \ldots, a_i a_n\}$ każdy z elementów zbioru $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ występuje raz i tylko raz. Możemy więc dokonać przyporządkowania, które jest w oczywisty sposób jednojednoznaczne

$$a_i \to P_{a_i} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_n \\ a_i a_1 & a_i a_2 & \ldots & a_i a_n \end{pmatrix}.$$

Podobnie dla $a_j \in G$

$$a_j \to P_{a_j} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_n \\ a_j a_1 & a_j a_2 & \ldots & a_j a_n \end{pmatrix}.$$

Dla elementu grupy G, który jest iloczynem $a_i a_j$ będziemy mieli

$$a_i a_j \to P_{a_i a_j} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_n \\ a_i a_j a_1 & a_i a_j a_2 & \ldots & a_i a_j a_n \end{pmatrix}.$$

Kluczowym punktem dowodu, że mamy do czynienia z izomorfizmem, jest wykazanie, że $P_{a_i} P_{a_j} = P_{a_i a_j}$. Łatwo się o tym przekonać — jest to jedynie wprawka na zrozumienie wprowadzonych oznaczeń. Należy o tym pamiętać śledząc poniższe manipulacje.

Wspominaliśmy już, że poziome ustawienie w symbolu permutacji jest zupełnie bez znaczenia, na przykład

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & \dots & a_n \\ a_i a_1 & a_i a_2 & a_i a_3 & \dots & a_i a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_3 & a_n & a_1 & \dots & a_2 \\ a_i a_3 & a_i a_n & a_i a_1 & \dots & a_i a_2 \end{pmatrix}.$$

Innymi słowy symbole w górnym wierszu możemy poprzestawiać jak tylko nam się podoba, bylebyśmy identycznego przestawienia dokonali i w dolnym wierszu. Ponieważ jednak ciąg $\{a_j a_1, a_j a_2, \dots, a_j a_n\}$ jest jedynie przestawieniem ciągu $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, to możemy napisać

$$P_{a_i} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ a_i a_1 & a_i a_2 & \dots & a_i a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_j a_1 & a_j a_2 & \dots & a_j a_n \\ a_i(a_j a_1) & a_i(a_j a_2) & \dots & a_i(a_j a_n) \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_j a_1 & a_j a_2 & \dots & a_j a_n \\ a_i a_j a_1 & a_i a_j a_2 & \dots & a_i a_j a_n \end{pmatrix}$$

a zatem

$$P_{a_i} P_{a_j} = \begin{pmatrix} a_j a_i & a_j a_2 & \dots & a_j a_n \\ a_i a_j a_1 & a_i a_j a_2 & \dots & a_i a_j a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ a_j a_1 & a_j a_2 & \dots & a_j a_n \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ a_i a_j a_1 & a_i a_j a_2 & \dots & a_i a_j a_n \end{pmatrix}.$$

O tym, że wynik mnożenia jest w powyższym wzorze taki właśnie, jak napisaliśmy, przekonujemy się bezpośrednio przez inspekcję, a zatem

$$P_{a_i} P_{a_j} = P_{a_i a_j},$$

co kończy dowód twierdzenia o izomorfizmie.

Wynik powyższy zawiera w sobie w szczególności uwagę poczynioną przez nas w przykładzie 10.5, gdzie zauważyliśmy, że S_3 ma podgrupę $\{e, (123), (321)\}$ izomorficzną z grupą rzędu trzeciego. Rozpatrując grupę rzędu czwartego weźmy najpierw czterogrupę .Korzystając z tabelki grupowej (10.7) ustalamy natychmiast odpowiedniość, o której mowa w twierdzeniu Cayleya.

$$P_e = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ e & a & b & c \end{pmatrix}, \quad P_a = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ a & e & c & b \end{pmatrix},$$

$$P_b = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ b & c & e & a \end{pmatrix}, \quad P_c = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ c & b & a & e \end{pmatrix}.$$

Stosując zapis przy pomocy zamkniętych cykli możemy to zapisać tak

$$P_e = e, \quad P_a = (ea)(bc), \quad P_b = (eb)(ac), \quad P_c = (ec)(ab).$$

Bez trudu można sprawdzić, że przy takim przyporządkowaniu spełnione są reguły zawarte w tabelce grupowej (10.7). Dla grupy cyklicznej rzędu czwartego korzystając znów z tabelki grupowej (10.4), znajdujemy

$$P_e = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ e & a & b & c \end{pmatrix}, \quad P_a = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ a & b & c & e \end{pmatrix},$$

$$P_b = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ b & c & e & a \end{pmatrix}, \quad P_c = \begin{pmatrix} e & a & b & c \\ c & e & a & b \end{pmatrix}.$$

Podobnie jak poprzednio możemy to również zapisać tak

$$P_e = e, \quad P_a = (eabc), \quad P_b = (eb)(ac), \quad P_c = (ecba).$$

W przykładzie tym natknęliśmy się po raz pierwszy na cykl o długości cztery.

Przyglądając się powyższym przykładom zauważamy, że z wyjątkiem jedności, wszystkie permutacje mają tę własność, że nie pozostawiają żadnego przedmiotu na swym miejscu. Podgrupa grupy S_n o tej własności nazywa się podgrupą *regularną*, albo inaczej podgrupą permutacji regularnych. Z konstrukcji użytej w dowodzie twierdzenia 10.2 jest jasne, że każda podgrupa grupy S_n izomorficzna z grupą rzędu n jest podgrupą regularną.

Paragraf ten zakończymy zbadaniem paru własności regularnych podgrup grupy S_n.

Lemat. W podgrupie regularnej żadne dwa elementy nie zamieniają danego przedmiotu na ten sam przedmiot.

Dowód. Przypuśćmy, że p_1 i p_2 $(p_1 \neq p_2)$ należące do podgrupy regularnej zamieniają a na b. Przy tym założeniu permutacja $p_1 p_2^{-1} (\neq e)$ pozostawia b bez zmiany. Jednakże $p_1 p_2^{-1}$ należy do podgrupy regularnej (bo każda podgrupa jest zamknięta ze względu na mnożenie i odwrotność). Dostaliśmy więc sprzeczność, gdyż z jednej strony $p_1 p_2^{-1}$ pozostawia element b bez zmiany, a z drugiej $p_1 p_2^{-1}$ należy do podgrupy regularnej.

Lemat. Jeśli każdy element podgrupy regularnej rozłożymy na rozłączne cykle, to każdy cykl musi mieć tę samą długość. Na przykład w grupie S_5 permutacja (12) (345) nie może należeć do podgrupy regularnej.

Dowód. Przypuśćmy, że p jest elementem podgrupy regularnej, który można rozłożyć na dwa cykle o długościach l_1 i l_2, przy czym $l_1 < l_2$. Ponieważ cykl o długości l musi spełniać tożsamość $(a_1 a_2 \ldots a_l)^l = \mathrm{e}$, to p^{l_1}, nie przestawia żadnego z przedmiotów zawartych w pierwszym cyklu. Jednakże p^{l_1} musi przestawiać niektóre z przedmiotów zawartych w drugim cyklu (faktycznie wszystkie te przedmioty), gdyż dla cyklu o długości $\lambda > l'$ musi być $(a_1 a_2 \ldots a_\lambda)^{l'} \neq e$. A zatem p^{l_1} jest permutacją należącą do podgrupy zawierającej p, mającą tę własność, że przestawia ona niektóre z przedmiotów, a innych nie przestawia. Przeczy to założeniu, że p należy do podgrupy regularnej.

Ilustracją tego lematu mogą być wyniki uzyskane dla podgrup regularnych grupy S_4 odpowiadających czterogrupie oraz grupie cyklicznej rzędu czwartego. Korzystając z tego lematu możemy udowodnić następujące, bardzo mocne twierdzenie.

Twierdzenie 10.3. Każda grupa $\{G, \cdot\}$ rzędu n jest grupą cykliczną, jeśli n jest liczbą pierwszą.

Dowód. Z poprzedniego lematu wiemy, że izomorficzna z grupą G podgrupa regularna grupy S_n zawiera jedynie elementy, które są albo iloczynami n cykli o długości 1, albo też stanowią jeden cykl o długości n (gdyż n jest liczbą pierwszą). Iloczyn n cykli o długości 1 to po prostu element jednostkowy, więc G składa się z jedności i $n-1$ elementów odpowiadających izomorficznie cyklom o długości n. Nazwijmy te elementy $a_2, a_3, \ldots, a_n$. Ponieważ a_i odpowiada pewnemu cyklowi o długości n, to wszystkie elementy ciągu $a_i, a_i^2, a_i^3, \ldots, a_i^{n-1}$ są różne między sobą (zauważmy ponadto, że $a_i^n = e$), gdyż gdyby tak nie było, np., gdyby było $a_i^\mu = a_i^\nu$, to mielibyśmy $a_i^m = e$ dla $m < n$, co jest niemożliwe, gdyż a_i odpowiada cyklowi o długości n. A zatem różne elementy ciągu $\{e, a_i, a_i^2, \ldots, a_i^{n-1}\}$ wyczerpują wszystkie elementy grupy. Oznacza to właśnie, że nasza grupa G jest grupą cykliczną rzędu n. Oczywiście identyczne argumenty są słuszne dla każdego elementu a_i.

Na przykład grupa rzędu trzeciego jest izomorficzna z podgrupą $\{e, (123), (321)\}$ grupy S_3. Łatwo sprawdzić, że

$$(123)^1 = (123), \quad (123)^2 = (321), \quad (123)^3 = e,$$

możemy więc tę grupę przedstawić w postaci

$$\{e, (123), (123)^2\}.$$

Także zachodzi

$$(321)^1 = (321), \quad (321)^2 = (123), \quad (321)^3 = e,$$

więc moglibyśmy równie dobrze (zmieniając jedynie kolejność wyliczenia elementów grupy) przedstawić naszą grupę tak

$$\{e, (321), (321)^2\}.$$

Z twierdzenia 10.3 wynika między innymi, że chociaż intuicja podpowiada nam, że dla dużych rzędów n liczba różnych grup powinna być również duża, to jednak nie jest to ogólnie prawdziwe. Na przykład istnieje tylko jedna grupa rzędu 97; jest nią mianowicie grupa cykliczna.

10.3. WARSTWY, KLASY I PODGRUPY NIEZMIENNICZE (INWARIANTNE)

Po zbadaniu niektórych szczegółowych własności określonej kategorii grup skończonych przyjrzyjmy się teraz pewnym najważniejszym ogólnym własnościom odnoszącym się do wszystkich grup w ogóle.

Definicja 10.7. Niech A będzie jakąś podgrupą grupy G składającą się z elementów $e, a_2, a_3, \ldots, a_m$ (oczywiście $m \leqslant n$, gdzie n jest rzędem grupy G) i niech $b \in G$, ale jednocześnie $b \notin A$. W tej sytuacji m różnych elementów $be = b, ba_2, ba_3, \ldots, ba_m$ tworzy tzw. *warstwę lewostronną* podgrupy A względem elementu b, warstwę tę zapisujemy symbolicznie jako bA. Podobnie zbiór $b, a_2b, a_3b, \ldots, a_mb$ tworzą warstwę prawostronną Ab.

Oznaczenie bA jest po prostu skrótem dla zbioru elementów utworzonych przez mnożenie każdego elementu podgrupy A lewostronnie przez element b. Zauważmy, że warstwa nie jest podgrupą, gdyż w oczywisty sposób nie zawiera ona elementu jednostkowego. Istotnie, gdyby $ba_i = e$, to byłoby $b = a_i^{-1}$, z czego wynikałoby, że $b \in A$ wbrew naszemu założeniu zawartemu w definicji 10.7. W rzeczywistości warstwa bA nie zawiera żadnego z elementów podgrupy A, gdyby bowiem było $ba_i = a_j$, to $b = a_ja_i^{-1}$, co by oznaczało, że $b \in A$, znów wbrew założeniu.

Lemat. Dwie warstwy lewostronne podgrupy A albo mają wszystkie te same elementy, albo nie zawierają żadnego elementu wspólnego.

Dowód. Niech xA będzie jedną warstwą podgrupy A, a yA drugą warstwą. Przypuśćmy, że $xa_i = ya_j$, to wtedy $y^{-1}x = a_ja_i^{-1}$, czyli $y^{-1}x \in A$. A zatem $y^{-1}x$ mnożone kolejno przez wszystkie elementy podgrupy A musi zgodnie z twierdzeniem 10.1 dać znów wszystkie elementy A, tyle że w przestawionej kolejności. Podgrupę A można więc zapisać jako $y^{-1}xa_1, y^{-1}xa_2, \ldots, y^{-1}xa_n$, a zbiór $yy^{-1}xa_1, yy^{-1}xa_2, \ldots, yy^{-1}xa_n$ musi być identyczny ze zbiorem yA; porządek wyliczania elementów jest oczywiście nieistotny. Ale zbiór ten jest po prostu zbiorem $xa_1, xa_2, \ldots, xa_n$, a więc jest identyczny ze zbiorem xA. A zatem zbiory xA i yA są tymi samymi zbiorami, dochodzimy więc do wniosku, że jeśli dwie war-

stwy mają chociaż jeden element wspólny, to muszą mieć wspólne wszystkie pozostałe elementy. To jest wynik, który właśnie chcieliśmy udowodnić.

Twierdzenie 10.4. (twierdzenie Lagrange'a). Rząd g grupy G jest całkowitą wielokrotnością rzędu dowolnej jej podgrupy A.

Dowód. Rozpatrzmy wszystkie różne warstwy podgrupy A, które oznaczymy przez b_1A, $b_2A, \ldots, b_{\mu-1}A$. (Liczbę warstw oznaczyliśmy jako $\mu-1$ jedynie dla wygody.) Niech h będzie rzędem podgrupy A, każda z warstw zawiera więc dokładnie h elementów. Ale każdy z elementów G musi należeć albo do A, albo do którejś z $\mu-1$ różnych warstw i żaden z elementów nie może pojawić się dwukrotnie. Dostajemy stąd, że $h+(\mu-1)h = \mu h = g$, co było do udowodnienia.

Liczbę μ nazywamy *indeksem* podgrupy A. Natychmiastowym wnioskiem z powyższego twierdzenia jest to, że rząd dowolnego elementu grupy musi być dzielnikiem rzędu grupy, gdyż każdy element a rzędu ν generuje podgrupę $\{e, a, a^2, \ldots, a^{\nu-1}\}$ rzędu ν. Ten ostatni wniosek prowadzi natychmiast do znanego nam już twierdzenia 10.3 głoszącego, że grupa, której rząd jest liczbą pierwszą, musi być grupą cykliczną.

Przykład 10.6. Rozpatrzmy grupę S_3, której elementami są e, (12), (13), (23), (123) i (321). Lewostronne warstwy podgrupy $\{e, (12)\} = A$ są następujące:

$$(13)A = \{(13), (13)(12)\} = \{(13), (123)\},$$
$$(23)A = \{(23), (23)(12)\} = \{(23), (321)\},$$
$$(123)A = \{(123), (123)(12)\} = \{(123), (13)\},$$
$$(321)A = \{(321), (321)(12)\} = \{(321), (23)\}.$$

Są więc dwie różne, rozłączne warstwy lewostronne podgrupy A

$$(13)A = \{(13), (123)\} \text{ i } (23)A = \{(23), (321)\}.$$

Symbolicznie możemy napisać

$$S_3 = A+(13)A+(23)A$$

lub równoważnie

$$S_3 = A+(123)A+(321)A.$$

Zwróćmy uwagę, że warstwy prawostronne podgrupy A nie są identyczne z warstwami lewostronnymi

$$A(13) = \{(13), (12)(13)\} = \{(13), (321)\},$$
$$A(23) = \{(23), (12)(23)\} = \{(23), (123)\},$$

i podobnie dla $A(123)$ i $A(321)$.

Inną podgrupą grupy S_3 jest $B = \{e, (123), (321)\}$. Zbadajmy jej warstwy lewostronne:

$$(12)B = \{(12), (12)(123), (12)(321)\} = \{(12), (23), (13)\}.$$

Warstwy $(13)B$ i $(23)B$ muszą być identyczne z warstwą $(12)B$ zgodnie z poprzednim lematem. Istnieje więc tylko jedna warstwa podgrupy B. Możemy w tym wypadku napisać symbolicznie

$$S_3 = B+(12)B.$$

Ważną relacją, jaka może zachodzić między elementami grupy, jest relacja sprzężenia.

Definicja 10.8. Mówimy, że element $b \in G$ jest sprzężony do $a \in G$, jeśli istnieje jakieś $x \in G$ takie, że

$$b = xax^{-1}.$$

Relacja sprzężenia między elementami grupy jest analogiczna ze związkiem podobieństwa zachodzącym między macierzami, o którym mówiliśmy w rozdziale 3. Zgodnie z powyższą definicją a jest oczywiście sprzężone z sobą samym oraz jeśli a jest sprzężone do b, to b jest sprzężone do a. Zachodzi również następujący prosty fakt.

Lemat. Jeśli a jest sprzężone do b, a element b jest sprzężony do c, to a jest sprzężone do c.

Dowód. Element a jest sprzężony do b, istnieje więc $x \in G$ takie, że $a = xbx^{-1}$. Podobnie istnieje $y \in G$ takie, że $b = ycy^{-1}$. Składając te dwa związki mamy

$$a = x(ycy^{-1})x^{-1} = xycy^{-1}x^{-1} = (xy)c(xy)^{-1},$$

gdyż $y^{-1}x^{-1} = (xy)^{-1}$, co może być łatwo sprawdzone przez wykonanie mnożenia. Ale $xy \in G$, a zatem a jest sprzężone do c, jak tego chcieliśmy dowieść.

Relacja sprzężenia jest więc zwrotna, symetryczna i tranzytywna. Sugeruje to następującą definicję.

Definicja 10.9. Wszystkie elementy grupy wzajemnie do siebie sprzężone tworzą klasę równoważności, którą dalej nazywać będziemy w skrócie klasą.

Zgodnie z powyższą definicją dowolne dwa elementy należące do jednej klasy muszą być tego samego rzędu. Załóżmy bowiem, że a jest rzędu n ($a^n = e$) i że b jest sprzężone do a ($b = xax^{-1}$ dla jakiegoś $x \in G$). Wtedy $b^n = (xax^{-1})^n = xax^{-1}xax^{-1} \ldots xax^{-1} = xa^nx^{-1} = xex^{-1} = e$. Mamy również $b^m = xa^mx^{-1}$ dla wszystkich $m < n$. Gdyby więc $b^m = e$, to musiałoby również być $a^m = e$, co nie może być, gdyż a jest rzędu n, a $m < n$. A więc n jest najmniejszą liczbą naturalną, dla której $b^n = e$, to znaczy b jest rzędu n. Oczywiście element jednostkowy tworzy klasę sam dla siebie. Dla każdego innego elementu a tworzymy ciąg:

$$eae^{-1} = a, a_2aa_2^{-1}, a_3aa_3^{-1}, \ldots, a_naa_n^{-1}.$$

Wszystkie elementy tego ciągu są do siebie sprzężone (oczywiście niektóre elementy mogą w tym ciągu wystąpić więcej niż jeden raz), tworzą więc klasę. Tym sposobem każda grupa może być podzielona na klasy. Dla grup abelowych procedura dzielenia na klasy jest bardzo prosta; każdy element tworzy całą klasę, gdyż wszystkie elementy ze sobą komutują.

Przykład 10.7. Rozpatrzmy jeszcze raz grupę S_3, czyli $\{e, (12), (13), (23), (123), (321)\}$. Elementami odwrotnymi do powyższych są kolejno: e, (12), (13), (23), (321) i (123). Element e tworzy oczywiście klasę sam dla siebie. Dokonajmy teraz sprzężenia elementu (12) przez wszystkie elementy grupy S_3:

1) $e(12)e^{-1} = (12)$,

2) $(12)(12)(12)^{-1} = (12)$,

3) $(13)(12)(13)^{-1} = (13)(12)(13) = (13)(132) = (13)(321) = (13)(31)(32) = (23)$,

4) $(23)(12)(23)^{-1} = (23)(12)(23) = (23)(21)(23) = (23)(231) = (23)(312) =$
$= (23)(32)(31) = (13)$,

5) $(123)(12)(123)^{-1} = (123)(12)(321) = (13)(12)(12)(321) = (13)(321) =$
$= (13)(31)(32) = (23)$.

6) $(321)(12)(321)^{-1} = (321)(12)(123) = (321)(12)(231) = (321)(12)(21)(23) =$
$= (321)(23) = (31)(32)(23) = (13)$.

Powyższe obliczenia pokazują niektóre chwyty, jakich używamy dla uproszczenia manipulacji z cyklami. W szczególności wielokrotnie korzystaliśmy z dwóch ważnych własności cykli: (1) kwadrat dowolnej transpozycji daje element jednostkowy, (2) cykl rzędu trzeciego (jak również każdy inny) może być uporządkowany na więcej niż jeden sposób, który wybieramy dla wygody różnie w różnych sytuacjach. Z powyższych obliczeń widzimy, że (12), (13) i (23) tworzą klasę. Pozostają więc jeszcze elementy (123) i (321). Mamy jednak

$$e(123)e^{-1} = (123),$$

$$(12)\,(123)\,(12)^{-1} = (12)\,(13)\,(12)\,(12) = (12)\,(13) = (132) = (321).$$

Nie musimy obliczać dalej, gdyż przekonaliśmy się już, że (123) i (321) są wzajemnie sprzężone. Muszą więc należeć do tej samej klasy. Ponieważ wszystkie elementy grupy zostały już wyczerpane, znaczy to, że znaleźliśmy już wszystkie klasy grupy S_3. Wyniki nasze możemy podsumować

$$\mathscr{C}_1 = e,$$
$$\mathscr{C}_2 = \{(12), (13), (23)\},$$
$$\mathscr{C}_3 = \{(123), (321)\}.$$

Zauważmy tu bez dowodu, że dla grup permutacji podział na klasy odpowiada zawsze podziałowi zgodnie ze strukturą cykli tak jak w rozpatrywanym przykładzie grupy S_3. Oznacza to na przykład, że w przypadku S_4 wszystkie $4! = 24$ elementy rozpadają się na następujące klasy:

$\mathscr{C}_1 = e,$
$\mathscr{C}_2 = \{(12), (13), (14), (23), (24), (34)\},$
$\mathscr{C}_3 = \{(123), (321), (124), (421), (134), (431), (234), (432)\},$
$\mathscr{C}_4 = \{(12)\,(34), (13)\,(24), (14)\,(23)\},$
$\mathscr{C}_5 = \{(1234), (1243), (1324), (1342), (1423), (1432)\}.$

Przyjmijmy teraz, że H jest pewną podgrupą grupy G. Zbiór $H' = aHa^{-1}$, gdzie $a \in G$ stanowi również podgrupę grupy G. Istotnie, jeśli $x \in H$ i $y \in H$, to axa^{-1} i aya^{-1} są dwoma elementami H'. Ale

$$(axa^{-1})\,(aya^{-1}) = a(xy)a^{-1},$$

a ponieważ $xy \in H$, to $a(xy)a^{-1} \in H'$. Tak więc H' jest zbiorem zamkniętym ze względu na mnożenie. Łatwo również sprawdzić dla zbioru H' inne własności grupowe. Oczywiście, jeśli $a \in H$, to H' jest jednojednoznacznym odwzorowaniem podgrupy H w siebie. Podgrupa $H' = aHa^{-1}$ nazywa się podgrupą sprzężoną do H w grupie G.

Definicja 10.10. Jeśli $aHa^{-1} = H$ dla wszystkich $a \in G$, to H nazywa się podgrupą inwariantną.

Dla podgrupy inwariantnej $aH = Ha$, możemy więc podać inną definicję: H jest podgrupą inwariantną, jeśli jej warstwy lewostronne i prawostronne utworzone dla każdego $a \in G$ są identyczne. Z tego wynika, że podgrupa B grupy S_3 omawiana w przykładzie 10.6 jest podgrupą inwariantną. Natomiast podgrupa A tejże grupy S_3 nie jest inwariantna. Oczywiście dla każdej grupy jedynka i cała grupa są zawsze podgrupami inwariantnymi.

Definicja 10.11. Grupa nie mająca nietrywialnych (tzn., różnych od jedynki i całej grupy) podgrup inwariantnych nazywa się grupą prostą.

Lemat. Jeśli H jest podgrupą grupy G, to H jest inwariantne wtedy i tylko wtedy, jeśli zawiera całe klasy grupy G, tzn. jeśli H zawiera jeden element jakiejś klasy, to musi zawierać wszystkie inne elementy tej klasy.

Dowód. Załóżmy najpierw, że H jest podgrupą inwariantną, wtedy dla każdego $x \in H$ i $a \in G$ element $axa^{-1} \in H$. Z definicji 10.9 wynika zatem, że jeśli $\mathscr{C}$ jest klasą zawierającą x, to wszystkie inne elementy należące do klasy $\mathscr{C}$ należą również do H. W ten sam sposób wnioskujemy również, że jeśli $y \in \mathscr{C}'$ ($\mathscr{C}' \neq \mathscr{C}$), to wszystkie elementy klasy $\mathscr{C}'$ muszą należeć do H. Tak więc H zawiera jedynie pełne klasy, przy czym klas tych może być więcej niż jedna. W istocie, ponieważ element e zawsze sam stanowi klasę, to jedynie najbardziej trywialna inwariantna podgrupa (złożona tylko z elementu jednostkowego) może składać się akurat z jednej klasy. Na odwrót, przypuśćmy teraz, że H zawiera jedynie pełne klasy. Wtedy każdy element $x \in H$ należy do pewnej klasy $\mathscr{C}$; ponadto każdy element klasy $\mathscr{C}$ należy do H wraz z elementem x. Oznacza to, że dla każdego $a \in G$ zachodzi $axa^{-1} \in H$. Ponieważ argument ten działa dla każdego x, to podgrupa H jest inwariantna.

Jednym z najbardziej interesujących wyników teorii grup jest to, że warstwy podgrupy inwariantnej same stanowią grupę!

Twierdzenie 10.5. Zbiór składający się z podgrupy inwariantnej H i wszystkich jej różnych warstw sam stanowi grupę zwaną grupą ilorazową grupy G oznaczoną zazwyczaj symbolem G/H. (Pamiętajmy, że dla grupy inwariantnej warstwy lewostronne i prawostronne są identyczne.) Mnożenie dwóch warstw aH i bH zdefiniowane jest jako tworzenie zbioru wszystkich różnych iloczynów $z = xy$, gdzie $x \in aH$ a $y \in bH$; elementem jednostkowym grupy ilorazowej jest sama podgrupa H.

Dowód. Rozpatrzmy dowolną warstwę aH. Ponieważ $HH = H$, to

$$(aH)H = aHH = aH \quad \text{oraz} \quad H(aH) = HaH = aHH = aH.$$

A więc H jest rzeczywiście elementem jednostkowym. Skorzystaliśmy tu z równości warstw lewostronnych i prawostronnych: $aH = Ha$ wynikającej z faktu, że H jest podgrupą inwariantną. Biorąc dowolne dwie warstwy aH i bH, mamy

$$(aH)(bH) = aHbH = abHH = abH.$$

A więc iloczyn dwóch warstw daje znów jakąś warstwę. Wreszcie elementem odwrotnym do aH jest oczywiście $a^{-1}H$, gdyż H jest jedynką, oraz

$$(aH)(a^{-1}H) = aa^{-1}HH = HH = H.$$

To kończy dowód, że G/H jest rzeczywiście grupą.

Prostą ilustrację tego twierdzenia możemy podać już dla grupy S_3. Zauważyliśmy w swoim czasie, że podgrupa $B = \{e, (123), (321)\}$ jest inwariantna. Jej warstwę można zapisać jako $(12)B$. Grupa ilorazowa składa się więc z dwóch elementów.

$$E = B = \{e, (123), (321)\}, \quad A = (12)B = \{(12), (13), (23)\}$$

z prawem mnożenia $A^2 = E$. Dla oznaczenia elementów grupy ilorazowej będziemy używać dużych liter. Mnożenie dwóch takich elementów oznaczać będziemy kropką dla uniknięcia omyłek z mnożeniem macierzowym.

Na grupę ilorazową możemy również spojrzeć jako na odwzorowanie jednej grupy G na inną grupę G'. Odwzorowanie to zachowuje iloczyn grupowy, ale nie jest na ogół jednojednoznaczne. Odwzorowanie to nazywa się *homomorfizmem*; należy je odróżniać od izomorfizmu, który jest też odwzorowaniem zachowującym działanie grupowe, ale ponadto zawsze jednojednoznacznym. Mówimy, że G' jest obrazem homomorficznym grupy G. W powyższym przykładzie powiemy, że elementy e (123), (321) są odwzorowane na element jednostkowy E grupy G', a elementy (12), (13), (23) są odwzorowane na element $A (A^2 = E)$. Zgodnie z dowodem twierdzenia 10.5 odwzorowanie to musi zachowywać iloczyn. Na przykład (13) (12) jest elementem iloczynu $A \cdot A$. Ponieważ (13) (12) = (123), to iloczyn ten należy do E, jak być powinno, gdyż $A \cdot A = E$. Podobnie (123) (12) $\in E \cdot A$, co znów jest tak, jak być powinno, gdyż (123) (12) = (13), a element (13) istotnie należy do A. Czytelnik może sprawdzić, że wyniki wszystkich mnożeń są istotnie takie, jakie powinny być zgodnie z twierdzeniem 10.5. Pozostawiamy czytelnikowi również dowód twierdzenia, że przy każdym homomorfizmie grupy G na G' te elementy grupy G, które przechodzą w element jednostkowy grupy G', tworzą podgrupę inwariantną grupy G. Pozostałe elementy grupy G' muszą więc być obrazami warstw podgrupy inwariantnej.

Przykład 10.8. Aby dokładniej zilustrować powyższe rozważania oraz dla zapoznania się z nieco bardziej skomplikowaną grupą od rozważanych dotychczas, zajmijmy się teraz grupą S_4. Jak już wspominaliśmy, S_4 można podzielić na pięć klas zgodnie ze strukturą cykli:

$\mathscr{C}_1 = e,$

$\mathscr{C}_2 = (12), (13), (14), (23), (24), (34),$

$\mathscr{C}_3 = (123), (124), (134), (234), (321), (421), (431), (432),$

$\mathscr{C}_4 = (12)(34), (13)(24), (14)(23),$

$\mathscr{C}_5 = (1234), (1243), (1324), (1342), (1423), (1432).$

Chcielibyśmy ustalić, czy istnieje jakaś nietrywialna podgrupa inwariantna grupy S_4. Ponieważ wiemy, że podgrupa taka musi zawierać pełne klasy, a ponadto jej rząd musi być dzielnikiem rzędu grupy $(4! = 24)$, to zgodnie z poprzednim lematem mamy jedynie dwie możliwości

$$H = \mathscr{C}_1 + \mathscr{C}_4, \qquad H' = \mathscr{C}_1 + \mathscr{C}_3 + \mathscr{C}_4.$$

Rząd H wynosi cztery, a podgrupy H' dwanaście. Oba te rzędy są oczywiście dzielnikami liczby 24; gdybyśmy utworzyli np. $H'' = \mathscr{C}_1 + \mathscr{C}_2$, to ponieważ 7 nie jest dzielnikiem liczby 24, H'' nie mogłoby w ogóle być podgrupą. Zbiór H' jest podgrupą permutacji parzystych. Ponieważ każda warstwa musi mieć tyle elementów co odpowiednia podgrupa, to H' może mieć tylko jedną warstwę, a mianowicie zbiór $\mathscr{C}$ wszystkich permutacji nieparzystych (które nie tworzą podgrupy). W szczególności lewostronne i prawostronne warstwy muszą być identyczne, a więc H' jest rzeczywiście podgrupą inwariantną. Grupa ilorazowa S_4/H' składająca się z dwóch zbiorów H' i $\mathscr{C}$ jest izomorficzna z dwuelementową grupą cykliczną. Jest oczywiste, że grupa cykliczna rzędu drugiego jest grupą ilorazową dla każdej grupy symetrycznej S_n, gdyż połowa elementów grupy S_n to permutacje parzyste, a druga połowa to permutacje nieparzyste.

O tym, że H również jest grupą można się przekonać zauważając, że zgodnie z dyskusją następującą po dowodzie twierdzenia 10.2 zbiór tych czterech elementów jest

izomorficzny z czterogrupą. A jak wyglądają warstwy podgrupy H? Rachunki są oczywiste, chociaż dość żmudne. Mamy

$$(12)H = \{(12), (34), (1324), (1423)\},$$
$$(13)H = \{(13), (24), (1234), (1432)\},$$
$$(23)H = \{(23), (14), (1243), (1342)\}.$$

Zgodnie z pierwszym lematem tego paragrafu musimy również mieć

$$(12)H = (34)H = (1324)H = (1423)H,$$
$$(13)H = (24)H = (1234)H = (1432)H,$$
$$(23)H = (14)H = (1243)H = (1342)H.$$

Rozpatrzmy teraz $(123)H$. Stwierdzamy, że

$$(123)H = \{(123), (134), (432), (421)\}.$$

Zbiór powyższy stanowi połowę klasy $\mathscr{C}_3$, tak więc wiemy (dlaczego?), że $(321)H$ musi być ostatnią warstwą podgrupy H. W istocie

$$(321)H = \{(321), (234), (124), (431)\}.$$

Zbiór tych sześciu obiektów $\{H, (12)H, (13)H, (23)H, (123)H, (321)H\}$ jest izomorficzny z grupą S_3; przyglądając się im możemy ustalić odpowiedniość

$$H \to e, \quad (12)H \to (12), \quad (13)H \to (13),$$
$$(23)H \to (23), \quad (123)H \to (123), \quad (321)H \to (321).$$

Na przykład $(1324) \in (12)H$ i $(1234) \in (13)H$. Proste obliczenia dają

$$(1324)(1234) = (4132)(1234) = (42)(43)(41)(14)(13)(12) =$$
$$= (42)(43)(13)(12) = (432)(123) = (324)(312) =$$
$$= (34)(32)(32)(31) = (34)(31) = (314) = (431),$$

który to element należy do $(321)H$. Ponieważ $(12)(13) = (132) = (321)$, widzimy, że istotnie ma miejsce izomorfizm

$$[(12)H][(13)H] = (321)H \text{ oraz } (12)(13) = (321).$$

10.4. SYMETRIE I REPREZENTACJE GRUP

Rola teorii grup w fizyce jest nierozerwalnie związana z symetriami otaczającego nas świata. Znaczenie takich symetrii, jak niezmienniczość względem przesunięć i obrotów i ich związek z prawami zachowania pędu i momentu pędu były doceniane od bardzo dawna, są one znane studentom już z mechaniki klasycznej. W miarę rozwoju mechaniki kwantowej, w której świat fizyczny jest od nas oddzielony przez pośrednictwo „funkcji falowej", teoria grup stała się szczególnie ważna. Aby zobaczyć, dlaczego tak jest, musimy najpierw sprecyzować, co znaczą takie zwroty jak „niezmienniczość translacyjna" czy „niezmienniczość obrotowa".

Przypuśćmy, że mamy grupę G operatorów $U_1, U_2, U_3, \ldots$, które mogą działać na elementy x przestrzeni wektorowej V. Przez grupę operatorów rozumiemy po prostu zbiór operatorów działających w przestrzeni V spełniających aksjomaty grupy zawarte w definicji

10.1. Wynik działania operatorów U_1, U_2, U_3, ... na wektor x będziemy jak zwykle opisywali w postaci U_1x, U_2x, U_3x, ... Przykładem takiej grupy w przestrzeni trójwymiarowej jest zbiór $\{T_\mathbf{a}\}$, gdzie $\mathbf{a}$ jest dowolnym trójwymiarowym wektorem, a działanie $T_\mathbf{a}$ określone jest w sposób następujący

$$T_\mathbf{a}\mathbf{r} = \mathbf{r}-\mathbf{a}. \tag{10.8}$$

A więc $T_\mathbf{a}$ jest operatorem *przesunięcia* (translacji). Zauważmy, że zbiór tych operatorów jest mnogością nieskończoną, gdyż $\mathbf{a}$ może być dowolnym wektorem. Cały zbiór jest oczywiście grupą, a złożenie dwóch przesunięć jest oczywiście znów pewnym przesunięciem. W istocie z równania definiującego (10.8) możemy wywnioskować, że grupa nasza jest abelowa, gdyż

$$T_\mathbf{a}T_\mathbf{b} = T_{\mathbf{a}+\mathbf{b}} = T_\mathbf{b}T_\mathbf{a}.$$

Oczywiście operatory takie można uogólnić do dowolnej liczby wymiarów. Przypuśćmy teraz, że w takiej przestrzeni wektorowej określiliśmy funkcje f, g, ... przypisujące każdemu wektorowi pewną liczbę zespoloną. W trójwymiarowej przestrzeni euklidesowej przykładem takiej funkcji może być na przykład $f(\mathbf{r}) = x^4+y^4+z^4$.

W ogólnym przypadku przestrzeni wektorowej V, do której należy wektor x, funkcję tę będziemy zapisywali jako $f(x)$. Niech U_i będzie dowolnym elementem grupy transformacji, o której mówiliśmy przed chwilą. Co możemy powiedzieć o działaniu funkcji f na przetransformowany wektor $U_i^{-1}x$? Zdefiniujmy operator $\mathscr{U}_i$, który działa na funkcję zmiennej x w taki sposób, że dla wszystkich f

$$\mathscr{U}_i f(x) = f(U_i^{-1}x).$$

Rozpatrzmy teraz funkcje $\mathscr{U}_i\mathscr{U}_j f(x)$. Z powyższej definicji mamy

$$\mathscr{U}_i\mathscr{U}_j f(x) = \mathscr{U}_i f(U_j^{-1}x) = f(U_j^{-1}U_i^{-1}x) = f([U_iU_j]^{-1}x).$$

A zatem jeśli $U_iU_j = U_k$, to $\mathscr{U}_i\mathscr{U}_j = \mathscr{U}_k$, i zatem elementy $\mathscr{U}_1$, $\mathscr{U}_2$, ... tworzą grupę $\mathscr{G}$ izomorficzną z grupą G.

Dla ilustracji tych rozważań rozszerzmy nieco nasz przykład grupy $\{T_\mathbf{a}\}$. Pytamy: czy można znaleźć operator $\mathscr{T}_\mathbf{a}$ taki, by

$$\mathscr{T}_\mathbf{a} f(\mathbf{r}) = f(T_\mathbf{a}^{-1}\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}+\mathbf{a})?$$

W ogólności, zanim postaramy się podać jawną postać operatora $\mathscr{T}_\mathbf{a}$ należy powiedzieć coś o własnościach funkcji $f(x)$, $g(x)$, ... Dla prostoty załóżmy o naszych funkcjach, że są one analityczne. W takim wypadku dla $f(\mathbf{r}+\mathbf{a})$ możemy napisać szereg Taylora

$$f(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\mathbf{a}\nabla)^n f(\mathbf{r}).$$

Symboliczne rozwinięcie powyższe można zapisać tak

$$f(\mathbf{r}+\mathbf{a}) = e^{\mathbf{a}\cdot\nabla}f(\mathbf{r}).$$

Widzimy więc, że

$$\mathscr{T}_\mathbf{a} = e^{\mathbf{a}\cdot\nabla}. \tag{10.9}$$

Gdyby mieć na uwadze mechanikę kwantową, to wzór powyższy można by zapisać w postaci

$$\mathscr{T}_\mathbf{a} = e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}/\hbar}, \tag{10.10}$$

gdzie $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ jest kwantowomechanicznym operatorem pędu.

Podobnie jeśli rozpatrujemy obroty R_α^z układu współrzędnych wokół osi z tak, że $(r, \theta, \phi) \to (r, \theta, \phi - \alpha)$, to odpowiadający im operator będzie

$$\mathscr{R}_\alpha^z = e^{\alpha(\partial/\partial\phi)} = e^{i\alpha L_z/\hbar}, \tag{10.11}$$

gdzie $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$ jest kwantowomechanicznym operatorem z-owej składowej momentu pędu. Dla obrotów o kąty β i γ wokół osi y i x mamy odpowiednio

$$\mathscr{R}_\beta^y = e^{i\beta L_y/\hbar} \quad \text{i} \quad \mathscr{R}_\gamma^x = e^{i\gamma L_x/\hbar}. \tag{10.12}$$

Grupy tego typu jak scharakteryzowane przez zbiory $\{\mathscr{T}_\mathbf{a}\}$ lub $\{\mathscr{R}_\alpha^z\}$ są zwane grupami *transformacji*. Oba powyższe przykłady dotyczą grup nieskończonych. Potrafiliśmy scharakteryzować grupę translacji przy pomocy wektora $\mathbf{a}(= a_x, a_y, a_z)$, a grupę obrotów wokół osi z przy pomocy kąta α. Parametry te zmieniają się w sposób ciągły, a odpowiednie grupy nazywają się z tego powodu grupami ciągłymi.

Postaramy się teraz powiązać powyższe rozważania z treścią poprzednich rozdziałów. Przypuśćmy, że funkcje, o których poprzednio mówiliśmy, należą do przestrzeni wektorowej H i że mają jakiś operator liniowy A_x działający w przestrzeni H. Operator ten w działaniu na dowolną funkcję $f(x) \in H$ daje inną funkcję (wektor) $g(x) \in H$

$$A_x f(x) = g(x). \tag{10.13}$$

Indeks x przy A służy przypomnieniu, że A_x jest operatorem w przestrzeni funkcji, którego działanie zależy od punktu, w którym funkcja jest obliczana. Na przykład możemy mieć

$$A_\mathbf{r} = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Podziałajmy operatorem $\mathscr{U} \in \mathscr{G}$ na obie strony równania (10.13). Otrzymujemy

$$\mathscr{U} A_x f(x) = \mathscr{U} g(x) = g(U^{-1}x).$$

Ponieważ $\mathscr{U}^{-1}\mathscr{U} = I$, więc możemy napisać

$$\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1} \mathscr{U} f(x) = g(U^{-1}x)$$

lub

$$\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1} f(U^{-1}x) = g(U^{-1}x).$$

Ponieważ $A_x f(x) = g(x)$, więc mamy również

$$A_{U^{-1}x} f(U^{-1}x) = g(U^{-1}x).$$

Dochodzimy zatem do wniosku, że

$$\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1} f(U^{-1}x) = A_{U^{-1}x} f(U^{-1}x)$$

dla dowolnego $f \in H$, czyli

$$\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1} = A_{U^{-1}x}.$$

Operator $\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1}$ nazywa się operatorem przetransformowanym; powyższy wynik mówi nam, że przetransformowany operator w punkcie x jest równy operatorowi nieprzetransformowanemu w punkcie $U^{-1}x$. Często jest prościej znaleźć postać operatora przetransformowanego obliczając $A_{x'}$, gdzie $x' = \mathscr{U}^{-1}x$, niż obliczając $\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1}$. Jeśli tak się zdarzy, że operator przetransformowany w punkcie x równa się operatorowi nieprzetransformowanemu w tym samym punkcie x, tzn. jeśli dla wszystkich $\mathscr{U} \in \mathscr{G}$ zachodzi

$$\mathscr{U} A_x \mathscr{U}^{-1} = A_x,$$

to mówimy, że operator A_x jest niezmienniczy ze względu na grupę $\mathcal{G}$. Podobnie jeśli dla wszystkich $\mathcal{U} \in \mathcal{G}$ spełnione jest $\mathcal{U}f(x) = f(x)$, to mówimy, że funkcja f jest niezmiennicza ze względu na grupę $\mathcal{G}$. Zauważmy, że kryterium niezmienniczości operatora A_x można zapisać również tak

$$A_x \mathcal{U} = \mathcal{U} A_x.$$

Innymi słowy, jeśli wszystkie operatory $\mathcal{U} \in \mathcal{G}$ komutują z operatorem A_x, to operator ten jest niezmienniczy względem grupy $\mathcal{G}$.

Łatwo się przekonać, że operator

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

jest niezmienniczy względem grupy operatorów $\mathcal{T}_{\mathbf{a}}$ dla wszystkich $\mathbf{a}$, gdzie operatory $\mathcal{T}_{\mathbf{a}}$ zdefiniowane są wzorem (10.9). Wynika to po prostu stąd, że wszystkie pochodne cząstkowe względem x, y i z komutują ze sobą, a zatem operator $\exp(\mathbf{a} \cdot \nabla)$ komutuje z operatorem ∇^2. Możemy więc powiedzieć, że operator Laplace'a jest niezmienniczy względem przesunięć. Podobna sytuacja zachodzi dla operatorów obrotu $\mathcal{R}_\alpha^z$, $\mathcal{R}_\beta^y$, $\mathcal{R}_\gamma^x$ zdefiniowanych wzorami (10.11) i (10.12). Zgodnie z wzorem (5.89) ∇^2 jest w prosty sposób związany z operatorem $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, a ponieważ operatory L_x, L_y, L_z komutują wszystkie z L^2 (dlaczego?), to widzimy, że operatory obrotu komutują z L^2, a zatem i z ∇^2, czyli operator ∇^2 jest również niezmienniczy względem obrotów.

Jako przykład funkcji niezmienniczej względem obrotów możemy podać funkcję $f(\mathbf{r}) = g(r)$, gdzie g jest dowolną funkcją wartości bezwzględnej r wektora $\mathbf{r}$. Wynika to natychmiast stąd, że L_x, L_y, L_z zależą tylko od kątów θ i ϕ charakteryzujących kierunek wektora $\mathbf{r}$, a nie zależą od wartości bezwzględnej tego wektora (patrz wzór 5.87).

Aby teraz nabrać pewnego wyobrażenia jak działa powyższy formalizm, warto zbadać operator, który nie jest niezmienniczy względem jakiejś grupy. Rozpatrzmy na przykład operator X_x zdefiniowany wzorem $X_x f(x) = xf(x)$. Zbadamy, jak operator ten transformuje się pod wpływem operatorów translacji T_a zmiennej x. ($T_a x = x - a$ dla wszystkich x). Przetransformowany operator X_x obliczymy na dwa sposoby. Prostszy z nich polega na skorzystaniu ze związku

$$\mathcal{T}_a X_x \mathcal{T}_a^{-1} = X_{T_a^{-1}x}.$$

Ponieważ $T_a^{-1} x = x + a$, więc widzimy natychmiast, że

$$\mathcal{T}_a X_x \mathcal{T}_a^{-1} = X_x + a.$$

Możemy również wyznaczyć przetransformowany operator sprawdzając, jak $\mathcal{T}_a X_x \mathcal{T}_a^{-1}$ działa na dowolną funkcję

$$\mathcal{T}_a X_x \mathcal{T}_a^{-1} f(x) = \mathcal{T}_a X_x f(T_a x) = \mathcal{T}_a X_x f(x-a) = \mathcal{T}_a x f(x-a) =$$
$$= (x+a) f(x) = (X_x + a) f(x).$$

Oczywiście dostajemy to co poprzednio. Jasne jest teraz, że operator X_x nie jest niezmienniczy względem grupy przesunięć. Nieco bardziej skomplikowany przykład transformacji operatorów znajdzie czytelnik w zadaniu 10.10.

Zajmijmy się teraz zagadnieniem własnym

$$A_x f(x) = \lambda f(x). \tag{10.14}$$

Zakładamy, że mamy na uwadze jakiś problem fizyczny, to znaczy zakładamy, że operator A_x jest samosprzężony. Zakładamy ponadto, że operator A_x jest niezmienniczy względem pewnej grupy operatorów $\mathscr{G}$. Przez $\mathscr{U}$ oznaczać będziemy jakiś dowolny operator należący do tej grupy. Powstaje teraz następujące pytanie. Jeśli operator A_x jest niezmienniczy względem grupy $\mathscr{G}$, to czy również wektory własne są względem tej grupy niezmiennicze? Aby odpowiedzieć na to pytanie, podziałajmy operatorem $\mathscr{U}$ na obie strony równania własnego (10.14). Dostajemy

$$\mathscr{U}A_x f(x) = \lambda \mathscr{U} f(x).$$

Ponieważ z założenia $\mathscr{U}A_x = A_x\mathscr{U}$, więc mamy

$$A_x \mathscr{U} f(x) = \lambda \mathscr{U} f(x).$$

Z równania powyższego odczytujemy, że jeśli $f(x)$ jest funkcją własną operatora A_x należącą do wartości własnej λ, to $\mathscr{U}f(x)$ jest również funkcją własną o tej samej wartości własnej. Nie musi to oczywiście oznaczać, że $f(x) = \mathscr{U}f(x)$. Jeśli jednakże λ jest niezdegenerowaną wartością własną, to wtedy oczywiście dojść musimy do wniosku, że $\mathscr{U}f(x)$ różni się od $f(x)$ jedynie o stałą multiplikatywną

$$\mathscr{U}f(x) = D(U)f(x),$$

gdzie stałą zapisaliśmy jako $D(U)$ dla podkreślenia, że może ona zależeć od elementu U grupy G.

Jeżeli jednak wartość własna λ ma krotność μ, to musimy napisać

$$A_x f_i(x) = \lambda f_i(x), \quad i = 1, 2, \ldots, \mu,$$

$$A_x \mathscr{U} f_i(x) = \lambda \mathscr{U} f_i(x) \quad i = 1, 2, \ldots, \mu.$$

W tym przypadku dochodzimy do wniosku, że $\mathscr{U}f_i(x)$ jest liniową kombinacją elementów zbioru $\{f_i(x)\}$, czyli

$$\mathscr{U} f_i(x) = \sum_{j=1}^{\mu} D_{ji}(U) f_j(x). \tag{10.15}$$

Rozpatrzmy teraz wyrażenie $\mathscr{U}_1\mathscr{U}_2 f_i(x)$, gdzie $\mathscr{U}_1, \mathscr{U}_2 \in \mathscr{G}$. Na mocy ostatniego wzoru mamy

$$\mathscr{U}_1\mathscr{U}_2 f_i(x) = \mathscr{U}_1 \sum_{j=1}^{\mu} D_{ji}(U_2) f_j(x) = \sum_{j=1}^{\mu} D_{ji}(U_2) \mathscr{U}_1 f_j(x).$$

Ponieważ

$$\mathscr{U}_1 f_j(x) = \sum_{k=1}^{\mu} D_{kj}(U_1) f_k(x),$$

więc mamy

$$\mathscr{U}_1\mathscr{U}_2 f_i(x) = \sum_{j=1}^{\mu} \sum_{k=1}^{\mu} D_{kj}(U_1) D_{ji}(U_2) f_k(x).$$

Zachodzi jednak również

$$\mathscr{U}_1\mathscr{U}_2 f_i(x) = \sum_{k=1}^{\mu} D_{ki}(U_1 U_2) f_k(x).$$

Składając ostatnie dwa równania dostajemy

$$\sum_{k=1}^{\mu}\left[D_{ki}(U_1U_2)-\sum_{j=1}^{\mu}D_{kj}(U_1)D_{ji}(U_2)\right]f_k(x)=0.$$

Ale zbiór $\{f_k(x)\colon k=1,2,\ldots,\mu\}$ jest liniowo niezależny, więc

$$D_{ki}(U_1U_2)=\sum_{j=1}^{\mu}D_{kj}(U_1)D_{ji}(U_2)$$

dla wszystkich $i, k = 1, 2, \ldots, \mu$. A zatem macierze $D(U_1)$, $D(U_2)$, ... tworzą grupę będącą homomorficznym odwzorowaniem grupy G i grupy $\mathscr{G}$. Taki zbiór macierzy nazywamy *reprezentacją* grupy G. Reprezentacja grupy G jest homomorficznym odwzorowaniem grupy G w zbiór skończenie wymiarowych macierzy.

Widzimy, że istnieje bardzo ścisły związek między symetriami a degeneracją fizycznych zagadnień własnych. Na przykład w mechanice kwantowej często się zdarza, że hamiltonian rozpatrywanego układu fizycznego jest niezmienniczy względem obrotów. Oczekujemy, że w takim przypadku funkcje własne odpowiadające pewnemu zdegenerowanemu poziomowi energetycznemu transformują się przy obrotach między sobą, tworząc w ten sposób jedną z reprezentacji grupy obrotów. Ponieważ w zagadnieniach własnych fizyki degeneracja jest raczej regułą niż wyjątkiem, przeto nic dziwnego, że badanie reprezentacji grup odgrywa w fizyce bardzo ważną rolę. Obecnie przejdziemy do badania i klasyfikacji takich właśnie reprezentacji.

10.5. REPREZENTACJE NIEPRZYWIEDLNE

Rozpocznijmy od wyprowadzenia paru ogólnych wniosków dotyczących możliwości znajdywania reprezentacji grup. Oczywiście dla dowolnej grupy istnieje zawsze jeden możliwy homomorfizm, a mianowicie odwzorowanie przyporządkowujące każdemu elementowi grupy jednowymiarową macierz równą 1. Wszystkie własności grupowe są oczywiście spełnione w trywialny sposób, ale reprezentacja taka nie jest zbyt użyteczna. Mimo to, jest to zawsze jedna z możliwych reprezentacji i nie można jej zaniedbać przy klasyfikacji reprezentacji. Również jeśli znajdziemy jakąś reprezentację n-wymiarową, to zawsze można podać odpowiadającą jej reprezentację jednowymiarową, w której każdemu elementowi grupy G odpowiada wyznacznik n-wymiarowej macierzy należącej do reprezentacji. Wynika to natychmiast ze związku

$$\det(AB)=(\det A)(\det B).$$

Inna możliwość pojawia się wtedy, gdy grupa G ma podgrupę niezmienniczą, a związana z nią grupa ilorazowa G/H ma znane reprezentacje. Ponieważ grupa ilorazowa jest homomorficznym odwzorowaniem grupy G, to reprezentację G tworzymy przypisując każdemu elementowi $U \in G$ macierz reprezentującą ten element grupy G/H, na który odwzorowany jest element U.

Trzecia interesująca reprezentacja grupy może być otrzymana z samej tabelki mnożenia grupowego. Nazywa się ona *reprezentacją regularną* i będziemy z niej korzystali dalej w tym rozdziale. Podstawowa idea zawarta jest w twierdzeniu 10.1. Jeśli weźmiemy pewien element

grupy G, powiedzmy U_ν i pomnożymy przez niego każdy element grupy, to elementy te zostaną jedynie inaczej uporządkowane. Symbolicznie

$$U_\nu U_j = U_i, \tag{10.16}$$

gdzie i i j przebiega wszystkie elementy grupy. Możemy tę zmianę uporządkowania przedstawić w postaci macierzowej reprezentując element U_ν w postaci macierzy $D_{ij}(U_\nu)$ o wymiarze $g \times g$, gdzie g jest wymiarem grupy. Każda kolumna tej macierzy z wyjątkiem jednej 1-ki zawiera same zera, przy czym położenie tej jedynki określa się z równania (10.16) w sposób następujący. Jeśli $U_\nu U_j = U_i$, to element i, j macierzy $D(U_\nu)$ równa się 1, a pozostałe elementy i-tego wiersza i j-tej kolumny są równe zeru. Reguła powyższa nie prowadzi do sprzeczności, gdyż jeśli $U_\nu U_j = U_i$, to nie może jednocześnie być $U_\nu U_k = U_i$, chyba że $k = j$. Podobnie jeśli $U_\nu U_j = U_i$, to nie może równocześnie być $U_\nu U_j = U_k$, chyba że $i = k$. W tej reprezentacji element jednostkowy grupy jest przedstawiony przy pomocy jednostkowej macierzy $g \times g$, a wszystkie pozostałe elementy G są reprezentowane przez macierze, które na przekątnej mają same zera.

Pokażemy teraz, że odwzorowanie powyższe zachowuje iloczyn grupowy. Rozpatrzmy równanie macierzowe

$$M = D(U_\nu) D(U_\mu).$$

Po rozpisaniu na składowe mamy

$$M_{ij} = \sum_{k=1}^{g} D_{ik}(U_\nu) D_{kj}(U_\mu), \qquad i, j = 1, 2, \ldots, g.$$

Z reguł mnożenia macierzy wynika bezpośrednio, że macierz M musi być tego samego typu, co macierze $D(U_\nu)$ i $D(U_\mu)$ — to znaczy w każdym wierszu i w każdej kolumnie macierzy M znajduje się tylko jeden różny od zera element, który musi być równy 1. Wystarczy więc jedynie sprawdzić, czy element ten znajduje się na właściwym miejscu. Przypuśćmy zatem, że $M_{ij} = 1$. Istnieje dokładnie jedno takie k, że

$$D_{ik}(U_\nu) = 1, \qquad D_{kj}(U_\mu) = 1.$$

Powyższe równania oznaczają, że

$$U_\nu U_k = U_i, \qquad U_\mu U_j = U_k.$$

Stąd

$$U_\nu U_\mu U_j = U_i,$$

co oznacza, że element i, j macierzy $D(U_\nu U_\mu)$ równa się 1. Możemy więc zidentyfikować M_{ij} z $D_{ij}(U_\nu U_\mu)$, dla wszystkich i i j. A zatem

$$D(U_\nu U_\mu) = D(U_\nu) D(U_\mu),$$

a to oznacza, że istotnie mamy do czynienia z reprezentacją, co właśnie chcieliśmy wykazać.

Dla przykładu rozpatrzmy grupę cykliczną rzędu czwartego, dla której reguły mnożenia zawarte są w tabeli (10.4). Jeśli oznaczymy $a_1 = e$, $a_2 = a$, $a_3 = b = a^2$, $a_4 = c = a^3$, to znajdujemy na przykład

$$aa_1 = ae = a = a_2,$$
$$aa_2 = aa = b = a_3,$$
$$aa_3 = aa^2 = c = a_4,$$
$$aa_4 = aa^3 = e = a_1,$$

a zatem elementy D_{21}, D_{32}, D_{43} i D_{14} macierzy $D(a)$ są równe 1, a wszystkie pozostałe znikają. W podobny sposób znajdujemy $D(b)$ i $D(c)$. Oczywiście $D(e)$ jest macierzą jednostkową. Poniżej przedstawiamy rezultaty tych obliczeń

$$D(e)=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}, \qquad D(a)=\begin{bmatrix}0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\end{bmatrix},$$

$$D(b=a^2)=\begin{bmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{bmatrix}, \qquad D(c=a^3)=\begin{bmatrix}0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\end{bmatrix}. \tag{10.17}$$

Przykład powyższy dowodzi istnienia reprezentacji różnych od jednowymiarowych; czytelnik łatwo może sprawdzić, że powyższe cztery macierze spełniają reguły mnożenia tabeli (10.4). Ponadto ponieważ wszystkie te cztery macierze są różne między sobą, to odwzorowanie grupy cyklicznej jest w tym wypadku izomorfizmem. O reprezentacjach takich mówimy, że są *wierne*. Niestety, powyższy przykład nasuwa pewne wątpliwości. Po pierwsze, możemy użyć tej reprezentacji do wygenerowania wielu nowych reprezentacji na przykład przez transformację podobieństwa bądź przez tworzenie iloczynów Kroneckera (iloczynów prostych) wprowadzonych w paragrafie 3.1.

Co do transformacji podobieństwa, to sytuacja jest następująca. Mając reprezentację $D(U_i)$ grupy G możemy dla każdej nieosobliwej macierzy S o tym samym wymiarze co $D(U_i)$ utworzyć macierz

$$\tilde{D}(U_i) \equiv S^{-1}D(U_i)S,$$

gdzie znak „tylda" nie oznacza tu macierzy transponowanej, ale służy jedynie jako oznaczenie.

Korzystając z powyższej definicji znajdujemy

$$\tilde{D}(U_i)\tilde{D}(U_j) = S^{-1}D(U_i)SS^{-1}D(U_j)S = S^{-1}D(U_i)D(U_j)S = S^{-1}D(U_iU_j)S$$

w ostatnim kroku skorzystaliśmy z tego, że $D(U_j)$ jest reprezentacją. Mamy więc

$$\tilde{D}(U_i)\tilde{D}(U_j) = \tilde{D}(U_iU_j),$$

co oznacza, że $\tilde{D}(U_i)$ jest również reprezentacją.

W paragrafie 3.11 wykazaliśmy, że oznaczając iloczyn prosty macierzy A i B symbolem $A\otimes B$ mamy

$$(A_1\otimes B_1)(A_2\otimes B_2) = (A_1A_2)\otimes(B_1B_2), \tag{10.18}$$

o ile macierze A_1 i A_2 (oraz B_1 i B_2) mają ten sam wymiar. To prawo mnożenia sugeruje, że mając dowolne dwie reprezentacje grupy G, powiedzmy $D(U_i)$ i $D'(U_i)$, możemy utworzyć nową reprezentację przyporządkowując

$$U_i \to D(U_i)\otimes D'(U_i).$$

Przyporządkowanie takie zachowuje iloczyn, gdyż na mocy wzoru (10.18)

$$[D(U_i)\otimes D'(U_i)][D(U_j)\otimes D'(U_j)] = [D(U_i)D(U_j)]\otimes[D'(U_i)D'(U_j)] = D(U_iU_j)\otimes D'(U_iU_j).$$

A więc rzeczywiście skonstruowaliśmy nową reprezentację, której wymiar jest iloczynem wymiarów reprezentacji D i D'. Ponieważ poprzednio znaleźliśmy już jedną szczególną reprezentację wielowymiarową, a mianowicie reprezentację regularną, to przy pomocy iloczynu prostego możemy utworzyć dowolnie wielką liczbę innych reprezentacji. Można by przypuszczać, że problem sklasyfikowania wszystkich reprezentacji jest beznadziejnie złożony.

Pokażemy, że tak pesymistyczny wniosek jest nieuzasadniony. W tym celu spójrzmy na problem z nieco innego punktu widzenia.

Zacznijmy od pewnych prostych reprezentacji, by potem przejść do bardziej złożonych przypadków. Najpierw musimy się zdecydować, w jaki sposób będziemy znajdowali reprezentacje. W poprzednim paragrafie przekonaliśmy się już, że jeden ze sposobów może polegać na znalezieniu zbioru liniowo niezależnych funkcji transformujących się między sobą pod działaniem grupy, to znaczy zbioru funkcji $\{f_i(x)\}$ spełniających

$$\mathcal{U}f_i(x) = \sum_j D_{ji}(U)f_j(x)$$

dla wszystkich $\mathcal{U} \in \mathcal{G}$.

Pozostaje nam do ustalenia, jak znaleźć zbiór funkcji mających przyjemną własność przekształcania się wzajemnie w siebie pod działaniem operatorów grupy. Jeden z możliwych sposobów polega na wzięciu dowolnej funkcji $f(x)$ i podziałaniu na nią wszystkimi operatorami $\mathcal{U}_i \in \mathcal{G}$. W ten sposób powstanie zbiór $\{f_i(x)\}$, gdzie

$$f_i(x) \equiv \mathcal{U}_i f(x).$$

Z własności grupowej, zbiór ten spełnia podstawowe żądanie zamknięcia

$$\mathcal{U}_v f_j(x) = \mathcal{U}_v \mathcal{U}_j f(x) = \mathcal{U}_i f(x) = f_i(x),$$

gdzie i jest wyznaczone przez tabelkę mnożenia grupowego. Jeśli wszystkie elementy zbioru $\{f_i(x)\}$ są liniowo niezależne, to procedura taka uwieńczona zostaje powodzeniem. W takim bowiem przypadku

$$\mathcal{U}_v f_j(x) = \sum_k D_{kj}(U_v)f_k(x),$$

gdzie

$$D_{kj}(U_v) = \delta_{ik},$$

a wartość i jest wyznaczona przez równanie $\mathcal{U}_v \mathcal{U}_j = \mathcal{U}_i$. Patrząc wstecz kilka paragrafów przekonujemy się, że jest to po prostu reprezentacja regularna. Nie jest to jednakże jedyna możliwość. Może się bowiem zdarzyć, że funkcje $f_i(x)$ nie są liniowo niezależne. W takim przypadku musimy wybrać podzbiór liniowo niezależny, który będzie również niezmienniczy względem operacji grupowych (dlaczego?). Postępując w powyższy sposób dostaniemy reprezentację o mniejszej liczbie wymiarów niż reprezentacja regularna. Oczywiście nie zawsze trzeba akurat tak postępować, może bowiem się zdarzyć, że potrafimy od razu wybrać zbiór funkcji transformujących się wzajemnie na siebie bez odwoływania się do powyższego intuicyjnego formalizmu.

Przykład 10.9. Szczególnie prostym przykładem jest pod tym względem grupa obrotów wokół osi z-ów. Jest to wprawdzie grupa nieskończona, ciągła, ale nie ma powodów, by się tym zniechęcać. Grupa ta jest bardzo łatwa do badania.

Kiedy mowa o kątach i obrotach, to funkcjami, które przychodzą na myśl, są sinus i cosinus. Oznaczając obrót o kąt α symbolem $R_\alpha(R_\alpha\phi = \phi - \alpha)$ rozpatrzmy funkcje $f_1(\phi) = \cos\phi$ i $f_2(\phi) = \sin\phi$. Ponieważ mamy

$$f_1(R_\alpha^{-1}\phi) = \cos(\phi+\alpha) = \cos\alpha f_1(\phi) - \sin\alpha f_2(\phi),$$
$$f_2(R_\alpha^{-1}\phi) = \sin(\phi+\alpha) = \sin\alpha f_1(\phi) + \cos\alpha f_2(\phi),$$

więc porównując powyższe związki z wzorem (10.15) znajdujemy

$$D^{(1)}(R_\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}.$$

(Różne reprezentacje tej samej grupy rozróżniamy dodatkowym indeksem przy literze D.) Proste mnożenie macierzy przekonuje nas, że

$$D^{(1)}(R_\alpha)D^{(1)}(R_\beta) = D^{(1)}(R_{\alpha+\beta}) = D^{(1)}(R_\beta)D^{(1)}(R_\alpha) = D^{(1)}(R_\alpha R_\beta),$$

a więc znaleźliśmy istotnie dwuwymiarową reprezentację.

Oczywiście wybór funkcji $\sin\phi$ i $\cos\phi$ nie jest bynajmniej jedynym możliwym. Wybierając na przykład $e^{i\phi} = f(\phi)$ dostajemy

$$f(R_\alpha^{-1}\phi) = e^{i(\phi+\alpha)} = e^{i\alpha}e^{i\phi} = e^{i\alpha}f(\phi),$$

co oznacza, że mamy do czynienia z reprezentacją jednowymiarową

$$D^{(2)}(R_\alpha) = e^{i\alpha}.$$

Podobnie dla $g(\phi) = e^{-i\phi}$ dostajemy inną reprezentację jednowymiarową

$$D^{(3)}(R_\alpha) = e^{-i\alpha}.$$

Jasne jest również, że funkcja $f(\phi) = e^{im\phi}$ prowadzi bezpośrednio do reprezentacji $D(R_\alpha) = e^{im\alpha}$. Przyjmujemy, że m jest liczbą całkowitą (dodatnią lub ujemną) po to, by $D(R_0) = D(R_{2\pi})$. Ponieważ funkcje $f_1(\phi) = e^{i\phi}$ oraz $f_2(\phi) = e^{-i\phi}$ są liniowo niezależne, więc możemy utworzyć z nich zbiór $\{f_i\}$. Prowadzi nas do reprezentacji dwuwymiarowej

$$D^{(4)}(R_\alpha) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}.$$

Przykład ten prowadzi nas do sedna sprawy, jeśli chodzi o teorię reprezentacji. Dwuwymiarowa reprezentacja $D^{(4)}(R_\alpha)$ to nic innego jak dwie reprezentacje jednowymiarowe ze sobą połączone. Nie chcielibyśmy nazywać takiej reprezentacji podstawową, gdyż jest ona złożona z dwóch reprezentacji o mniejszej liczbie wymiarów. Sytuacja jeszcze bardziej się komplikuje, jeśli powrócimy znów do reprezentacji $D^{(1)}(R_\alpha)$. Pozornie reprezentacja ta nie ma nic wspólnego z reprezentacją $D^{(4)}(R_\alpha)$. Jeśli jednak zdiagonalizujemy $D^{(1)}$, to stwierdzimy, że

$$S^{-1}D^{(1)}(R_\alpha)S = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = D^{(4)}(R_\alpha),$$

gdzie

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

jest macierzą niezależną od α. Mamy więc transformację podobieństwa przekształcającą $D^{(1)}(R_\alpha)$ dokładnie do postaci $D^{(4)}(R_\alpha)$ i to jednocześnie dla wszystkich R_α. A zatem również $D^{(1)}(R_\alpha)$ jest zasadniczo sumą dwóch reprezentacji $D^{(2)}$ i $D^{(3)}$.

Podobny przypadek może zachodzić również w sytuacjach bardziej skomplikowanych. Na przykład cztery macierze tworzące reprezentację regularną czteroelementowej grupy cyklicznej [wzory (10.17)] mogą być jednocześnie zdiagonalizowane przy pomocy macierzy

$$S' = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & i & -i \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -i & i \end{bmatrix}$$

A zatem macierze $D(e)$, $D(a)$, $D(b)$ i $D(c)$ są wszystkie sumami czterech jednowymiarowych reprezentacji.

Możemy to uogólnić w następujący sposób. Jeśli znajdziemy reprezentację $D(U_i)$, którą można sprowadzić do postaci

$$\tilde{D}(U_i) \equiv SD(U_i)S^{-1} = \begin{bmatrix} D^{(1)}(U_i) & & 0 \\ & D^{(2)}(U_i) & \\ 0 & & D^{(3)}(U_i) \end{bmatrix}, \tag{10.19}$$

gdzie S jest takie samo dla wszystkich U_i, to reprezentacji tej nie będziemy traktowali jako podstawowej, ale jako sumę.

Tłumacząc to na funkcje $f_i(x)$ powiemy, że chociaż znaleźliśmy liniowo niezależny zbiór $\{f_i\}$, którego elementy nawzajem się w siebie przekształcają, to jednak w zbiorze tym istnieją mniejsze podzbiory, które również przekształcają się w siebie pod działaniem rozpatrywanej grupy.

Reprezentacje takie jak we wzorze (10.19) nazywają się *reprezentacjami przywiedlnymi*, reprezentacje, których nie można przy pomocy transformacji podobieństwa sprowadzić do prostszych, nazywają się *reprezentacjami nieprzywiedlnymi*. Oczywiście będziemy chcieli się zajmować przede wszystkim reprezentacjami nieprzywiedlnymi, gdyż wszystkie inne można z nich zbudować w prosty sposób. Ale nawet w klasie reprezentacji nieprzywiedlnych nie chcielibyśmy uważać za różne reprezentacji powiązanych ze sobą przez transformację podobieństwa. Reprezentacje, dla których istnieje takie przekształcenie podobieństwa, nazywają się *reprezentacjami równoważnymi*. Przyjmując, że we wzorze (10.19) reprezentacje $D^{(1)}$, $D^{(2)}$ i $D^{(3)}$ są nieprzywiedlne i nierównoważne, napisalibyśmy symbolicznie

$$D(U_i) = D^{(1)}(U_i) \oplus D^{(2)}(U_i) \oplus D^{(3)}(U_i)$$

dla wszystkich $U_i \in G$. W praktyce, kiedy sprowadzamy reprezentację do powyższej postaci, dana reprezentacja nieprzywiedlna może wystąpić więcej niż jeden raz. Ogólnie więc będziemy pisali

$$D(U_i) = a^{(1)}D^{(1)}(U_i) \oplus a^{(2)}D^{(2)}(U_i) \oplus \cdots \oplus a^{(N)}D^{(N)}(U_i), \tag{10.20}$$

gdzie $a^{(\nu)}$ są liczbami całkowitymi mówiącymi, ile razy dana reprezentacja nieprzywiedlna $D^{(\nu)}(U_i)$, lub jakakolwiek jej równoważna, pojawia się w powyższym rozkładzie.

Bardzo użyteczną charakterystyką reprezentacji — wspólną dla reprezentacji równoważnych — jest *ślad* macierzy reprezentacji. Oznaczamy go symbolem $\chi(U)$ i nazywamy *charakterem elementu* U w danej reprezentacji. Ponieważ ślad macierzy reprezentacji możemy oznaczyć przez

$$\mathrm{tr}[C^{-1}D(U)C] = \mathrm{tr}[D(U)] \equiv \chi(U),$$

więc charakter elementu U jest taki sam dla wszystkich reprezentacji równoważnych. Jeśli mamy do czynienia z reprezentacją nieprzywiedlną $D^{(\nu)}(U)$, to odpowiadający jej charakter oznaczać będziemy $\chi^{(\nu)}(U)$. Ale i dla danej reprezentacji wiele charakterów będzie równych między sobą. Istotnie, rozpatrzmy klasę $\mathscr{C}_i$ elementów sprzężonych grupy G. Jeśli U_ν, $U_\mu \in \mathscr{C}_i$, to istnieje jakieś $U_\lambda \in G$ takie, że

$$U_\nu = U_\lambda U_\mu U_\lambda^{-1}.$$

Oznacza to, że

$$D(U_\nu) = D(U_\lambda)D(U_\mu)D(U_\lambda^{-1}),$$

a stąd

$$\chi(U_\nu) \equiv \mathrm{tr}[D(U_\nu)] = \mathrm{tr}[D(U_\lambda)D(U_\mu)D(U_\lambda^{-1})] =$$
$$= \mathrm{tr}[D(U_\lambda^{-1})D(U_\lambda)D(U_\mu)] = \mathrm{tr}[D(U_\mu)] \equiv \chi(U_\mu),$$

czyli że wszystkie elementy klasy $\mathscr{C}_i$ mają ten sam charakter. Dlatego też bez wprowadzania niejednoznaczności można mówić o charakterach jako funkcjach klas, a nie pojedynczych elementów grupy; $\chi_i^{(\nu)}$ oznacza charakter i-tej klasy w ν-tej nieprzywiedlnej reprezentacji. Jeśli grupa ma k klas, to dla danej reprezentacji nieprzywiedlnej ν trzeba określić k liczb charakterystycznych

$$\chi_1^{(\nu)}, \chi_2^{(\nu)}, \ldots, \chi_k^{(\nu)}.$$

Tych k liczb zawiera w sobie zaskakująco dużo informacji o rozpatrywanej grupie; przekonamy się o tym w dalszych paragrafach.

10.6. REPREZENTACJE UNITARNE, LEMATY SCHURA I ZWIĄZKI ORTOGONALNOŚCI

W paragrafie tym wyprowadzimy główne wyniki teorii reprezentacji, które pozwolą nam znajdywać reprezentacje nieprzywiedlne. Na początek udowodnimy twierdzenie, które kolosalnie ogranicza możliwe a priori postaci reprezentacji.

Twierdzenie 10.6. Każda reprezentacja grupy skończonej jest równoważna reprezentacji unitarnej.

Dowód. Pierwszy krok polega na zdefiniowaniu w określony sposób iloczynu wewnętrznego (skalarnego) w n-wymiarowej przestrzeni wektorowej V, w której działa reprezentacja, i wykazaniu, że reprezentacja jest unitarna względem tego nowego iloczynu wewnętrznego. Dla wektorów $x, y \in V$ zwykły iloczyn skalarny oznaczać będziemy w znany sposób jako (x, y); nowy iloczyn skalarny definiujemy przy pomocy starego w sposób następujący:

$$\{x, y\} = \sum_{U \in G} (D(U)x,\ D(U)y), \tag{10.21}$$

gdzie D jest dowolną reprezentacją grupy G. Korzystając z tego, że $(\ ,\ )$ jest iloczynem skalarnym oraz że $D^{-1}(U)$ istnieje dla wszystkich $U \in G$, łatwo można wykazać, że nowy iloczyn będzie spełniał wszystkie aksjomaty iloczynu skalarnego. Weźmy teraz pod uwagę dowolną macierz $D(U')$. Chcemy wykazać, że

$$\{D(U')x,\ D(U')y\} = \{x, y\}.$$

Korzystając z definicji (10.21) mamy

$$\{D(U')x, D(U')y\} = \sum_{U\in G} (D(U)D(U')x, D(U)D(U')y) =$$

$$= \sum_{U\in G} (D(UU')x, D(UU')y). \tag{10.22}$$

Ale jeśli U przebiega wszystkie elementy grupy G, to zgodnie z twierdzeniem 10.1 iloczyn (UU') też przebiega wszystkie elementy grupy, tyle że na ogół w innej kolejności, co jednak nie ma żadnego wpływu na wartość sumy. A zatem

$$\sum_{U\in G} (D(UU')x, D(UU')y) = \sum_{\tilde{U}\in G} (D(\tilde{U})x, D(\tilde{U})y) = \{x, y\}. \tag{10.23}$$

Łącząc (10.22) z (10.23) dostajemy

$$\{D(U')x, D(U')y\} = \{x, y\}$$

dla dowolnego U', co właśnie chcieliśmy wykazać.

Powiedzenie, że $D(U')$ jest unitarne względem pewnego szczególnego iloczynu skalarnego, oznacza po prostu, że zapisaliśmy $D(U')$ w niedogodnej bazie. Poprzez transformację podobieństwa możemy usunąć tę niedogodność i uczynić D reprezentacją unitarną względem wyjściowego iloczynu skalarnego. Niech $\{\xi_i\}$ oznacza zupełną ortonormalną bazę względem iloczynu skalarnego $(\ ,\ )$, a $\{\eta_i\}$ zupełną ortonormalną bazę względem nowego iloczynu skalarnego $\{\ ,\ \}$. Definiujemy liniowy operator S w przestrzeni V

$$\eta_i = S\xi_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{10.24}$$

Zauważmy, że dla tak zdefiniowanego operatora S i dowolnych elementów $x, y \in V$ zachodzi

$$\{Sx, Sy\} = (x, y) \tag{10.25a}$$

lub

$$(S^{-1}x, S^{-1}y) = \{x, y\}. \tag{10.25b}$$

Prosty dowód polega na rozwinięciu wektorów x i y względem bazy $\{\xi_i\}$

$$x = \sum_{i=1}^{n} a_i\xi_i, \quad y = \sum_{i=1}^{n} b_j\xi_j.$$

Korzystając z definicji (10.24) mamy

$$\{Sx, Sy\} = \sum_{i,j=1}^{n} a_i^* b_j \{S\xi_i, S\xi_j\} = \sum_{i,j=1}^{n} a_i^* b_j \{\eta_i, \eta_j\}.$$

Ponieważ wektory $\{\eta_i\}$ tworzą względem iloczynu $\{\ ,\ \}$ bazę ortonormalną, więc

$$\{Sx, Sy\} = \sum_{i,j=1}^{n} a_i^* b_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i = (x, y),$$

co jest niczym innym jak właśnie związkiem (10.25a), który chcieliśmy dowieść. Operator S jest właśnie tym operatorem, który jest nam potrzebny do przetransformowania wyjściowej reprezentacji.

Dla dowolnego $U \in G$ definiujemy

$$\tilde{D}(U) \equiv S^{-1}D(U)S.$$

Rozpatrzmy równanie

$$\big(\tilde{D}(U)x, \tilde{D}(U)y\big) = \big(S^{-1}D(U)Sx, S^{-1}D(U)Sy\big).$$

Na mocy (10.25b) mamy natychmiast

$$\big(\tilde{D}(U)x, \tilde{D}(U)y\big) = \{D(U)Sx, D(U)Sy\}.$$

Ale względem iloczynu $\{\ ,\ \}$ $D(U)$ jest unitarne, więc

$$\big(\tilde{D}(U)x, \tilde{D}(U)y\big) = \{Sx, Sy\}.$$

Wreszcie korzystając z (10.25a) mamy

$$\big(\tilde{D}(U)x, \tilde{D}(U)y\big) = (x, y),$$

co oznacza, że $\tilde{D}(U)$ jest reprezentacją unitarną względem zwykłego, wyjściowego iloczynu skalarnego.

Dzięki powyższemu twierdzeniu w naszych poszukiwaniach reprezentacji nieprzywiedlnych możemy się ograniczyć jedynie do macierzy unitarnych. Zauważmy również, że chociaż twierdzenie sformułowaliśmy dla grup skończonych, to fakt ten wykorzystaliśmy przy dowodzie w niewielkim tylko stopniu, a mianowicie w jednym tylko wzorze (10.21) pisząc sumę po wszystkich elementach U grupy G. Suma ta jest na pewno skończona, gdyż zawiera tylko skończoną liczbę składników. Dla wielu grup nieskończonych można przejść od dyskretnych sum do całek po parametrach ciągłych; dla grup ciągłych możliwość taka jest niemal oczywista. Jednakże sama możliwość zastąpienia sumy przez całkę nie wystarcza do rozszerzenia rozpatrywanego twierdzenia na grupy ciągłe, może się okazać, że całkowe sformułowanie wzoru (10.21) jest bezsensowne. Zachodzi to mianowicie wtedy, gdy całki rozciągają się na obszar nieskończony i nie są zbieżne. Tym niemniej istnieje wiele grup takich jak na przykład grupa obrotów, dla których ta nieprzyjemna sytuacja nie zachodzi, i wtedy twierdzenie 10.6 jest słuszne, a jego dowód przebiega niemal identycznie jak dla grup skończonych, z tą jedyną różnicą, że zamiast sum mamy we wzorach całki.

To że macierze reprezentacji są równoważne macierzom unitarnym, jest niezwykle mocnym rezultatem. Wynikają z niego dwa główne twierdzenia teorii reprezentacji, zwane pierwszym i drugim lematem Schura. Dowód tych dwóch ważnych twierdzeń w teorii grup opiera się na następującym lemacie nie opierającym się w żadnym stopniu na teorii grup.

L e m a t. Jeśli macierz M komutuje z unitarną macierzą U i jeśli zapiszemy $M = M_+ + iM_-$, gdzie $M_+ = (M+M^\dagger)/2$, a $M_- = (M-M^\dagger)/2i$, to zarówno M_+, jak i M_- komutują z U.

Dowód. Jeśli

$$UM = MU, \tag{10.26}$$

to

$$M^\dagger U^\dagger = U^\dagger M^\dagger.$$

Mnożąc z lewa przez U i korzystając z unitarności U dostajemy

$$UM^{\dagger}U^{\dagger} = UU^{\dagger}M^{\dagger} = M^{\dagger}.$$

Mnożąc jeszcze raz z prawej strony przez U otrzymujemy

$$UM^{\dagger}U^{\dagger}U = M^{\dagger}U.$$

Korzystając jeszcze raz z unitarności U mamy ostatecznie

$$UM^{\dagger} = M^{\dagger}U. \tag{10.27}$$

Z równań (10.26) i (10.27) natychmiast otrzymujemy

$$U\left[\frac{M+M^{\dagger}}{2}\right] = \left[\frac{M+M^{\dagger}}{2}\right]U, \tag{10.28a}$$

$$U\left[\frac{M-M^{\dagger}}{2i}\right] = \left[\frac{M-M^{\dagger}}{2i}\right]U \tag{10.28b}$$

lub też

$$UM_{+} = M_{+}U, \quad UM_{-} = M_{-}U,$$

co właśnie chcieliśmy wykazać.

Dysponując tym lematem możemy teraz udowodnić główny wynik tego paragrafu.

L e m a t S c h u r a. Jeśli $D(U)$ jest elementem nieprzywiedlnej reprezentacji grupy G i jeśli $D(U)M = MD(U)$ dla wszystkich $U \in G$, to M musi być wielokrotnością macierzy jednostkowej.

Dowód. Jeśli $MD(U) = D(U)M$ dla wszystkich $U \in G$ i jeśli napiszemy

$$M = M_{+} + iM_{-} \tag{10.29}$$

oraz skorzystamy z tego, że reprezentacja może być wzięta jako unitarna, to zgodnie z dopiero co udowodnionym lematem mamy

$$M_{+}D(U) = D(U)M_{+} \quad \text{oraz} \quad M_{-}D(U) = D(U)M_{-}$$

dla wszystkich $U \in G$. Operatory $M_{+} = (M+M^{\dagger})/2$ i $M_{-} = (M-M^{\dagger})/2i$ są oba samosprzężone, możemy dla nich sformułować zagadnienie własne. Zacznijmy od

$$M_{+}x_n^{(i)} = \lambda_n x_n^{(i)}, \quad i = 1, 2, \ldots, m_n,$$

gdzie m_n jest krotnością wartości własnej λ_n. Ponieważ M_{+} jest hermitowskie, więc zbiór wszystkich $x_n^{(i)}$ rozpina całą N-wymiarową przestrzeń reprezentacji. Dla wszystkich $U \in G$ mamy

$$D(U)M_{+}x_n^{(i)} = \lambda_n D(U)x_n^{(i)}.$$

Ale $[D(U), M_{+}] = 0$, więc jest to równoważne równaniu

$$M_{+}[D(U)x_n^{(i)}] = \lambda_n[D(U)x_n^{(i)}].$$

Ponieważ $D(U)x_n^{(i)}$ jest wektorem własnym macierzy M_{+} należącym do wartości własnej λ_n, to musi on być kombinacją liniową wektorów $x_n^{(i)}$, gdzie $i = 1, 2 \ldots, m_n$

$$D(U)x_n^{(i)} = \sum_{j=1}^{m_n} a_{ij}(U)x_n^{(j)} \tag{10.30}$$

dla wszystkich $U \in G$. Obliczmy elementy macierzy D w przestrzeni rozpiętej przez wektory własne M_+. Weźmy najpierw $n = 1$. Korzystając z wzoru (10.30) dostajemy

$$(x_1^{(l)}, D(U)x_1^{(i)}) = \sum_{j=1}^{m_1} a_{ij}(U)(x_1^{(l)}, x_1^{(j)}) = a_{il}(U), \quad i, l = 1, 2, \ldots, m_1 \tag{10.31a}$$

dla wszystkich $U \in G$. Dla dowolnego $n \neq 1$, z wzoru (10.30) odczytujemy bezpośrednio, że

$$(x_n^{(l)}, D(U)x_1^{(i)}) = 0; \quad l = 1, 2, \ldots, m_n, \quad i = 1, 2, \ldots, m_1 \tag{10.31b}$$

dla wszystkich $U \in G$, gdyż wektory własne należące do różnych wartości własnych operatora hermitowskiego są ortogonalne. Podobnie dla $n \neq 1$ mamy również z równania (10.30)

$$(x_1^{(l)}, D(U)x_n^{(i)}) = 0; \quad l = 1, 2, \ldots, m_1 \quad i = 1, 2, \ldots, m_n \tag{10.31c}$$

Równania (10.31a), (10.31b) i (10.31c) oznaczają, że macierz $D(U)$ ma następującą postać:

$$D(U) = \left(\begin{array}{c|c} m_1 \times m_1 & 0 \\ \hline 0 & (N - m_1) \times (N - m_1) \end{array}\right),$$

dla wszystkich $U \in G$, a N jest wymiarem reprezentacji. Macierz $m_1 \times m_1$ w lewym górnym rogu ma elementy określone przez $d_{ij}(U)$ zdefiniowane wzorem (10.30). Ale reprezentacja z założenia jest nieprzywiedlna, co jest niesprzeczne z powyższą postacią $D(U)$ jedynie wtedy, gdy $m_1 = N$, to znaczy jeśli krotność wartości własnej λ_1 jest równa N, tj. wymiarowi reprezentacji. Jedyną macierzą hermitowską mającą wartość własną o krotności równej wymiarowi macierzy jest macierz jednostkowa pomnożona przez rzeczywistą stałą, a zatem $M_+ = c_+ I$. Podobnie dowodzi się, że $M_- = c_- I$, a zatem z wzoru (10.29) przekonujemy się, że $M = (c_+ + ic_-)I$, co kończy dowód lematu Schura.

Z powyższego lematu wynika natychmiast następujący wniosek będący w istocie innym sformułowaniem tego lematu.

Wniosek. Jeśli istnieje macierz komutująca z wszystkimi elementami reprezentacji i macierz ta nie jest krotnością macierzy jednostkowej, to reprezentacja musi być przywiedlna.

W tym miejscu wydaje się celowe powiedzieć parę słów o bardziej abstrakcyjnym sposobie patrzenia na nieprzywiedlne reprezentacje, co może bardzo rozjaśnić sytuację a zarazem pozwoli streścić zawartość poprzednich stron w paru zaledwie słowach.

Uważne zastanowienie się nad treścią poprzedniego paragrafu przekona nas, że nieprzywiedlną reprezentację grupy G o rzędzie g możemy scharakteryzować w następujący abstrakcyjny sposób. Niech

$$\mathcal{G} = \{D(U_i), \quad i = 1, 2, \ldots, g\}$$

będzie grupą operatorów liniowych działających w n-wymiarowej przestrzeni wektorowej V i niech grupa ta będzie homomorfizmem grupy G. Oznacza to właśnie, że $\mathcal{G}$ jest reprezentacją G. Mówimy, że $\mathcal{G}$ jest reprezentacją nieprzywiedlną grupy G, jeśli nie istnieje właściwa podprzestrzeń przestrzeni V niezmiennicza (tzn. odwzorowywana w siebie)

pod działaniem wszystkich $D \in \mathscr{G}$. (Podprzestrzeń jest właściwa, jeśli nie jest równa całej przestrzeni.) Oczywiście może się zdarzyć, że istnieje właściwa podprzestrzeń przestrzeni V niezmiennicza ze względu na pewien podzbiór grupy $\mathscr{G}$, jeśli jednak mamy do czynienia z reprezentacją nieprzywiedlną, to pełna grupa $\mathscr{G}$ może pozostawiać niezmienniczą jedynie całą przestrzeń V. Oczywiście, jeśli weźmiemy pod uwagę jedną tylko macierz unitarną $D(U) \in \mathscr{G}$, to ma ona n podprzestrzeni niezmienniczych wyznaczonych przez n ortonormalnych wektorów własnych $D(U)$.

W świetle powyższych uwag pierwszy lemat Schura ma bardzo prostą interpretację. Jeśli istnieje macierz komutująca z $D(U)$ dla wszystkich $U \in G$, to liniowo niezależne wektory własne tej macierzy wyznaczają zbiór podprzestrzeni przestrzeni V niezmienniczych względem $D(U)$ dla wszystkich $U \in G$. Dla reprezentacji nieprzywiedlnej jedyną dopuszczalną podprzestrzenią niezmienniczą jest cała przestrzeń V, a jedyną macierzą, dla której każdy wektor w przestrzeni V jest wektorem własnym, jest macierz jednostkowa lub jej wielokrotność.

Prostą, ale bardzo ważną konsekwencją pierwszego lematu Schura jest fakt, że grupa abelowa może mieć tylko jednowymiarowe reprezentacje nieprzywiedlne! Wynika to natychmiast ze stwierdzenia, że dla grupy abelowej G każdy element $D(U)$, gdzie $U \in G$, komutuje ze wszystkimi elementami reprezentacji D. A zatem na mocy lematu Schura, dla wszystkich $U \in G$ zachodzi

$$D(U) = C(U)I,$$

gdzie $C(U)$ jest stałą, która może zależeć od U. Ale macierz jednostkowa jest nieprzywiedlna tylko wtedy, gdy jest jednowymiarowa. A zatem dla grup abelowych wszystkie reprezentacje nieprzywiedlne muszą być jednowymiarowe.

Drugi lemat Schura jest nieco podobny do pierwszego, ale dotyczy dwóch różnych reprezentacji.

Lemat. Niech $D(U)$ i $D'(U)$ będą reprezentacjami nieprzywiedlnymi. Jeśli dla wszystkich $U \in G$ zachodzi $D(U)M = MD'(U)$, to albo D i D' są równoważne, albo jeśli nie są, to $M = 0$.

Dowód. W ogólnym przypadku D i D' mogą mieć różne wymiary, a zatem M nie musi być macierzą kwadratową. Jeśli D ma wymiar $n \times n$, a D' wymiar $m \times m$, to M musi mieć wymiar $n \times m$. Dowód zaczyna się podobnie jak dla pierwszego lematu. Podobnie jak poprzednio równość

$$D(U)M = MD'(U) \tag{10.32}$$

dla wszystkich $U \in G$ implikuje, że

$$M^\dagger D^\dagger(U) = D'^\dagger(U) M^\dagger$$

dla wszystkich $U \in G$, gdzie $M^\dagger$ jest macierzą $m \times n$ zdefiniowaną przez elementy macierzowe w sposób następujący: $(M^\dagger)_{ij} = M^*_{ji}$. Przyjmując że $D(U)$ jest unitarne, możemy napisać

$$M^\dagger D(U^{-1}) = D'(U^{-1}) M^\dagger. \tag{10.33}$$

Mnożąc powyższe równanie z lewa przez M dostajemy

$$MM^\dagger D(U^{-1}) = MD'(U^{-1}) M^\dagger. \tag{10.34}$$

Ale na mocy równości (10.32) mamy

$$MD'(U^{-1})M^\dagger = D(U^{-1})MM^\dagger,$$

a zatem (10.34) staje się

$$MM^\dagger D(U^{-1}) = D(U^{-1})MM^\dagger$$

dla wszystkich $U \in G$. Poprzedni lemat (i jedyność odwrotności) mówi nam natychmiast, że

$$MM^\dagger = cI.$$

Pozostawiamy czytelnikowi do sprawdzenia, że w podobny sposób (zaczynając jednak od pomnożenia równości (10.33) z prawa przez M) można dowieść, że

$$M^\dagger M = cI.$$

Należy zauważyć, że macierze $MM^\dagger$ i $M^\dagger M$ mają na ogół różne wymiary, pierwsza $n \times n$, a druga $m \times m$.

Rozpatrzmy teraz oddzielnie 3 przypadki:

1) $m = n$. Jeśli w tym przypadku $c = 0$, to $MM^\dagger = 0$, co oznacza, że dla wszystkich i

$$(MM^\dagger)_{ii} = 0 = \sum_{j=1}^{n} M_{ij}(M^\dagger)_{ji} = \sum_{j=1}^{n} |M_{ij}|^2,$$

a zatem dla wszystkich i

$$\sum_{j=1}^{n} |M_{ij}|^2 = 0,$$

co oznacza, że $M_{ij} = 0$ dla wszystkich i i j, a zatem że $M = 0$. (Nieco mocniejszy rezultat znaleźć można w zadaniu 3.14.) Jeśli teraz $c \neq 0$, to

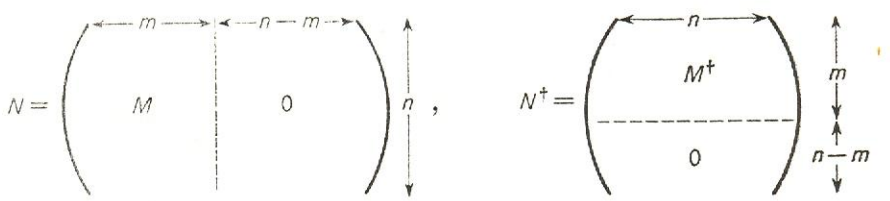
$$\det(MM^\dagger) \neq 0,$$

a zatem $\det M \neq 0$ i M ma macierz odwrotną. Zgodnie z równością (10.32) będzie więc

$$D(U) = MD'(U)M^{-1}$$

dla wszystkich $U \in G$, a zatem D i D' są w tym wypadku reprezentacjami równoważnymi.

2) $n > m$. W tym przypadku uzupełniamy macierz M do macierzy kwadratowej przez dopisanie $n-m$ kolumn złożonych z samych zer. Nazywając tę nową macierz N, mamy



Jest jasne, że zachodzi $MM^\dagger = NN^\dagger$, a zatem $MM^\dagger = cI$ implikuje $NN^\dagger = cI$. Ale

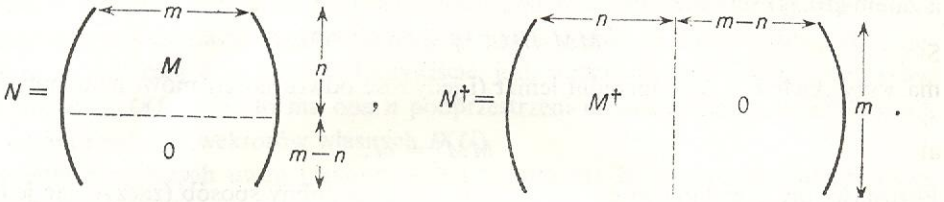
$$\det(NN^\dagger) = c^n = (\det N)(\det N^\dagger);$$

z postaci macierzy N jest jednak oczywiste, że $\det N = 0$, a zatem stała c musi znikać. A więc

$$NN^\dagger = 0 = MM^\dagger;$$

i podobnie jak w przypadku (1) stwierdzamy, że $M = 0$.

3) $m > n$. W tym przypadku musimy dodać $m-n$ wierszy złożonych z samych zer. Otrzymujemy znów macierz kwadratową, którą oznaczymy również literą N



W tym przypadku $NN^\dagger \neq MM^\dagger$, ale mamy za to $N^\dagger N = M^\dagger M$. Zamiast z relacji $MM^\dagger = cI$ można skorzystać z relacji $M^\dagger M = cI$ i widzimy, że nowa macierz N spełnia

$$N^\dagger N = cI;$$

i podobnie jak w przypadku (1) dochodzimy do wniosku, że $N = 0$. Oznacza to, że macierz $M = 0$ i dowód lematu jest zakończony.

Zauważmy, że przy dowodzie powyższych lematów nie odwoływaliśmy się nigdzie do liczby elementów grupy G. A zatem lematy te są słuszne dla dowolnych, skończenie wymiarowych reprezentacji unitarnych. Oczywiście twierdzenie 10.6 mówi nam, że dla grup skończonych reprezentacje można zawsze wybrać jako unitarne. Ale dwa lematy Schura obowiązują również w tych ważnych przypadkach grup nieskończonych, które mają skończenie wymiarowe reprezentacje unitarne.

Powodem, dla którego lematy powyższe są tak bardzo ważne, jest to, że bardzo często jest dość łatwo znaleźć macierz M spełniającą założenia lematu. Macierze takie dostarczają nam wtedy olbrzymią ilość informacji o reprezentacjach nieprzywiedlnych i ich charakterach. Prostym przykładem macierzy spełniającej założenia pierwszego lematu Schura jest następująca macierz

$$M_i^{(\nu)} = \sum_{U \in \mathscr{C}_i} D^{(\nu)}(U). \tag{10.35}$$

$M_i^{(\nu)}$ jest sumą wszystkich macierzy reprezentujących elementy klasy $\mathscr{C}_i$ w ν-tej reprezentacji nieprzywiedlnej. Niech U' będzie dowolnym elementem grupy G i rozpatrzmy wielkość

$$D^{(\nu)}(U')M_i^{(\nu)}D^{(\nu)}(U')^{-1}.$$

Mamy

$$D^{(\nu)}(U')M_i^{(\nu)}D^{(\nu)}(U')^{-1} = \sum_{U \in \mathscr{C}_i} D^{(\nu)}(U')D^{(\nu)}(U)D^{(\nu)}(U'^{-1}) = \sum_{U \in \mathscr{C}_i} D^{(\nu)}(U'UU'^{-1}).$$

Ale na mocy definicji klasy, jeśli $U \in \mathscr{C}_i$, to również $U'UU'^{-1} \in \mathscr{C}_i$. Ponieważ transformacja podobieństwa jedynie zmienia uporządkowanie elementów klasy $\mathscr{C}_i$, a więc z poprzedniej równości dostajemy

$$D^{(\nu)}(U')M_i^{(\nu)}D^{(\nu)}(U')^{-1} = \sum_{\tilde{U} \in \mathscr{C}_i} D^{(\nu)}(\tilde{U}) = M_i^{(\nu)}.$$

A zatem dla wszystkich $U' \in G$ mamy

$$D^{(\nu)}(U')M_i^{(\nu)} = M_i^{(\nu)}D^{(\nu)}(U'),$$

czyli macierz $M_i^{(\nu)}$ spełnia założenia pierwszego lematu Schura. Skoro tak, to na mocy tego lematu mamy

$$M_i^{(\nu)} = c_i^{(\nu)} I.$$

Stałą $c_i^{(\nu)}$ można łatwo obliczyć. Oznaczając wymiar reprezentacji o indeksie ν literą n_ν mamy

$$\mathrm{tr} M_i^{(\nu)} = c_i^{(\nu)} n_\nu, \tag{10.36}$$

ale

$$\mathrm{tr} M_i^{(\nu)} = \sum_{U \in \mathscr{C}_i} \mathrm{tr} D^{(\nu)}(U) = \sum_{U \in \mathscr{C}_i} \chi^{(\nu)}(U).$$

Ślady wszystkich macierzy reprezentujących elementy jednej klasy są, jak to stwierdziliśmy przy końcu poprzedniego paragrafu, sobie równe. Stosując wprowadzoną tam notację możemy napisać

$$\mathrm{tr} M_i^{(\nu)} = g_i \chi_i^{(\nu)}, \tag{10.37}$$

gdzie g_i jest liczbą elementów w klasie $\mathscr{C}_i$. Łącząc równości (10.36) i (10.37) otrzymujemy

$$c_i^{(\nu)} = \frac{g_i}{n_\nu} \chi_i^{(\nu)},$$

a zatem

$$M_i^{(\nu)} = \frac{g_i}{n_\nu} \chi_i^{(\nu)} I \tag{10.38}$$

to znaczy, suma macierzy reprezentujących elementy danej klasy jest wielokrotnością macierzy jednostkowej. Będziemy niedługo mieli okazję skorzystać z tego wyniku.

Bardziej owocnym przykładem macierzy spełniającej również wszystkie założenia lematów Schura jest następująca macierz

$$M = \sum_{U \in G} D^{(\nu)}(U) X D^{(\mu)}(U^{-1}) = \sum_{U \in G} D^{(\nu)}(U) X D^{(\mu)}(U)^{-1},$$

gdzie $D^{(\nu)}$ i $D^{(\mu)}$ są reprezentacjami nieprzywiedlnymi, a X jest dowolną macierzą, od której wymagamy jedynie, by napisane wyrażenie miało w ogóle sens (by miała ona n_ν wierszy i n_μ kolumn). Mnożąc powyższe wyrażenie z lewej przez $D^{(\nu)}(U')$, a z prawej przez $D^{(\mu)}(U')^{-1}$ dostajemy

$$D^{(\nu)}(U') M D^{(\mu)}(U')^{-1} = \sum_{U \in G} D^{(\nu)}(U') D^{(\nu)}(U) X D^{(\mu)}(U)^{-1} D^{(\mu)}(U')^{-1} =$$

$$= \sum_{U \in G} D^{(\nu)}(U'U) X D^{(\mu)}(U^{-1} U'^{-1}).$$

Wprowadzając oznaczenie $\tilde{U} = U'U$ i pamiętając, że $\tilde{U}^{-1} = U^{-1} U'^{-1}$, mamy

$$D^{(\nu)}(U') M D^{(\mu)}(U')^{-1} = \sum_{U \in G} D^{(\nu)}(\tilde{U}) X D^{(\mu)}(\tilde{U})^{-1}. \tag{10.39}$$

Jeśli jednak U przebiega wszystkie elementy grupy, to również $\tilde{U} = U'U$ przyjmuje wszystkie wartości, tyle że w innej na ogół kolejności. A zatem prawa strona równości (10.39) jest po prostu równa M i zachodzi

$$D^{(\nu)}(U') M M = M D^{(\mu)}(U') \tag{10.40}$$

dla wszystkich $U' \in G$. Zakładając, że $D^{(\nu)}$ nie jest równoważne $D^{(\mu)}$ (w tym przypadku gdy $n_\nu = n_\mu$), mamy na mocy lematów Schura

$$M = c(X) I \delta_{\nu\mu}.$$

Innymi słowy $M = 0$, jeśli reprezentacje mają różne wymiary (drugi lemat Schura) oraz $M = cI$, jeśli mają ten sam wymiar (pierwszy lemat Schura). Wartość stałej zależy oczywiście od wyboru macierzy X. Dostajemy więc wynik

$$\sum_{U \in G} D^{(\nu)}(U) X D^{(\mu)}(U)^{-1} = c(X) I \delta_{\mu\nu}. \tag{10.41}$$

Jeśli $D^{(\nu)}$ i $D^{(\mu)}$ są unitarne, to można ten wynik zapisać również w postaci następującej

$$\sum_{U \in G} D^{(\nu)}(U) X D^{(\mu)\dagger}(U) = c(X) I \delta_{\mu\nu}. \tag{10.42}$$

Aby praktycznie wykorzystać tę równość, zapiszmy ją najpierw przy pomocy elementów macierzowych

$$\sum_{U \in G} \sum_{i', l'} D^{(\nu)}_{ii'}(U) X_{i'l'} [D^{(\mu)\dagger}(U)]_{l'l} = c(X) \delta_{il} \delta_{\mu\nu}.$$

Przypuśćmy teraz, że wybraliśmy macierz X tak, by wszystkie jej elementy, z wyjątkiem elementu jk, były również zero. Oznaczając odpowiadającą tej macierzy stałą $c(X)$ symbolem c_{jk} mamy

$$\sum_{U \in G} D^{(\nu)}_{ij}(U) [D^{(\mu)\dagger}(U)]_{kl} = c_{jk} \delta_{il} \delta_{\mu\nu}. \tag{10.43}$$

Ponieważ zgodnie z definicją macierzy sprzężonej

$$(A^\dagger)_{kl} = A^*_{lk},$$

więc wzór (10.43) przyjmuje ostatecznie postać

$$\sum_{U \in G} D^{(\mu)*}_{lk}(U) D^{(\nu)}_{ij}(U) = c_{jk} \delta_{il} \delta_{\mu\nu} \tag{10.44}$$

dla wszystkich i, j, k, l, μ oraz ν.

Pozostaje nam jeszcze wyznaczyć c_{jk}. W tym celu kładziemy $\mu = \nu$, $l = i$ oraz sumujemy po i. Dostajemy

$$\sum_{U \in G} \sum_{i} D^{(\nu)*}_{ik}(U) D^{(\nu)}_{ij}(U) = c_{jk} \sum_{i} \delta_{ii} = c_{jk} n_\nu.$$

Ponieważ jednak $D^{(\nu)}$ jest macierzą unitarną, to suma po i w lewej stronie powyższej równości równa się po prostu δ_{kj}. Stąd

$$c_{jk} n_\nu = \sum_{U \in G} \delta_{jk} = g \delta_{jk},$$

gdzie g jest rzędem grupy, a zatem

$$c_{jk} = \frac{g}{n_\nu} \delta_{jk}.$$

Wstawiając powyższy wynik do wzoru (10.44) otrzymujemy godne uwagi związki ortogonalności

$$\sum_{U\in G} D^{(\mu)*}_{lk}(U) D^{(\nu)}_{ij}(U) = \frac{g}{n_\nu} \delta_{jk}\delta_{il}\delta_{\mu\nu} \tag{10.45}$$

dla wszystkich i, j, k, l, μ oraz ν.

Zastanówmy się teraz, co to po prostu znaczy. Suma po lewej stronie równości (10.45) przypomina bardzo iloczyn skalarny dwóch wektorów z tą tylko różnicą, że sumowanie przebiega po elementach grupy, a nie po konwencjonalnym wskaźniku. Nie ma jednak reguły zabraniającej numerowania składowych wektora przez elementy grupy. Tak patrząc, możemy powiedzieć, że równość (10.45) wyraża związki ortogonalności dla iloczynu skalarnego dwóch g-wymiarowych wektorów, z których każdy numerowany jest trzema wskaźnikami. Równość (10.45) mówi, że jeśli dla dowolnej reprezentacji wybierzemy element ij macierzy tworzących daną reprezentację, to otrzymamy g-wymiarowy wektor ortogonalny do g-wymiarowego wektora otrzymanego przez wybór innego elementu macierzy, np. $i'j'$, i również ortogonalny do dowolnego wektora utworzonego w ten sam sposób dla dowolnej innej reprezentacji. A zatem w g-wymiarowej przestrzeni mamy $n_1^2+n_2^2+\ldots+n_N^2$ ortogonalnych wektorów, gdzie N jest liczbą nierównoważnych reprezentacji nieprzywiedlnych. Ponieważ liczba wektorów ortogonalnych w przestrzeni g-wymiarowej nie może przewyższać g, przeto musimy mieć nierówność

$$\sum_{\nu=1}^{N} n_\nu^2 \leqslant g. \tag{10.46}$$

Dochodzimy więc do ważnego wniosku, że grupa skończona może mieć tylko skończoną liczbę nierównoważnych reprezentacji nieprzywiedlnych, przy czym wymiar żadnej z nich nie może przekroczyć $\sqrt{g}$.

Na podstawie równości (10.45) nietrudno otrzymać związki ortogonalności dla charakterów reprezentacji. Jeśli w równości (10.45) położymy $k = l$ i przesumujemy po l, to otrzymamy

$$\sum_{U\in G}\sum_{l=1}^{n_\mu} D^{(\mu)*}_{ll}(U) D^{(\nu)}_{ij}(U) = \frac{g}{n_\nu}\delta_{\mu\nu}\sum_{l=1}^{n_\mu}\delta_{il}\delta_{lj} = \frac{g}{n_\nu}\delta_{\mu\nu}\delta_{ij}.$$

Ale

$$\sum_{l} D^{(\mu)*}_{ll}(U) = \operatorname{tr} D^{(\mu)*}(U) = \chi^{(\mu)*}(U), \tag{10.47}$$

więc

$$\sum_{U\in G} \chi^{(\mu)*}(U) D^{(\nu)}_{ij}(U) = \frac{g}{n_\nu}\delta_{\mu\nu}\delta_{ij}.$$

Kładąc na koniec $i = j$ i sumując po j, otrzymujemy

$$\sum_{U\in G} \chi^{(\mu)*}(U) \sum_{j=1}^{n_\nu} D^{(\nu)}_{jj}(U) = \frac{g}{n_\nu}\delta_{\mu\nu}\sum_{j=1}^{n_\nu}\delta_{jj} = g\delta_{\mu\nu}.$$

Korzystając jeszcze raz z równości (10.47) dochodzimy do następującego związku

$$\sum_{U\in G} \chi^{(\mu)*}(U)\chi^{(\nu)}(U) = g\delta_{\mu\nu}. \tag{10.48}$$

Ponieważ wszystkie elementy należące do tej samej klasy mają równe charaktery, więc możemy sumę po elementach grupy U występującą w równości (10.48) przekształcić w sumę po klasach. Oznaczając przez g_i liczbę członków klasy $\mathscr{C}_i$ i przyjmując, że liczba klas wynosi k mamy

$$\sum_{i=1}^{k} g_i \chi_i^{(\mu)*} \chi_i^{(\nu)} = g\delta_{\mu\nu}. \tag{10.49}$$

Równość (10.49) mówi, że N nierównoważnych nieprzywiedlnych reprezentacji wyznacza za pośrednictwem charakterów klas N ortogonalnych k-wymiarowych wektorów. Ponieważ w przestrzeni k-wymiarowej nie może być więcej niż k wektorów ortogonalnych, dochodzimy więc do nierówności

$$N \leqslant k. \tag{10.50}$$

W przypadku grup abelowych nierówności (10.50) i (10.46) sprowadzają się w istocie do tego samego. Istotnie, grupy abelowe mają tylko reprezentacje jednowymiarowe, a zatem

$$\sum_{\nu=1}^{N} n_\nu^2 = \sum_{\nu=1}^{N} 1 = N.$$

A więc nierówność (10.46) przyjmuje postać

$$N \leqslant g.$$

Z drugiej strony dla grup abelowych każdy element tworzy odrębną klasę. Tak więc $k = g$ i nierówność (10.50) przybiera postać

$$N \leqslant g.$$

Przekonujemy się więc, że zarówno (10.46), jak i (10.50) prowadzą w przypadku grup abelowych do identycznych nierówności.

Warto zauważyć, że przy wyprowadzeniu związków ortogonalności (10.45) i (10.49) występowały często sumy po elementach grupy. Jednakże, jak już wspominaliśmy, istnieją ważne przypadki grup nieskończonych, dla których sumowanie może być zastąpione całkowaniem. Ponadto dla niektórych grup całki po całej grupie będą zbieżne i wtedy dowody podane w tym paragrafie mogą być bez niemal żadnych zmian rozszerzone na te grupy nieskończone. Jako prosty przykład rozpatrzmy krótko grupę obrotów wokół osi z. Wyznaczyliśmy już poprzednio reprezentacje jednowymiarowe tej grupy

$$D^{(m)}(\alpha) = e^{im\alpha}. \tag{10.51}$$

Logicznym kandydatem na zmienną całkowania dla tej grupy jest oczywiście kąt α z elementem infinitezymalnym $d\alpha$. Oczekujemy, że $\sum_{U \in G}$ należy zastąpić teraz przez $\int_0^{2\pi} d\alpha$. W szczególności ponieważ

$$g = \sum_{U \in G} 1,$$

więc oczekujemy, że g zastąpione będzie w tym wypadku przez

$$\int_0^{2\pi} 1 \, d\alpha = 2\pi.$$

Dla grup ciągłych wielkość tego typu zastępującą g nazywamy objętością grupy. Zgodnie z powyższymi przypuszczeniami, oczekiwalibyśmy, że wzór (10.45) przyjmie postać

$$\int_0^{2\pi} D^{(m)*}(\alpha) D^{(n)}(\alpha) d\alpha = 2\pi\delta_{mn}, \tag{10.52}$$

gdyż wymiar każdej reprezentacji równa się 1. Widzimy, że dla $D^{(m)}(\alpha)$ danych wyrażeniem (10.51) równość (10.52) jest istotnie spełniona. Podobne rozważania można zastosować do innych grup ciągłych, takich jak grupa obrotów i grupy unitarne. Istnieją jednak przypadki, kiedy takie proste rozszerzenie wyników teorii grup skończonych jest niemożliwe — najważniejszym z nich, z fizycznego punktu widzenia, jest grupa Lorentza.

10.7. WYZNACZANIE REPREZENTACJI GRUP

W tym paragrafie chcemy pokazać, jak wielkie twierdzenia udowodnione dotychczas pozwalają rozwiązywać praktycznie problem wyznaczenia reprezentacji grup. Przy okazji uda nam się na tyle uzupełnić związki ortogonalności, wyprowadzone w ostatnim paragrafie, że przejdą one w relacje zupełności.

Po pierwsze zauważmy, że charaktery reprezentacji D, która nie jest nieprzywiedlna, mogą być prosto wyrażone przez charaktery reprezentacji nieprzywiedlnych. Jeśli zapiszemy D w postaci (10.19), co można zawsze uzyskać przy pomocy transformacji podobieństwa, to charakter χ_i danej klasy będzie równy

$$\chi_i = a^{(1)}\chi_i^{(1)} + a^{(2)}\chi_i^{(2)} + \ldots + a^{(N)}\chi_i^{(N)} \equiv \sum_{\nu=1}^{N} a^{(\nu)}\chi_i^{(\nu)}. \tag{10.53}$$

Wynika to bezpośrednio z definicji charakteru jako śladu macierzy reprezentacji. Wielkości $a^{(\nu)}$ są po prostu liczbami wskazującymi, ile razy ν-ta reprezentacja nieprzywiedlna występuje w rozkładzie macierzy D danym wzorem (10.20). Mnożąc równość (10.53) obustronnie przez $g_i\chi_i^{(\mu)*}$, sumując po i oraz korzystając ze związków ortogonalności (10.49) dostajemy

$$\sum_{i=1}^{k} g_i \chi_i^{(\mu)*}\chi_i = \sum_{\nu=1}^{N} a^{(\nu)} \sum_{i=1}^{k} g_i\chi_i^{(\mu)*}\chi_i^{(\nu)} = \sum_{\nu=1}^{N} g a^{(\nu)}\delta_{\mu\nu} = g a^{(\mu)}.$$

Stąd

$$a^{(\mu)} = \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{k} g_i \chi_i^{(\mu)*}\chi_i, \tag{10.54}$$

a zatem krotność występowania danej reprezentacji nieprzywiedlnej w dowolnej reprezentacji może być natychmiast wyznaczona, jeśli znamy charaktery tych reprezentacji.

Jeśli więc dwie reprezentacje mają te same charaktery, to muszą one być równoważne, gdyż obie będą charakteryzowane tymi samymi liczbami $a^{(\mu)}$.

Zastosujmy wzory (10.53) i (10.54) przykładowo do reprezentacji regularnej omawianej w paragrafie 10.5. Przykład ten doprowadzi do paru użytecznych wyników. Łatwo jest określić charaktery reprezentacji regularnej. Ponieważ wymiar tej reprezentacji wynosi g (liczba elementów grupy G), to charakter χ_1 klasy złożonej z identyczności równa się śladowi g-wymiarowej macierzy jednostkowej

$$\chi_1 = g. \tag{10.55}$$

Wszystkie pozostałe charaktery znikają, gdyż macierze reprezentujące inne elementy mają na przekątnej same zera (mówiliśmy o tym w paragrafie 10.5), a zatem

$$\chi_i = 0, \quad i \neq 1. \tag{10.56}$$

A więc dla $i = 1$, wzór (10.53) daje

$$g = \sum_{\nu=1}^{N} a^{(\nu)} \chi_1^{(\nu)}.$$

Ale w dowolnej reprezentacji o wymiarze n_ν charakter klasy identyczności jako ślad macierzy jednostkowej n_ν-wymiarowej wynosi po prostu n_ν, a zatem

$$g = \sum_{\nu=1}^{N} a^{(\nu)} n_\nu. \tag{10.57}$$

Z drugiej jednak strony, korzystając z (10.55) i (10.56) oraz z faktu, że $g_1 = 1$, możemy z równości (10.54) otrzymać związek

$$a^{(\mu)} = \frac{1}{g} g_1 \chi_1^{(\mu)*} \chi_1 = \chi_1^{(\mu)*} = n_\mu. \tag{10.58}$$

Po wstawieniu do (10.57) daje nam to

$$g = \sum_{\nu=1}^{N} n_\nu^2. \tag{10.59}$$

Równość (10.58) mówi nam, że w reprezentacji regularnej każda reprezentacja nieprzywiedlna występuje dokładnie tyle razy, ile wynosi jej wymiar. Związek (10.59) jest dużo mocniejszy od nierówności (10.46). Mówi on nam, że $D_{ij}^{(\nu)}(U)$ stanowią dokładnie g ortogonalnych wektorów (ponieważ $\Sigma n_\nu^2 = g$) w g-wymiarowej przestrzeni wektorowej generowanej przez g elementów grupy za pośrednictwem ich reprezentacji nieprzywiedlnych. A zatem $D_{ij}^{(\nu)}(U)$ tworzą zupełny układ wektorów w tej przestrzeni, gdzie $U \in G$. Normalizując w sposób wymagany przez relację (10.45) możemy powiedzieć, że „wektory reprezentacji", których składowymi w ilości g są liczby

$$\sqrt{\frac{n_\nu}{g}} D_{ij}^{(\nu)}(U_1), \quad \sqrt{\frac{n_\nu}{g}} D_{ij}^{(\nu)}(U_2), \quad \ldots, \sqrt{\frac{n_\nu}{g}} D_{ij}^{(\nu)}(U_g), \tag{10.60}$$

tworzą dla $\nu = 1, 2, \ldots, N$; $i, j = 1, 2, \ldots, n$ zupełny ortonormalny zbiór w g-wymiarowej zespolonej przestrzeni wektorowej. Stosując dość zawikłaną, ale niezbędną notację, możemy tę własność zupełności zapisać w postaci

$$\sum_{\nu=1}^{N} \sum_{i=1}^{n_\nu} \sum_{j=1}^{n_\nu} \sqrt{\frac{n_\nu}{g}} D_{ij}^{(\nu)}(U) \sqrt{\frac{n_\nu}{g}} D_{ij}^{(\nu)*}(U') = \delta_{UU'},$$

gdzie $\delta_{UU'}$ jest deltą Kroneckera równą 1 dla $U = U'$ i zero w przeciwnym wypadku. Nieco prościej relację tę można zapisać

$$\sum_{\nu=1}^{N} \sum_{i=1}^{n_\nu} \sum_{j=1}^{n_\nu} \frac{n_\nu}{g} D_{ij}^{(\nu)}(U) D_{ij}^{(\nu)*}(U') = \delta_{UU'}. \tag{10.61}$$

Uzupełniwszy w ten sposób relacje ortogonalności dla reprezentacji D dochodzimy do naturalnego przypuszczenia, że podobne uzupełnienie jest również możliwe dla charakterów. Aby się przekonać, że tak rzeczywiście jest, zsumujmy obie strony równości (10.61) po wszystkich $U \in \mathscr{C}_l$ i $U' \in C_m$. Dostajemy

$$\sum_{\nu=1}^{N} \sum_{i=1}^{n_\nu} \sum_{j=1}^{n_\nu} n_\nu \Big(\sum_{U \in \mathscr{C}_l} D_{ij}^{(\nu)}(U) \Big) \Big(\sum_{U' \in \mathscr{C}_m} D_{ij}^{(\nu)*}(U') \Big) = g \sum_{U \in \mathscr{C}_l} \sum_{U' \in \mathscr{C}_m} \delta_{UU'} \Big). \tag{10.62}$$

Prawa strona w powyższej równości nie znika tylko dla $\mathscr{C}_l = \mathscr{C}_m$, gdyż inaczej zawsze $U \neq U'$. Jeśli $\mathscr{C}_l = \mathscr{C}_m$, to każdy człon, dla którego $U = U'$, wniesie wkład do sumy równy 1, a każdy inny człon da wkład równy zeru. Takich członów wnoszących niezerowe wkłady jest g_l, tj. tyle, ile elementów wchodzi do klasy $\mathscr{C}_l$. A zatem dla $\mathscr{C}_l = \mathscr{C}_m$ prawa strona równa się gg_l. Ale zgodnie z definicją (10.35)

$$\sum_{U \in \mathscr{C}_l} D^{(\nu)}(U) = M_l^{(\nu)}.$$

a zatem równość (10.62) przechodzi w

$$\sum_{\nu=1}^{N} \sum_{i=1}^{n_\nu} \sum_{j=1}^{n_\nu} n_\nu [M_l^{(\nu)}]_{ij} [M_m^{(\nu)}]_{ij} = g g_l \delta_{lm}. \tag{10.63}$$

A zatem na mocy wzoru (10.38)

$$[M_l^{(\nu)}]_{ij} = \frac{g_l}{n_\nu} \chi_l^{(\nu)} \delta_{ij}, \qquad [M_m^{(\nu)}]_{ij} = \frac{g_m}{n_\nu} \chi_m^{(\nu)} \delta_{ij},$$

a zatem (10.63) sprowadza się do następującej postaci

$$\sum_{\nu=1}^{N} \sum_{i=1}^{n_\nu} \sum_{j=1}^{n_\nu} \frac{1}{n_\nu} \chi_l^{(\nu)} \chi_m^{(\nu)*} \delta_{ij} = \frac{g}{g_m} \delta_{lm},$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że $\delta_{ij}^2 = \delta_{ij}$. Wykonując sumowanie po i oraz j dostajemy ostatecznie

$$\sum_{\nu=1}^{N} \chi_l^{(\nu)} \chi_m^{(\nu)*} = \frac{g}{g_m} \delta_{lm}. \tag{10.64}$$

Jeśli więc N stałych otrzymanych z charakterów l-tej klasy w każdej spośród N nieprzywiedlnych reprezentacji potraktujemy jako składowe wektora N-wymiarowej przestrzeni, to związek (10.64) mówi, że wektor ten jest ortogonalny do innego wektora otrzymanego w podobny sposób dla m-tej klasy. Mamy więc k ortogonalnych wektorów w N wymiarowej przestrzeni, dochodzimy zatem do wniosku, że

$$k \leqslant N.$$

Porównując to z nierównością (10.50) dostajemy

$$k = N. \tag{10.65}$$

A zatem liczba nieprzywiedlnych reprezentacji jest równa liczbie klas w grupie! Zestawiając związki (10.49) i (10.64) możemy powiedzieć, że „wektory charakterów", których elementami w liczbie k są

$$\sqrt{\frac{g_1}{g}} \chi_1^{(\nu)}, \quad \sqrt{\frac{g_2}{g}} \chi_2^{(\nu)}, \ldots, \quad \sqrt{\frac{g_k}{g}} \chi_k^{(\nu)}, \tag{10.66}$$

tworzą dla $\nu = 1, 2, \ldots, N$ zupełny ortonormalny zbiór w przestrzeni k-wymiarowej. Zestawmy teraz nasze główne wyniki w ich ostatecznej postaci:

a) $$\sum_{\nu=1}^{N} n_\nu^2 = g, \tag{10.59}$$

b) $$k = N, \tag{10.65}$$

c) $$\sum_{U \in G} \sqrt{\frac{n_\mu}{g}}\, D_{lk}^{(\mu)*}(U) \sqrt{\frac{n_\nu}{g}}\, D_{ij}^{(\nu)}(U) = \delta_{il}\delta_{kj}\delta_{\mu\nu}, \tag{10.45}$$

d) $$\sum_{\nu=1}^{N} \sum_{i=1}^{n_\nu} \sum_{j=1}^{n_\nu} \sqrt{\frac{n_\nu}{g}}\, D_{ij}^{(\nu)}(U) \sqrt{\frac{n_\nu}{g}}\, D_{ij}^{(\nu)*}(U') = \delta_{UU'}, \tag{10.61}$$

e) $$\sum_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{g_i}{g}}\, \chi_i^{(\mu)*} \sqrt{\frac{g_i}{g}}\, \chi_i^{(\nu)} = \delta_{\mu\nu}, \tag{10.49}$$

f) $$\sum_{\nu=1}^{N} \sqrt{\frac{g_i}{g}}\, \chi_i^{(\nu)} \sqrt{\frac{g_j}{g}}\, \chi_j^{(\nu)*} = \delta_{ij}. \tag{10.64}$$

W powyższych wzorach g oznacza rząd grupy, g_i liczbę elementów i-tej klasy, k liczbę klas, N liczbę nieprzywiedlnych reprezentacji, a n_ν wymiar ν-tej reprezentacji.

Dysponując takim arsenałem związków możemy łatwo wyznaczyć charaktery i reprezentacje podstawowych grup skończonych. Zacznijmy od najprostszej grupy, a mianowicie jednoelementowej grupy złożonej z samego elementu jednostkowego. Ponieważ jest tylko jedna klasa, to będzie też tylko jedna reprezentacja o wymiarze jeden. Problem jest więc rozwiązany

$$D^{(1)}(e) = 1.$$

Rozpatrzmy teraz grupę dwuelementową $\{e, a\}$. Klasami są

$$\mathscr{C}_1 = e, \quad \mathscr{C}_2 = a,$$

a więc będą dwie reprezentacje. Ponieważ grupa jest abelowa, to muszą być one jednowymiarowe. Zgadza się to oczywiście z warunkiem

$$\sum_{\nu=1}^{2} n_\nu^2 = 2,$$

gdyż tak n_1, jak i n_2 równają się 1. Dla reprezentacji jednowymiarowych charaktery reprezentacji pokrywają się z samymi reprezentacjami, skupimy więc naszą uwagę na charakterach. Celowe jest sporządzić następującą tabelkę:

ν \ i	1	2
1	1	α
2	1	β

(10.67)

gdzie i numeruje klasy, a ν reprezentacje. Element $i\nu$ w tej tabelce równa się po prostu $\chi_i^{(\nu)}$. Ponieważ charakter klasy identyczności równa się wymiarowi reprezentacji, pierwszą

kolumnę tej tabelki zapełniliśmy jedynkami zgodnie z tym faktem (w dalszym ciągu klasę identyczności będziemy zawsze oznaczali wskaźnikiem $i = 1$). Ponieważ w przypadku reprezentacji jednowymiarowych charaktery są równe macierzom reprezentacji, to muszą one spełniać tabelkę mnożenia grupowego. Ale $a^2 = e$, więc musi być w tym przypadku $\chi^2 = 1$ oraz $\beta^2 = 1$, czyli $\alpha = \pm 1$, $\beta = \pm 1$. Dwie różne reprezentacje tworzą więc tabelkę charakterów

ν \ i	1	2
1	1	1
2	1	-1

(10.68)

Zauważmy, że „wektor charakterów" (1, 1) jest ortogonalny do drugiego „wektora charakterów" (1–1), jak być powinno zgodnie z relacją (10.49).

Trójelementowa grupa $\{e, a, a^2\}$ z $a^3 = e$, ma trzy klasy

$$\mathscr{C}_1 = e, \quad \mathscr{C}_2 = a, \quad \mathscr{C}_3 = a^2,$$

a zatem i trzy jednowymiarowe reprezentacje. Zwróćmy uwagę, że zgodne jest to, jak być powinno, z równaniem (10.59). Korzystając z tabelki grupowej, która mówi, że kwadrat drugiego elementu ma się równać trzeciemu elementowi, możemy natychmiast wypisać tabelkę charakterów

ν \ i	1	2	3
1	1	α	α^2
2	1	β	β^2
3	1	γ	γ^2

Musi jednak również być $\alpha^3 = \beta^3 = \gamma^3 = 1$, a zatem α, β, γ mogą przyjmować jedną z trzech możliwych wartości 1, $e^{2\pi i/3}$ i $e^{4\pi i/3}$. Trzema różnymi reprezentacjami są zatem

ν \ i	1	2	3
1	1	1	1
2	1	ε	ε^2
3	1	ε^2	ε

(10.69)

gdzie $\varepsilon = e^{2\pi i/3}$. Otrzymane trzy „wektory charakterów" (1, 1, 1), $(1, \varepsilon, \varepsilon^2)$ i $(1, \varepsilon^2, \varepsilon)$ są wzajemnie ortogonalne, co czytelnik może łatwo sprawdzić.

W rzędzie czwartym mamy dwie różne grupy, grupę cykliczną rzędu czwartego i czterogrupę. Jeśli chodzi o grupę cykliczną, to powinno być jasne ze sposobu, w jaki rozwiąza-

liśmy problem grupy cyklicznej rzędu trzeciego, że wszystkie charaktery grupy cyklicznej rzędu n są generowane w oczywisty sposób przez n pierwiastków n-tego stopnia z jedynki. Dla grupy cyklicznej rzędu czwartego tabelka charakterów będzie więc miała taką postać

ν \ i	1	2	3	4
1	1	1	1	1
2	1	δ	δ^2	δ^3
3	1	δ^2	1	δ^2
4	1	δ^3	δ^2	δ

gdzie $\delta = e^{2\pi i/4} = i$, a $\delta^4 = 1$. Uogólnienie na grupę cykliczną rzędu n jest oczywiste.

Przejdźmy teraz do czterogrupy. Jej elementy oznaczymy tak jak poprzednio: $\{e, a, b, c\}$. Z dyskusji przeprowadzonej w paragrafie 10.3 jest jasne, że elementy $\{e, a\}$ tworzą podgrupę inwariantną. Grupą ilorazową jest

$$E = \{e, a\}, \quad A = \{b, c\}.$$

A zatem reprezentacja grupy $\{E, A\}$ [patrz tabelka (10.68)] może być przerobiona na reprezentację czterogrupy, jeśli reprezentanta elementu E grupy ilorazowej przypiszemy zarówno elementowi grupy e, jak i a, a reprezentanta elementu A przypiszemy obu elementom b i c. Odpowiadające dwóm reprezentacjom grupy $\{E, A\}$ charaktery przypisane elementom e, a, b, c są odpowiednio: dla reprezentacji $\chi(E) = 1$, $\chi(A) = 1$, mamy $\chi(e) = 1$, $\chi(a) = 1$, $\chi(b) = 1$, $\chi(c) = 1$, a dla reprezentacji $\chi(E) = 1$, $\chi(A) = -1$ mamy $\chi(e) = 1$, $\chi(a) = 1$, $\chi(b) = -1$, $\chi(c) = -1$. Podobnie grupa inwariantna $\{e, b\}$ prowadzi do dwóch przyporządkowań charakterów czterogrupie. Jedno z nich jest trywialną reprezentacją (wszystkie charaktery równe jedności), którą już uzyskaliśmy z podgrupy $\{e, a\}$; drugie przyporządkowanie jest $\chi(e) = 1$, $\chi(a) = -1$, $\chi(b) = 1$, $\chi(c) = -1$. Wreszcie podgrupa inwariantna $\{e, c\}$ prowadzi do jeszcze jednego zbioru charakterów $\chi(e) = 1$, $\chi(a) = -1$, $\chi(b) = -1$ i $\chi(c) = 1$. Tablica charakterów dla czterogrupy ma więc następujący wygląd

ν \ i	1	2	3	4
1	1	1	1	1
2	1	1	−1	−1
3	1	−1	1	−1
4	1	−1	−1	1

(10.70)

Oczywiście i w tym wypadku spełnione są relacje ortogonalności.

Ponieważ pięć jest liczbą pierwszą, to jedyną grupą rzędu piątego jest grupa cykliczna, z którą postępujemy bardzo podobnie, jak to zrobiliśmy z grupą cykliczną rzędu czwartego.

Ta sama uwaga odnosi się i do grupy cyklicznej rzędu szóstego, aż wreszcie napotykamy na coś nowego, a mianowicie na grupę S_3, sześcioelementową grupę permutacji trzech przedmiotów. Jest to najmniejsza grupa nieabelowa. Wiemy, że ma ona trzy klasy

$$\mathscr{C}_1 = e, \quad \mathscr{C}_2 = \{(12), (13), (23)\} \quad \mathscr{C}_3 = \{(123), (321)\},$$

którym odpowiadają trzy charaktery χ_1, χ_2 i χ_3. Liczby elementów w poszczególnych klasach wynoszą $g_1 = 1$, $g_2 = 3$, $g_3 = 2$. Ponieważ są trzy klasy, więc muszą też być trzy reprezentacje nieprzywiedlne. Na mocy (10.59) musimy mieć

$$\sum_{\nu=1}^{3} n_\nu^2 = 6.$$

Liczbę sześć można tylko w jeden sposób rozłożyć na sumę trzech kwadratów, a mianowicie musi być $n_1 = 1$, $n_2 = 1$, $n_3 = 2$. Tak więc po raz pierwszy napotykamy się na reprezentację dwuwymiarową. Korzystając z powyższych faktów możemy rozpocząć konstruowanie naszej tabelki charakterów

ν \ i	1	2	3
1	1	1	1
2	1	a	b
3	2	c	d

Wstawiliśmy tu bezpośrednio reprezentację trywialną i skorzystaliśmy z faktu, że $\chi_1^{(\nu)} = n_\nu$. Teraz na mocy (10.49)

$$\sum_{i=1}^{3} g_i \chi_i^{(1)*} \chi_i^{(2)} = 0,$$

czyli

$$1 + 3a + 2b = 0. \tag{10.71}$$

Podobnie z relacji

$$\sum_{i=1}^{3} g_i \chi_i^{(1)*} \chi_i^{(3)} = 0$$

dostajemy

$$3c + 2d + 2 = 0. \tag{10.72}$$

Korzystając z (10.71) i (10.72) możemy uprościć tabelkę charakterów.

ν \ i	1	2	3
1	1	1	1
2	1	a	$-\frac{3a+1}{2}$
3	2	c	$-\frac{3c+2}{2}$

Możemy teraz skorzystać z innych własności ortogonalności charakterów [wzór (10.64)]

$$\sum_{\nu=1}^{3} \chi_1^{(\nu)*}\chi_2^{(\nu)} = 0,$$

$$\sum_{\nu=1}^{3} \chi_1^{(\nu)*}\chi_3^{(\nu)} = 0.$$

Oba te równania sprowadzają się do jednego

$$a+2c+1 = 0, \tag{10.73}$$

a więc tabelka charakterów zawiera już tylko jedną niewiadomą

ν \ i	1	2	3
1	1	1	1
2	1	$-1-2c$	$1+3c$
3	2	c	$-1-\frac{3}{2}c$

Prosty sposób ustalenia wartości c polega na skorzystaniu z tego, że $(123)^3 = e$ i $(123)^2 = (321)$. A zatem w jednowymiarowej reprezentacji $\chi_3^3 = 1$ oraz $\chi_3^2 = \chi_3$, ponieważ (123) i (321) oba należą do tej samej klasy. Wynika stąd, że $\chi_3 = 1$, a to oznacza, że $1+3c = 1$, czyli $c = 0$. Tabelka charakterów przyjmuje więc ostatecznie postać

ν \ i	1	2	3
1	1	1	1
2	1	−1	1
3	2	0	−1

Druga reprezentacja nieprzywiedlna jest tzw. reprezentacją antysymetryczną polegającą na reprezentowaniu permutacji nieparzystych liczbą -1 i reprezentacji parzystych liczbą $+1$. Reprezentacja taka istnieje oczywiście dla wszystkich S_n. Czytelnik powinien sprawdzić, że sześć warunków normalizacyjnych wynikających z relacji (10.49) i (10.61), a mianowicie

$$\sum_{i=1}^{3} g_i\chi_i^{(\nu)*}\chi_i^{(\nu)} = 6, \quad \nu = 1, 2, 3$$

i

$$\sum_{\nu=1}^{3} \chi_i^{(\nu)*}\chi_i^{(\nu)} = 6/g_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

jest również spełnionych. Należy podkreślić, że przedstawiony przez nas sposób wyznaczenia tabelki charakterów dla S_3 nie należy do najszybszych. Na przykład korzystając z faktu,

że $\mathscr{C}_1$ i $\mathscr{C}_3$ tworzą podgrupę inwariantną, której grupa ilorazowa jest izomorficzna z $\{e, a\}$, można natychmiast z tabelki (10.68) podać dwie jednowymiarowe reprezentacje. Mając już te reprezentacje, charaktery trzeciej reprezentacji o wymiarze dwa możemy jednoznacznie określić w oparciu o warunki ortogonalności. Zalecamy czytelnikowi, by się o tym przekonał.

Charaktery dwóch jednowymiarowych reprezentacji są oczywiście dokładnie równe samym macierzom (jednowymiarowym) reprezentacji

$$D^{(1)}(U) = 1$$

dla wszystkich $U \in S_3$ oraz

$$D^{(2)}(e) = D^{(2)}(123) = D^{(2)}(321) = 1,$$
$$D^{(2)}(12) = D^{(2)}(13) = D^{(2)}(23) = -1.$$

Wyznaczenie macierzy reprezentacji dwuwymiarowej wymaga jednak dodatkowej pracy. Nie ma oczywiście kłopotu z elementem jednostkowym

$$D^{(3)}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{10.74}$$

Jeśli chodzi o macierz $D^{(3)}(12)$, to możemy ją wybrać w postaci diagonalnej, gdyż zawsze możemy dowolnie wybrać jeden z elementów poza jednostkowym, który będzie reprezentowany przez macierz diagonalną (dlaczego?), a więc

$$D^{(3)}(12) = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}.$$

Ale $(12) \in \mathscr{C}_2$, więc z tablicy charakterów odczytujemy, że $\chi_2^{(3)} = 0$, to znaczy, że ślad macierzy $D^{(3)}(12)$ jest zero. Oznacza to, że $b = -a$. Ponieważ $(12)^2 = e$, musimy mieć więc $a^2 = 1$. Wybierając $a = 1$ mamy

$$D^{(3)}(12) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{10.75}$$

Zauważmy, że wybierając $a = -1$ otrzymalibyśmy inną macierz, ale jak łatwo się przekonać, związaną z macierzą (10.75) przez transformację podobieństwa. A co można powiedzieć o macierzach $D^{(3)}(13)$ i $D^{(3)}(23)$? Oczywiście ze względu na $(13)^2 = e$ mamy

$$D^{(3)}(13) = D^{(3)}(13)^{-1}. \tag{10.76}$$

Ponieważ jednak wolno nam się ograniczyć tylko do macierzy unitarnych, więc

$$D^{(3)}(13)^{\dagger} = D^{(3)}(13)^{-1}$$

i zestawiając to z (10.76) dostajemy

$$D^{(3)}(13) = D^{(3)}(13)^{\dagger},$$

to znaczy $D^{(3)}(13)$ jest macierzą hermitowską. Podobnie wykazujemy, że i macierz $D^{(3)}(23)$ jest hermitowska. Korzystając z faktu, że zarówno ślad $D^{(3)}(13)$, jak i ślad macierzy $D^{(3)}(23)$ są równe zeru, możemy napisać całkiem ogólnie

$$D^{(3)}(13) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & -\alpha \end{pmatrix}, \quad D^{(3)}(23) = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta^* & -\gamma \end{pmatrix}, \tag{10.77}$$

gdzie α i γ są rzeczywiste. Ale na mocy (10.35) i (10.38)

$$M_2^{(3)} = D^{(3)}(12)+D^{(3)}(13)+D^{(3)}(23) = \frac{g_2}{n_3}\chi_2^{(3)} I = 0,$$

gdyż $\chi_2^{(3)} = 0$. Korzystając więc z (10.75) i (10.77) dostajemy

$$\begin{pmatrix} 1+\alpha+\gamma & \beta+\delta \\ \beta^*+\delta^* & -1-\alpha-\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

a zatem macierze $D^{(3)}(13)$ i $D^{(3)}(23)$ muszą być postaci

$$D^{(3)}(13) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & -\alpha \end{pmatrix}, \quad D^{(3)}(23) = \begin{pmatrix} -(\alpha+1) & -\beta \\ -\beta^* & (\alpha+1) \end{pmatrix}.$$

Korzystamy wreszcie z warunku unitarności

$$D^{(3)}(13)^\dagger D^{(3)}(13) = \begin{pmatrix} \alpha^2+|\beta|^2 & 0 \\ 0 & \alpha^2+|\beta|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$D^{(3)}(23)^\dagger D^{(3)}(23) = \begin{pmatrix} (\alpha+1)^2+|\beta|^2 & 0 \\ 0 & (\alpha+1)^2+|\beta|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Prowadzi to do dwóch równań

$$\alpha^2+|\beta|^2 = 1, \quad (\alpha+1)^2+|\beta|^2 = 1,$$

z których natychmiast otrzymujemy $\alpha = -\frac{1}{2}$, $\beta = (\sqrt{3}/2)e^{i\phi}$, gdzie ϕ jest dowolne, a więc

$$D^{(3)}(13) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\phi} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}e^{-i\phi} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \tag{10.78}$$

$$D^{(3)}(23) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\phi} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}e^{-i\phi} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{10.79}$$

Ale (123) = (13)(12), a więc

$$D^{(3)}(123) = D^{(3)}(13)D^{(3)}(12) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\phi} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}e^{-i\phi} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\phi} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}e^{-i\phi} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{10.80}$$

Mamy również (321) = $(123)^{-1}$, więc

$$D^{(3)}(321) = D^{(3)}(123)^{-1} = D^{(3)}(123)^\dagger = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\phi} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}e^{-i\phi} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \tag{10.81}$$

co kończy wyznaczanie macierzy z wyjątkiem nieokreślonej jeszcze stałej ϕ. Jednakże zawsze można zachowując ogólność wybrać $\phi = 0$, gdyż jak przekonujemy się prostym mnożeniem, każdą macierz o postaci

$$\begin{pmatrix} a & be^{i\phi} \\ ce^{-i\phi} & d \end{pmatrix}$$

można sprowadzić do postaci

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

poprzez transformację podobieństwa z unitarną macierzą

$$\begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Fakt ten, wraz z wynikami (10.74), (10.75), (10.78), (10.79), (10.80) i (10.81) pozwalają nam napisać

$$D^{(3)}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D^{(3)}(12) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad D^{(3)}(13) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$D^{(3)}(23) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad D^{(3)}(123) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$D^{(3)}(321) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{10.82}$$

Poznajemy, że macierze te wypisywaliśmy już we wzorze (3.5), kiedy wykazaliśmy, że są one izomorficzne z grupą permutacji trzech przedmiotów. Tutaj zaczęliśmy od grupy S_3 i doszliśmy w nieunikniony sposób do tych izomorficznych macierzy.

Warto zauważyć, że w przypadku gdy macierze reprezentacji nie są wszystkie równe charakterom, równanie (10.45) nie jest równoważne wzorowi (10.49), jak to ma miejsce w przypadku wyłącznie jednowymiarowym. Na przykład element $i = 1, j = 1$ wszystkich macierzy reprezentacji dwuwymiarowej [patrz (10.82)] daje „wektor reprezentacji", który zgodnie z (10.60) ma składowe

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1, 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right).$$

Z drugiej strony element $i = 1, j = 2$ daje

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\left(0, 0, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right).$$

Oba te wektory są unormowane do jedności i wzajemnie ortogonalne, jak być powinno zgodnie z (10.45). Nietrywialna reprezentacja jednowymiarowa daje „wektor reprezentacji"

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(1, -1, -1, -1, 1, 1),$$

który jest poprawnie unormowany do jedności i ortogonalny do każdego z dwóch „wektorów reprezentacji" napisanych powyżej. Czytelnik może ewentualnie sprawdzić, że spełnione są pozostałe warunki ortogonalności wynikające z wzorów (10.45) i (10.61).

10.8. TEORIA GRUP W PROBLEMACH FIZYCZNYCH

Skoro już wiemy, jak znajdywać charaktery i reprezentacje grup, możemy teraz wskazać na niektóre ze sposobów, jakimi przy pomocy teorii grup możemy poszerzać nasze zrozumienie pewnych podstawowych procesów fizycznych.

Jako szczególnie prostą ilustrację tego, co mamy na myśli, rozpatrzmy zagadnienie układu kwantowomechanicznego posiadającego różne stany własne, zdegenerowane z powodu istnienia pewnej symetrii w równaniu Schrödingera. Jak wspomnieliśmy w paragrafie 10.4, zbór funkcji własnych należących do jakiejś zdegenerowanej wartości własnej będzie przekształcał się w siebie pod działaniem dowolnej transformacji należącej do grupy symetrii danego problemu. Zgodnie z równaniem (10.15), jeśli $\mathcal{U} \in \mathcal{G}$ i $U \in G$, wtedy

$$\mathcal{U}\psi_m(\mathbf{r}) = \sum_{m'} D_{m'm}(U)\psi_{m'}(\mathbf{r}),$$

gdzie $D(U)$ jest reprezentacją grupy G oraz $U \in G$. Przypuśćmy teraz, że poddajemy nasz układ działaniu słabego zaburzenia o symetrii mniejszej niż początkowa symetria układu niezaburzonego. Możemy mieć na przykład atom, który w pustej przestrzeni jest układem o symetrii sferycznej, ale po umieszczeniu w sieci krystalicznej o symetrii regularnej podlega działaniu potencjału o symetrii będącej symetrią sześcianu. Symetria sześcianu jest oczywiście dużo uboższa od pełnej niezmienniczości obrotowej; w istocie zamiast nieskończonej grupy symetrii wszystkich obrotów w trzech wymiarach mamy teraz 24-elementową grupę symetrii sześcianu (grupa ta jest izomorficzna z grupą S_4 permutacji czterech przedmiotów).

Po umieszczeniu atomu w tym nowym potencjale o symetrii sześcianu poziomy energetyczne ulegną modyfikacji i to w taki sposób, że zdegenerowane wektory własne należące do nowych poziomów energetycznych będą się transformowały między sobą zgodnie z reprezentacjami grupy symetrii sześcianu $\mathcal{O}$. Innymi słowy μ-krotnie zdegenerowany poziom układu o symetrii sferycznej musi rozpaść się na M zbiorów poziomów zdegenerowanych należących do $\mathcal{O}$ o krotnościach $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_M$. Oczywiście musi być $\mu_1 + \mu_2 + \ldots + \mu_M = \mu$.

Właściwym schematem do analizy tego rodzaju problemów jest teoria zaburzeń dla przypadku z degeneracją (paragraf 4.12). Jeśli czytelnik wróci do tego paragrafu, przekona się, że ważnym obiektem przy dyskusji teorii zaburzeń są tzw. elementy macierzowe operatora zaburzenia pomiędzy stanami układu niezaburzonego. Dla ścisłości przypuśćmy,

że A_0, tak jak w paragrafie 4.12, jest operatorem liniowym rządzącym układem niezaburzonym

$$A_0\phi_{n,\nu,i} = \lambda_{n,\nu}\phi_{n,\nu,i}.$$

Indeksy wybraliśmy tutaj w zgodzie z teorio-grupowym faktem poznanym w tym rozdziale, a mianowicie ν numeruje nieprzywiedlne reprezentacje mówiące nam, jak funkcje własne transformują się pod działaniem grupy symetrii G_0 operatora A_0, a wskaźnik i numeruje wektory wewnątrz reprezentacji. To znaczy w standardowych oznaczeniach.

$$\mathscr{V}\phi_{n,\nu,i} = \sum_{j=1}^{n_\nu} D_{ji}^{(\nu)}(V)\phi_{n,\nu,j}, \tag{10.83a}$$

gdzie V jest dowolnym elementem grupy G_0 ($\mathscr{V}$ jest odpowiadającym mu elementem grupy $\mathscr{G}_0$). Wreszcie indeks n może dodatkowo być potrzebny do jednoznacznego wyspecyfikowania rozważanej wartości własnej. Na przykład może się okazać, że gdy przebiegamy całe widmo operatora A_0, reprezentacja ν pojawia się więcej niż tylko jeden raz.

Wyobraźmy sobie teraz, że zaburzenie A_1 jest niezmiennicze względem każdego elementu U grupy symetrii G_1 i że $\psi_{n,\nu,i}$ jest zbiorem funkcji transformujących się zgodnie z ν-tą reprezentacją grupy G_1

$$\mathscr{U}\psi_{n,\nu,i} = \sum_{j=1}^{n_\nu} D_{ji}^{(\nu)}(U)\psi_{n,\nu,j}, \tag{10.83b}$$

gdzie $\mathscr{U} \in \mathscr{G}_1$. Interesują nas elementy macierzowe postaci

$$M_{n,\nu,i;n',\mu,j} \equiv (\psi_{n,\nu,i}, A_1\psi_{n',\mu,j}). \tag{10.84}$$

Ponieważ $\mathscr{U}^\dagger\mathscr{U} = \mathscr{U}\mathscr{U}^\dagger = I$, możemy zapisać równanie (10.84) w postaci

$$M_{n,\nu,i;n',\mu,j} = (\psi_{n,\nu,i}, \mathscr{U}^\dagger\mathscr{U}A_1\mathscr{U}^\dagger\mathscr{U}\psi_{n',\mu,j}) = (\mathscr{U}\psi_{n,\nu,i}, \mathscr{U}A_1\mathscr{U}^{-1}\mathscr{U}\psi_{n,\mu,j}).$$

Korzystając z własności transformacyjnych funkcji $\psi_{n,\nu,i}$ możemy to również zapisać tak

$$M_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \Big(\sum_{k=1}^{n_\nu} D_{ki}^{(\nu)}(U)\psi_{n,\nu,k}, [\mathscr{U}A_1\mathscr{U}^{-1}]\sum_{l=1}^{n_\mu} D_{lj}^{(\mu)}(U)\psi_{n',\mu,l}\Big)$$

lub

$$M_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \sum_{k=1}^{n_\nu}\sum_{l=1}^{n_\mu} D_{ki}^{(\nu)*}(U)D_{lj}^{(\mu)}(U)(\psi_{n,\nu,k}, [\mathscr{U}A_1\mathscr{U}^{-1}]\psi_{n',\mu,l}). \tag{10.85}$$

Ponieważ jednak założyliśmy, że A_1 jest niezmiennicze względem G_1

$$\mathscr{U}A_1\mathscr{U}^{-1} = A_1,$$

więc wzór (10.85) przyjmuje postać

$$M_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \sum_{k=1}^{n_\nu}\sum_{l=1}^{n_\mu} D_{ki}^{(\nu)*}(U)D_{lj}^{(\mu)}(U)(\psi_{n,\nu,k}, A_1\psi_{n',\mu,l}). \tag{10.86}$$

Decydujący chwyt polega teraz na zsumowaniu obu stron powyższej równości dla wszystkich $U \in G_1$ i skorzystaniu ze związków ortogonalności (10.45) po prawej stronie

wzoru (10.86). Ponieważ M nie zależy od U [patrz (10.84)], więc po lewej stronie dostaniemy gM, gdzie g jest rzędem grupy G_1, a zatem

$$gM_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \sum_{k=1}^{n_\nu} \sum_{l=1}^{n_\mu} \sum_{U \in G_1} D_{ki}^{(\nu)*}(U) D_{lj}^{(\mu)}(U) M_{n,\nu,k;n',\mu,l}. \tag{10.87}$$

Ale główna część tej sumy zawierającej elementy macierzowe może być obliczona natychmiast, jeśli skorzystamy z twierdzenia o ortogonalności [wzór (10.45)], które mówi, że

$$\sum_{U \in G_1} D_{ki}^{(\nu)*}(U) D_{lj}^{(\mu)}(U) = \frac{g}{n_\nu} \delta_{kl} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu}.$$

Podstawiając to do równania (10.87), dostajemy

$$M_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \frac{1}{n_\nu} \delta_{\mu\nu} \delta_{ij} \sum_{l=1}^{n_\nu} M_{n,\nu,l;n',\nu,l}. \tag{10.88}$$

Widzimy więc, że elementy macierzowe tego typu nie znikają tylko wtedy, gdy funkcje własne należą do tej samej reprezentacji i co więcej mają ten sam indeks numerujący wektory wewnątrz reprezentacji. Wynik ten jest bardzo użyteczny w teorii zaburzeń, gdyż ogranicza on silnie liczbę funkcji własnych, które mogą wchodzić do sum występujących w rachunku zaburzeń [patrz równanie (4.60)].

W sposób bardziej elementarny wzór (10.88) możemy interpretować tak, że operator A_1 mający tę samą grupę symetrii co operator niezaburzony A_0, nie może w pierwszym przybliżeniu rachunku zaburzeń rozszczepić zdegenerowanego poziomu, gdyż obliczając elementy macierzowe operatora A_1 pomiędzy zdegenerowanymi stanami należącymi do tej samej wartości własnej operatora A_0 stwierdzimy, że nie znikają tylko wyrazy diagonalne [$i = j$ w równaniu (10.88)] i że są one sobie równe. Z wzoru (4.65b) odczytujemy więc, że wszystkie poprawki pierwszego rzędu do energii będą równe, a zatem degeneracja nie zostanie zniesiona. Nie powinno nas to zaskakiwać, gdyż jeśli opeartor A_1 wykazuje tę samą symetrię co A_0, to również operator $A_0 + \varepsilon A_1$ ma tę samą grupę symetrii co A_0. Zgodnie więc z ogólnymi rozważaniami w paragrafie 10.4 zdegenerowane poziomy A_0 należące do pewnej nieprzywiedlnej reprezentacji G_0 nie mogą się nigdy rozszczepić, gdyż w przeciwnym wypadku te nowe poziomy operatora A miałyby mniejszą krotność niż poziomy początkowe. To z kolei oznaczałoby, że istnieją pewne kombinacje liniowe funkcji własnych należących do początkowego zdegenerowanego poziomu, które transformują się wzajemnie na siebie pod działaniem G_0. To zaś oznacza, że początkowy poziom opisywany był przez reprezentację przywiedlną grupy G_0, co przeczy założeniu. A zatem nie może być rozszczepienia.

Wzór (10.88) znajduje jeszcze bardziej skuteczne zastosowanie w przypadku, kiedy A_1 ma symetrię niższą od operatora A_0 oraz kiedy grupa G_1, względem której A_1 jest niezmienniczy, jest podgrupą szerszej grupy G_0, grupy niezmienniczości operatora A_0. Kluczową rolę odgrywa wtedy fakt, że w takim przypadku reprezentacje $D^{(\nu)}(V)$ $(V \in G_0)$ grupy G_0 są zarazem reprezentacjami grupy G_1, jeśli tylko ograniczymy się do takich operatorów V, które należą do podgrupy. Takie reprezentacje podgrupy są jednak na ogół reprezentacjami przywiedlnymi. Na przykład grupa $\{e, (12)\}$ jest podgrupą grupy

$S_3 = \{e, (12), (13), (23), (123), (321)\}$. W dwuwymiarowej reprezentacji grupy S_3 element e jest reprezentowany przez macierz jednostkową, a element (12) przez macierz

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

A zatem dla grupy $\{e, (12)\}$ reprezentacja

$$e \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (12) \to \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

jest całkowicie do przyjęcia, ale jest ona oczywiście przywiedlna i sprowadza się do sumy dwóch reprezentacji jednowymiarowych. W bardziej skomplikowanych przypadkach, kiedy rozkład reprezentacji nie jest tak łatwy do wykonania, można bardzo prosto obliczyć przynajmniej krotność występowania danej reprezentacji nieprzywiedlnej grupy G_1 w reprezentacji przywiedlnej grupy G_1 indukowanej przez grupę G_0. Wystarczy w tym celu znać jedynie charaktery reprezentacji nieprzywiedlnych grupy G_1 i skorzystać z równania (10.54).

Pamiętając wyraźnie o tym punkcie widzenia nietrudno już rozstrzygnąć, co się będzie działo, jeśli rozszczepiamy poziom zdegenerowany działając zaburzeniem A_1 niezmienniczym względem grupy G_1 na układ fizyczny opisany operatorem A_0 niezmienniczym względem grupy G_0. Dany poziom zdegenerowany operatora A_0 należy do nieprzywiedlnej reprezentacji $D^{(\nu)}$ grupy G_0, tzn. funkcje własne tego poziomu transformują się między sobą pod działaniem G_0 zgodnie z reprezentacją $D^{(\nu)}$. Jednakże poziom ten możemy również rozpatrywać jako należący do przywiedlnej reprezentacji grupy G_1; to znaczy pewne zbiory kombinacji liniowych funkcji falowych należących do tego poziomu transformują się nawzajem w siebie pod działaniem G_1.

Możemy o tym przekonać się w następujący sposób. Przypuśćmy, że $D(V)$ jest pewną nieprzywiedlną reprezentacją grupy G_0. Jeśli ograniczymy się do podzbioru grupy G_1 i oznaczymy któryś z elementów tego podzbioru przez U, to $D(U)$ jest na ogół reprezentacją przywiedlną grupy G_1. Istnieje zatem pewna macierz S (niezależna od U) taka, że dla wszystkich $U \in G_1$ mamy

$$S^{-1}D(U)S = D'(U) \quad \text{lub} \quad D(U) = SD'(U)S^{-1},$$

gdzie macierze $D'(U)$ mają taką samą strukturę jak macierz we wzorze (10.19), to znaczy ma ona kwadratowe macierze (reprezentacje nieprzywiedlne grupy G_1) na przekątnej, a pozostałe jej elementy są zerami. Przypuśćmy teraz, że $\{f_i\}$ jest zbiorem funkcji transformujących się między sobą pod działaniem G_0 zgodnie z nieprzywiedlną reprezentacją $D(V)$. Jeśli ograniczymy się do tych elementów U, które należą również do G_1, to możemy napisać:

$$\mathcal{U}f_i = \sum_j D_{ji}(U)f_j = \sum_j [SD'(U)S^{-1}]_{ji}f_j = \sum_{j,k,m} S_{jk}D'_{km}(U)[S^{-1}]_{mi}f_j.$$

Ostatni związek można również przepisać w takiej postaci

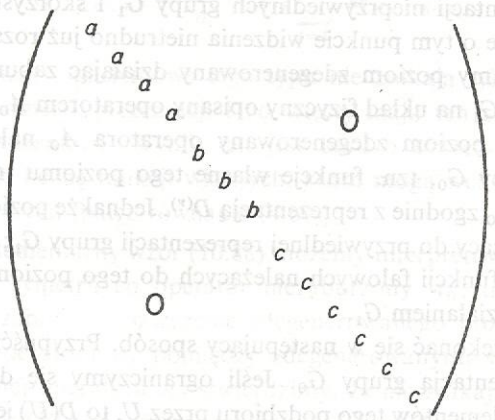
$$\mathcal{U}\sum_i S_{il}f_i = \sum_{j,k} S_{jk}D'_{kl}(U)f_j.$$

Oznaczając

$$g_l = \sum_i S_{il}f_i \quad \text{mamy} \quad \mathcal{U}g_l = \sum_k D'_{kl}(U)g_k.$$

Przyglądając się postaci $D'(U)$ [patrz wzór (10.19)] możemy wybrać przez inspekcję zbiory tych funkcji g, które transformują się między sobą zgodnie z reprezentacjami nieprzywiedlnymi grupy G_1 znajdującymi się na przekątnej macierzy $D'(U)$.

Jeśli teraz zastosujemy teorię zaburzeń z degeneracją do operatora zaburzającego A_1 używając takich kombinacji liniowych zdegenerowanych funkcji własnych, które odpowiadają grupie G_1, to zgodnie z równaniem (10.88) wszystkie elementy macierzowe pomiędzy kombinacjami należącymi do różnych reprezentacji nieprzywiedlnych grupy G_1 będą równe zeru, a dla kombinacji należących do jednej reprezentacji nieprzywiedlnej grupy G_1 różne od zera będą tylko elementy diagonalne. Ponadto te elementy diagonalne wewnątrz jednej nieprzywiedlnej reprezentacji będą miały wspólną wartość. A zatem macierz A_1 obliczona pomiędzy odpowiednio wybranymi kombinacjami liniowymi funkcji własnych należących do zdegenerowanego poziomu operatora A_0 może mieć na przykład postać następującą



W tym przykładzie trzynastokrotnie zdegenerowany poziom operatora A_0 należący do trzynastowymiarowej reprezentacji G_0 rozszczepił się na trzy poziomy — cztero -, trzy - i sześciokrotnie zdegenerowane — należące do trzech różnych nieprzywiedlnych reprezentacji grupy G_1 (czytelnik powinien zauważyć, że założyliśmy tu, że dana nieprzywiedlna reprezentacja grupy G_1 występuje tylko jeden raz w rozkładzie. Jak wyglądałaby macierz A_1, gdyby któraś z reprezentacji wystąpiła dwukrotnie?). Oczywiście, nie zawsze wiemy z góry, jakie kombinacje liniowe funkcji falowych należy wybrać tak, że macierz operatora A_1 obliczona w przypadkowo wybranej bazie byłaby skomplikowaną macierzą 13×13, która przyjęłaby powyższą diagonalną postać dopiero po dokonaniu transformacji podobieństwa (diagonalizacji). Transformacja ta dałaby również poprawne kombinacje liniowe wyjściowych funkcji falowych, tak jak to opisaliśmy w paragrafie 4.12.

Aby zilustrować powyższe idee, rozpatrzmy przykład wspomniany na początku tego paragrafu, a mianowicie układ obrotowo-niezmienniczy (jakiś atom w pustej przestrzeni) umieszczony w słabym potencjale o symetrii sześcianu (w krysztale o symetrii regularnej). Przed rozwiązaniem tego problemu musimy najpierw znaleźć charaktery reprezentacji nieprzywiedlnych, które tu wchodzą w grę. Zacznijmy od grupy obrotów. Jest to grupa ciągła, a zatem ściślej mówiąc wykracza poza ramy teorii wyłożonej w poprzednich paragrafach. Jeśli jednak interesujemy się tylko charakterami, to możemy postąpić w następujący

sposób. Wiemy z elementarnych rozważań (patrz paragraf 5.8), że $(2l+1)$ funkcji kulistych $Y_{lm}(\theta, \phi)$, gdzie $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$, są to funkcje własne niezmienniczego względem obrotów operatora L^2 i należą one wszystkie do tej samej wartości własnej $l(l+1)$, gdzie $l = 0, 1, 2, \ldots$ tegoż operatora. Te zdegenerowane funkcje muszą więc transformować się między sobą zgodnie z reprezentacją grupy obrotów (można wykazać, że reprezentacja ta jest nieprzywiedlna).

Wiemy, że dowolny obrót może być przy pomocy transformacji unitarnej sprowadzony do obrotu wokół jednej osi. Oznaczmy kąt obrotu wokół tej osi literą Φ. Ponieważ wszystkie obroty o kąt Φ są unitarnie równoważne, to obroty takie tworzą klasę, którą możemy oznaczyć symbolem Φ. Aby znaleźć charakter takiej klasy, wystarczy tylko rozpatrzyć obroty o kąt Φ wokół osi z. Obroty takie przeprowadzają funkcję $Y_{lm}(\theta, \phi)$ w funkcję $e^{im\Phi}Y_{lm}(\theta, \phi)$, patrz paragraf 5.8. A zatem macierz reprezentująca ten obrót ma postać

$$\begin{pmatrix} e^{-il\Phi} & & & & 0 \\ & e^{-i(l-1)\Phi} & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & e^{i(l-1)\Phi} \\ 0 & & & & & e^{il\Phi} \end{pmatrix}$$

Łatwo obliczyć ślad, mamy mianowicie

$$\chi^{(l)}(\Phi) = \sum_{m=-l}^{l} e^{im\Phi} = \frac{\sin\left(l+\frac{1}{2}\right)\Phi}{\sin\left(\frac{\Phi}{2}\right)}. \tag{10.89}$$

Dla wykonania sumy zastosowaliśmy wzór na szereg geometryczny. Zauważmy, że wymiar n_l, l-tej reprezentacji wynosi

$$\lim_{\Phi\to 0} \frac{\sin\left(l+\frac{1}{2}\right)\Phi}{\sin\left(\frac{\Phi}{2}\right)} = 2l+1,$$

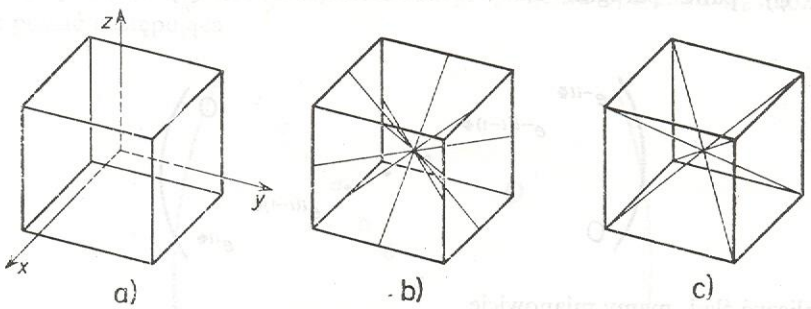
jak należało oczekiwać, gdyż $\Phi = 0$ odpowiada transformacji tożsamościowej. Dla $l = 0$ mamy trywialną reprezentację jednowymiarową, w której każdy obrót jest reprezentowany przez 1. Dla $l = 1$ dostajemy reprezentację trójwymiarową znaną z mechaniki klasycznej; dana jest ona jako funkcja kątów Eulera wzorem (1.25).

Kiedy już znaleźliśmy charaktery klas dla wszystkich reprezentacji grupy trójwymiarowych obrotów, przejdźmy teraz na pewniejszy dla nas grunt i wyznaczmy reprezentacje i charaktery grupy o symetrii sześcianu. Grupa ta zawiera 24 elementy tworzące pięć klas; jest ona izomorficzna z grupą S_4. Klasa $\mathscr{C}_1$ to klasa identyczności. Na rys. 10.2(a) ukazane są osie obrotów związanych z klasami $\mathscr{C}_2$ i $\mathscr{C}_4$. Klasa $\mathscr{C}_2$ składa się z sześciu obrotów o kąty $\pm\pi/2$ wokół każdej z trzech osi: x, y, i z; klasa $\mathscr{C}_4$ składa się z trzech elementów odpowiadających obrotom o π radianów wokół tych samych osi x, y i z. Rys. 10.2(b) przedstawia osie związane z klasą $\mathscr{C}_5$, która składa się z obrotów o π radianów

wokół każdej z tych sześciu osi. Wreszcie klasa $\mathscr{C}_3$ składa się z obrotów o kąty $\pm 2\pi/3$ radianów wokół każdej z czterech osi pokazanych na rys. 10.2(c). Wybraliśmy takie akurat oznaczenie klas po to, by być w zgodzie z oznaczeniami klas dla grupy S_4 podanymi w paragrafie 10.3. Podobnie jak dla tamtej grupy klasy $\mathscr{C}_1$ i $\mathscr{C}_4$ tworzą razem podgrupę niezmienniczą V, której grupa ilorazowa jest izomorficzna z S_3. W sposób opisany w poprzednim paragrafie możemy przenieść reprezentacje podgrupy S_3 na grupę S_4 (a zatem i na grupę $\mathscr{O}$). Ponieważ $\mathscr{O}$ ma 24 elementy rozpadające się na pięć klas, to musimy mieć

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2+n_4^2+n_5^2 = 24,$$

gdzie n_ν jest wymiarem ν-tej reprezentacji. Jedynym rozwiązaniem tego równania jest $n_1 = 1$, $n_2 = 1$, $n_3 = 2$, $n_4 = 3$, i $n_5 = 3$.



Rys. 10.2 Osie symetrii sześcianu.

Zgodnie z naszymi poprzednimi uwagami pierwsza, druga i trzecia reprezentacja z $n_1 = 1$, $n_2 = 1$ i $n_3 = 2$ będą odpowiadały reprezentacjom grupy $S_3 = S_4/V$. W zwykły sposób możemy wypełnić znaczną część tabelki charakterów dla grupy $\mathscr{O}$:

ν \ i	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	−1	1	1	−1
3	2	0	−1	2	0
4	3	a	b	c	d
5	3	α	β	γ	δ

(10.90)

Ponieważ $g_1 = 1$, $g_2 = 6$, $g_3 = 8$, $g_4 = 3$ i $g_5 = 6$, możemy skorzystać z równania (10.49) i otrzymać

$$\begin{aligned} 6a+8b+3c+6d &= -3, \\ -6a+8b+3c-6d &= -3, \\ -8b+6c &= -6. \end{aligned}$$

Równania na α, β, γ i δ są identyczne z powyższymi trzema. Równania te można łatwo rozwiązać i dostajemy $b = 0$, $c = -1$, $d = -a$, podobnie otrzymujemy $\beta = 0$, $\gamma = -1$, $\delta = -\alpha$. Tabela (10.90) przyjmuje postać

ν \ i	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	−1	1	1	−1
3	2	0	−1	2	0
4	3	a	0	−1	$-a$
5	3	α	0	−1	$-\alpha$

Warunki unormowania zawarte w równaniach (10.49) dają $a^2 = 1 = \alpha^2$, to znaczy $a = \pm 1$ i $\alpha = \pm 1$. Mamy dwie możliwości wyboru: $a = 1$, $\alpha = -1$ albo $a = -1$, $\alpha = 1$. Prowadzą one do takiej samej tabelki charakterów z przestawionymi jedynie dwoma ostatnimi wierszami. Ostatecznie, tabelka charakterów ma wygląd następujący:

ν \ i	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	−1	1	1	−1
3	2	0	−1	2	0
4	3	1	0	−1	−1
5	3	−1	0	−1	1

(10.91)

Stosunkowo łatwo możemy w tym przypadku otrzymać również macierze reprezentacji. Dla pierwszych trzech reprezentacji macierze te są identyczne z otrzymanymi poprzednio reprezentacjami grupy S_3. Reprezentacje trójwymiarowe można otrzymać w prosty sposób z reprezentacji trójwymiarowej grupy obrotów. Ponieważ nie będą nam tu one potrzebne, pomijamy ich dalszą analizę.

Po wykonaniu tej standardowej pracy, możemy wrócić do problemu zbadania, co się stanie, gdy obrotowo niezmienniczy układ atomowy umieścimy w słabym polu o symetrii sześcianu. Po pierwsze zauważmy, że różne reprezentacje grupy obrotów indukują reprezentacje grupy $\mathcal{O}$. Rozpatrzmy na przykład reprezentację grupy obrotów o $l = 1$. Klasy grupy sześcianu odpowiadają następującym kątom obrotu w radianach:

$$\mathcal{C}_1 \to 0, \quad \mathcal{C}_2 \to \pm\pi/2, \quad \mathcal{C}_3 \to \pm 2\pi/3, \quad \mathcal{C}_4 \to \pi, \quad \mathcal{C}_5 \to \pi,$$

charaktery odpowiadające tym obrotom łatwo obliczyć z wzoru (10.89). Mamy

$$\chi_1 = 3, \quad \chi_2 = 1, \quad \chi_3 = 0, \quad \chi_4 = -1, \quad \chi_5 = -1.$$

Patrząc na tabelkę charakterów grupy $\mathcal{O}$ (10.91) widzimy, że mamy do czynienia z nieprzywiedlną reprezentacją grupy $\mathcal{O}$ odpowiadającą czwartemu wierszowi tabelki charakterów. A zatem poziom energetyczny układu o symetrii obrotowej należący do reprezentacji grupy obrotów o $l = 1$ nie ulegnie rozszczepieniu, jeśli poddamy go działaniu zaburzenia o symetrii sześcianu.

Przejdźmy teraz do reprezentacji z $l = 2$. Korzystając z wzoru (10.89) znajdujemy, że

$$\chi_1 = 5, \quad \chi_2 = -1, \quad \chi_3 = -1, \quad \chi_4 = 1, \quad \chi_5 = 1$$

dla charakterów reprezentacji grupy $\mathcal{O}$ indukowanej przez reprezentację grupy obrotów. Aby określić krotność występowania danej nieprzywiedlnej reprezentacji grupy $\mathcal{O}$ w tej przywiedlnej reprezentacji, stosujemy wzór (10.54). Znajdujemy, że

$$a^{(1)} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{5} g_i \chi_i^{(1)} \chi_i = \frac{1}{24}[5-6-8+3+6] = 0,$$

$$a^{(2)} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{5} g_i \chi_i^{(2)} \chi_i = \frac{1}{24}[5+6-8+3-6] = 0,$$

$$a^{(3)} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{5} g_i \chi_i^{(3)} \chi_i = \frac{1}{24}[10+0+8+6+0] = 1,$$

$$a^{(4)} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{5} g_i \chi_i^{(4)} \chi_i = \frac{1}{24}[15-6+0-3-6] = 0,$$

$$a^{(5)} = \frac{1}{24}\sum_{i=1}^{5} g_i \chi_i^{(5)} \chi_i = \frac{1}{24}[15+6+0-3+6] = 1.$$

A zatem w przywiedlnej reprezentacji indukowanej przez reprezentację grupy obrotów o $l = 2$ wystąpią trzecia i piąta reprezentacja nieprzywiedlna grupy $\mathcal{O}$. Oznacza to, że pięciokrotnie zdegenerowany poziom odpowiadający reprezentacji grupy obrotów o $l = 2$ ulegnie rozszczepieniu w polu o symetrii sześcianu na dwa poziomy — jeden dwukrotnie, a drugi trzykrotnie zdegenerowany.

Charakter rozszczepienia poziomu w danym problemie jest więc całkowicie wyznaczony przez symetrię problemu bez jakiejkolwiek znajomości jawnej postaci oddziaływań! Efekty takie były sprawdzone w nieprzebranej liczbie doświadczeń z widmami atomów w ciele stałym dostarczając jednego z najpiękniejszych przykładów potęgi metod teoriogrupowych w fizyce. W ostatnich latach podobne metody teorio-grupowe zastosowano w fizyce cząstek elementarnych dla otrzymania związków pomiędzy masami różnych cząstek elementarnych opierając się na założeniach o symetrii „niezaburzonego" hamiltonianiu opisującego cząstki elementarne i o charakterze członów zaburzających, które łamią tę symetrię.

Jako ostatni przykład ilustrujący użyteczność metod teorii grup w fizyce rozpatrzmy zmodyfikowany nieco wzór (10.85), co pozwoli nam otrzymać interesujące wyniki dotyczące przejść pomiędzy stanami układu kwanotowomechanicznego. Zajmowaliśmy się już

przypadkiem, kiedy operator A_1 był niezmienniczy względem wszystkich $\mathscr{U} \in \mathscr{G}_1$. Przypuśćmy teraz, że A_1 transformuje się pod działaniem $\mathscr{G}_1$ zgodnie z pewną nieprzywiedlną reprezentacją grupy $\mathscr{G}_1$. Będzie tak w przypadku, gdy A_1 jest jednym ze zbioru operatorów $\{A_1^{(\lambda,m)}, m = 1, 2, \ldots, n_\lambda\}$, gdzie λ wskazuje nieprzywiedlną reprezentację, zgodnie z którą transformuje się zbiór operatorów $A_1^{(\lambda,m)}$, tzn.

$$\mathscr{U} A_1^{(\lambda,m)} \mathscr{U}^{-1} = \sum_{m'=1}^{n_\lambda} D^{(\lambda)}_{m'm}(U) A_1^{(\lambda,m')}.$$

W tym przypadku równanie (10.85) przepiszemy w postaci

$$M^{(\lambda,m)}_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \sum_{k=1}^{n_\nu} \sum_{l=1}^{n_\mu} \sum_{m'=1}^{n_\lambda} D^{(\nu)}_{ki}{}^*(U) D^{(\mu)}_{lj}(U) D^{(\lambda)}_{m'm}(U) (\psi_{n,\nu,k}, A_1^{(\lambda,m')} \psi_{n',\mu,l}), \tag{10.92}$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$M^{(\lambda,m)}_{n,\nu,i;n',\mu,j} \equiv (\psi_{n,\nu,i}, A_1^{(\lambda,m)} \psi_{n',\mu,j}).$$

Zgodnie z tym oznaczeniem równaniu (10.92) można również nadać postać:

$$M^{(\lambda,m)}_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \sum_{k=1}^{n_\nu} \sum_{l=1}^{n_\mu} \sum_{m'=1}^{n_\lambda} D^{(\nu)}_{ki}{}^*(U) D^{(\mu)}_{lj}(U) D^{(\lambda)}_{m'm}(U) M^{(\lambda,m')}_{n,\nu,k;n',\mu,l}. \tag{10.93}$$

Co możemy powiedzieć o iloczynie $D^{(\mu)}_{lj}(U) D^{(\lambda)}_{m'm}(U)$? Zgodnie z wzorem (3.60) jest to element o wskaźnikach lm', jm iloczynu prostego macierzy $D^{(\mu)}$ i $D^{(\lambda)}$

$$[D^{(\mu)}(U) \otimes D^{(\lambda)}(U)]_{lm',jm} = D^{(\mu)}_{lj}(U) D^{(\lambda)}_{m'm}(U).$$

Korzystając z tego możemy zapisać równanie (10.93) w taki sposób

$$M^{(\lambda,m)}_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \sum_{k=1}^{n_\nu} \sum_{l=1}^{n_\mu} \sum_{m'=1}^{n_\lambda} D^{(\nu)}_{ki}{}^*(U) [D^{(\mu)}(U) \otimes D^{(\lambda)}(U)]_{lm',jm} M^{(\lambda,m')}_{n,\nu,k;n',\mu,l}. \tag{10.94}$$

Ponieważ iloczyn prosty reprezentacji jest znów reprezentacją, wielkość w nawiasie kwadratowym występująca w równaniu (10.94) będzie elementem macierzowym reprezentacji, ale nawet jeśli $D^{(\lambda)}$ i $D^{(\mu)}$ są nieprzywiedlne, to ich iloczyn prosty będzie na ogół reprezentacją przywiedlną. Krotność występowania reprezentacji nieprzywiedlnych grupy G w iloczynie prostym łatwo wyznaczyć przy pomocy wzoru (10.54), jeśli tylko znamy charaktery reprezentacji nieprzywiedlnych, gdyż charakter elementu U w reprezentacji $D^{(\mu)}(U) \otimes D^{(\lambda)}(U)$ jest równy po prostu $\chi(U) = \chi^{(\mu)}(U) \chi^{(\lambda)}(U)$, zgodnie z wzorem (3.61). Ponumerujmy reprezentacje nieprzywiedlne występujące w iloczynie $D^{(\mu)} \otimes D^{(\lambda)}$ elementami ϱ wchodzącymi w skład pewnego zbioru liczb całkowitych $R_{\lambda\mu}$. Możemy napisać

$$[D^{(\mu)}(U) \otimes D^{(\lambda)}(U)]_{lm',jm} = \sum_{\varrho \in R_{\lambda\mu}} \sum_{\sigma,\tau=1}^{n_\varrho} a^{(\lambda\mu\varrho)}_{lm',jm;\sigma,\tau} D^{(\varrho)}_{\sigma,\tau}(U). \tag{10.95}$$

Wstawiając (10.95) do równania (10.94) i podobnie jak poprzednio sumując obie strony tegoż równania po wszystkich $U \in G$, dostajemy

$$M^{(\lambda,m)}_{n,\nu,i;n',\mu,j} = \frac{1}{n_\nu} \sum_{\varrho \in R_{\lambda\mu}} \delta_{\nu\varrho} \sum_{k,l,m'} a^{(\lambda\mu\nu)}_{lm',jm;ik} M^{(\lambda,m')}_{n,\nu,k;n',\mu,l}. \tag{10.96}$$

Bez dalszych już obliczeń widzimy, że wyrażenie (10.96) nie znika tylko wtedy, gdy $\nu \in R_{\lambda\mu}$. Innymi słowy wielkość $M^{(\lambda,m)}_{n,\nu,i;n',\mu,j}$ musi równać się zeru dla dowolnego wyboru

i, j oraz m, jeśli tylko iloczyn prosty reprezentacji $D^{(\lambda)}$ i $D^{(\mu)}$ nie zawiera w swym rozkładzie reprezentacji $D^{(\nu)}$.

Znaczenie tego wyniku najłatwiej ocenić rozpatrując szybkość przejść pomiędzy dwoma stanami układu kwantowomechanicznego niezmienniczego względem pewnej grupy symetrii. Przypuśćmy, że poziomy należą do odpowiednio ν-tej i μ-tej reprezentacji grupy symetrii. Wiadomo z mechaniki kwantowej, że jeśli operatorem indukującym przejście jest A_1, to szybkość przejścia jest proporcjonalna do

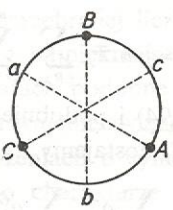
$$|(\psi_{n,\nu,i}, A_1 \psi_{n',\mu,j})|^2,$$

gdzie indeksy przy funkcjach falowych wprowadziliśmy w standardowy sposób. Jeśli operator A_1 transformuje się zgodnie z pewną reprezentacją λ grupy symetrii dla danego problemu, to widzimy, że o ile ν-ta reprezentacja nie zawiera się w iloczynie prostym reprezentacji μ-tej i reprezentacji λ, to przejście jest wzbronione. Ograniczenie to wynika wyłącznie z symetrii problemu.

Teoriá reguł wyboru w mechanice kwantowej wynika z tych rozważań. Na przykład niezmienniczy obrotowo układ atomowy (lub jądrowy) ma poziomy energetyczne, które, jak widzieliśmy, mogą być klasyfikowane zgodnie z nieprzywiedlnymi reprezentacjami grupy obrotów. Operator indukujący elektryczne przejścia dipolowe pomiędzy poziomami atomowymi jest proporcjonalny do wektora położenia elektronu $\mathbf{r}$, który transformuje się zgodnie z reprezentacją grupy obrotów o $l = 1$, jak to widzieliśmy w rozdziale 1. Na to, by elektryczne przejście dipolowe między poziomami l i l' było możliwe, trzeba, by reprezentacja grupy obrotów o wskaźniku l' była zawarta w rozkładzie iloczynu prostego reprezentacji l-tej i reprezentacji o $l = 1$. Badanie rozkładu iloczynu prostego reprezentacji jest więc niezwykle ważne dla zastosowań teorii grup w fizyce, gdyż pozwala na bezpośrednie podanie reguł wyboru grających centralną rolę w fizyce atomowej, jądrowej i fizyce cząstek elementarnych.

ZADANIA

1. Popatrzmy na rys. 10.3, gdzie trzy przedmioty A, B i C umieszczone są na obwodzie koła. Figura ta w oczywisty sposób jest niezmiennicza względem obrotów o 120° i 240° oraz względem odbić wyznaczonych przez proste a, b oraz c. Wykazać, że te pięć operacji wraz z przekształceniem tożsamościowym tworzą grupę. Sporządzić tabelkę mnożenia grupowego. Na jakie klasy rozpadają się elementy tej grupy?



Rys. 10.3

2. Rozpatrzmy grupę utworzoną z macierzy jednostkowej i macierzy spinowych Pauliego. Elementami grupy są $\pm I$, $\pm i\sigma_x$, $\pm i\sigma_y$ oraz $\pm i\sigma_z$, gdzie

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Jak wygląda tabelka mnożenia grupowego? Wyznacz wszystkie podgrupy oraz klasy. Czy są jakieś podgrupy inwariantne?

3. Wyznaczyć grupę symetrii składającą się z samych obrotów dla graniastosłupa prostego o podstawie kwadratowej. Wykazać, że grupa ta jest izomorficzna z grupą symetrii kwadratu, ale zawierającą nie tylko obroty, ale i odbicia. Jakie są klasy elementów sprzężonych? Wykazać, że istnieje podgrupa inwariantna. Wyznaczyć grupę ilorazową związaną z tą podgrupą inwariantną.

4. Wyznaczyć grupę symetrii obrotowych regularnego czworościanu, tj. czworościanu, którego ściany są trójkątami równobocznymi. Rozbić elementy tej grupy na klasy, do których one należą. Wyznaczyć wszystkie podgrupy. Czy jest jakaś podgrupa inwariantna?

5. Mamy dowolną grupę G i jej podgrupę H. Wykazać, że jeśli H ma indeks dwa, to podgrupa ta jest niezmiennicza. Przypominamy, że indeksem podgrupy jest stosunek rzędu grupy do rzędu podgrupy.

6. Wyznaczyć podgrupę grupy S_5 izomorficzną z grupą cykliczną rzędu 5. Dowieść izomorfizmu explicite, wykonując wszystkie potrzebne mnożenia elementów S_5.

7. Niech $(123 \ldots l)$ będzie cyklem o długości l. Dowieść, że jeśli $\lambda < l$, to $(123 \ldots l)^\lambda \neq e$ oraz że $(123 \ldots l)^l = e$.

8. Niech G i G' będą dwiema grupami. Wykazać, że w homomorfizmie G na G' elementy G odwzorowywane na jedynkę grupy G' tworzą podgrupę inwariantną H grupy G.

9. Wykazać, że grupa G' z poprzedniego zadania jest izomorficzna z grupą ilorazową G/H, gdzie H jest zdefiniowane w poprzednim zadaniu.

10a) Wykazać bezpośrednim rachunkiem, że

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

jest niezmiennicze przy obrotach o kąty Eulera α, β i γ. Dla odświeżenia pamięci o kątach Eulera patrz paragraf 1.4.

[*Wskazówka*: Zauważyć, że najogólniejszy obrót można złożyć z trzech prostszych obrotów.]

b) Określić, jak transformują się względem grupy obrotów wokół osi z-ów trzy składowe kwantowomechanicznego operatora momentu pędu [patrz równanie (5.86)].

11. Wykazać, że zbiór $P_n = \{1, x, x^2, \ldots, x^{n-1}\}$ przekształca się w siebie pod działaniem grupy translacji w jednym wymiarze. Oznaczając przesunięcie o wielkość a symbolem T_a (tzn. $T_a x = x - a$) wyznaczyć n wymiarową reprezentację grupy wszystkich jednowymiarowych translacji działającą w zbiorze P_n. Czy ta reprezentacja jest równoważna reprezentacji unitarnej? Pokazać explicite w przypadku reprezentacji trójwymiarowej, że $T_a T_b = T_{a+b}$.

12. Wykazać, że następujące trzy zbiory funkcji $\{\cos 3\theta\}$, $\{\sin 3\theta\}$ oraz $\{\cos 4\theta, \sin 4\theta\}$ transformują się każdy w siebie pod działaniem elementów grupy określonej w zadaniu 10.1. Jakie są reprezentacje i charaktery otrzymane z tych trzech zbiorów funkcji? Czy są to reprezentacje nieprzywiedlne? Co można powiedzieć o reprezentacji indukowanej przez zbiór $\{\cos 5\theta, \sin 5\theta\}$?

13. Wykazać, że jeśli C_i jest klasą zawierającą elementy $S_1, S_2, \ldots, S_{g_i}$, a C_i jest zbiorem

elementów składających się z S_1^{-1}, S_2^{-1}, ..., $S_{g_i}^{-1}$, to C_i' jest również klasą. Wykazać, że dla dowolnej reprezentacji nieprzywiedlnej, a więc niekoniecznie unitarnej, zachodzi

$$\sum_i g_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu)} = g\delta_{\mu\nu}, \qquad a_\mu = \frac{1}{g} \sum_i g_i \chi_i \chi_i^{(\mu)},$$

gdzie a_μ jest krotnością, z jaką μ-ta reprezentacja nieprzywiedlna występuje w reprezentacji (niekoniecznie nieprzywiedlnej), której charaktery równają się χ_i.

14. Wykazać, że dowolna macierz 2×2, która komutuje z trzema macierzami Pauliego podanymi w zadaniu 10.2, musi być wielokrotnością macierzy jednostkowej.

[*Wskazówka*: Wykazać, że dowolna macierz 2×2 może być zapisana jako kombinacja liniowa trzech macierzy Pauliego i macierzy jednostkowej.]

15. Wykazać, że najogólniejsza macierz unitarna, której wartości własne są 1 i -1, może być zapisana w postaci

$$U = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{i\phi} \\ \sin\theta e^{-i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}.$$

16. Wyznaczyć charaktery i reprezentacje nieprzywiedlne grupy omawianej w zadaniu 10.3.

[*Wskazówka*: Przy omawianiu reprezentacji nieprzywiedlnej o wymiarze dwa użyteczny być może wynik zadania 10.15.]

17. Korzystając z trójwymiarowej reprezentacji grupy obrotów podanej na przykład wzorami (1.25) wyznaczyć macierze trójwymiarowej reprezentacji grupy symetrii sześcianu, którą oznaczaliśmy w tekście literą $\mathcal{O}$. Przekonaliśmy się w paragrafie 10.8, że istnieją dwie trójwymiarowe reprezentacje grupy $\mathcal{O}$. Podaj prosty przepis na znalezienie macierzy należących do drugiej trójwymiarowej reprezentacji (tzn. tej, która nie jest dana bezpośrednio przez grupę obrotów).

18. Korzystając z wyników zadania 10.4 wyznaczyć charaktery i reprezentacje grupy symetrii obrotowych czworościanu.

19. Przypuśćmy, że mamy operator liniowy o symetrii sześcianu i poddajemy go słabemu zaburzeniu o symetrii graniastosłupa foremnego o podstawie kwadratowej. Korzystając z wyników zadania 10.16 i rozważań paragrafu 10.8 określić, jak rozszczepiają się różne możliwe zdegenerowane stany o symetrii sześcianu po włączeniu tego zaburzenia.

20. Rozpatrzmy operator liniowy A_0 o symetrii obrotowej. Przypuśćmy, że działa słabe zaburzenie o symetrii regularnego czworościanu. Korzystając z wyniku zadania 10.18 i rozważań paragrafu 10.8 wyznaczyć, jak rozszczepiają się pod działaniem tego zaburzenia cztery stany operatora A_0 o najniższej degeneracji (to znaczy jedno-, trój-, pięcio- i siedmiokrotnej).

21. Rozpatrzmy wszystkie możliwe reprezentacje grupy sześcianu $\mathcal{O}$ utworzone przez wzięcie iloczynów prostych różnych reprezentacji nieprzywiedlnych grupy $\mathcal{O}$. Wyznaczyć, ile razy każda reprezentacja nieprzywiedlna grupy $\mathcal{O}$ występuje w każdej z tych reprezentacji iloczynowych.

22. Spinową funkcję falową elektronu w mechanice kwantowej definiuje się przyjmując α dla spinu „w górę" i β dla spinu „w, dół"; α i β są wektorami ortonormalnymi. Dla układu trzech elektronów możemy tworzyć iloczynowe funkcje falowe o postaci $\alpha(1)\,\alpha(2)\,\alpha(3)$, $\alpha(1)\,\alpha(2)\,\beta(3)$, itd. Wszystkich możliwych takich iloczynów jest oczywiście $2^3 = 8$. Pod

działaniem elementów grupy S_3 funkcje te przekształcają się nawzajem w siebie i są do siebie ortogonalne. Tym samym tworzą one zbiór funkcji podstawowych dla reprezentacji grupy S_3. Wyznaczyć, ile razy różne reprezentacje nieprzywiedlne grupy S_3 występują w tej reprezentacji. Czy brakuje którejś z reprezentacji? Dlaczego? Podaj interpretację fizyczną faktów, na które się tu natknęliśmy.

23. Przypuśćmy, że wszystkie osiem iloczynów funkcji spinowych, na jakie natknęliśmy się w poprzednim zadaniu, są zdegenerowanymi funkcjami własnymi pewnego operatora A_0. Wyobraźmy sobie, że A_0 zaburzone jest operatorem o postaci $A_1 = AP_{12}+BP_{13}+CP_{23}$, gdzie operator P_{ij} zamienia współrzędną i na j, i odwrotnie. Na przykład

$$P_{12}\alpha(1)\beta(2)\alpha(3) = \alpha(2)\beta(1)\alpha(3).$$

Wykazać, że jeśli użyjemy reprezentacji S_3 podanych w paragrafie 10.7, to macierz, jaką należy diagonalizować dla obliczenia poprawek pierwszego rzędu do wartości własnej A_0, do której należy naszych osiem funkcji iloczynowych, może być zapisana w postaci

$$\begin{bmatrix} E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{11} & E_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{12} & E_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{11} & E_{12} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{12} & E_{22} \end{bmatrix}$$

gdzie $E = A+B+C$, $E_{11} = A-(B+C)/2$, $E_{12} = \sqrt{3}(B-C)/2$ i $E_{22} = -E_{11}$.

24. Gdybyśmy w poprzednim zadaniu użyli innej, ale unitarnie równoważnej dwuwymiarowej reprezentacji grupy S_3, to otrzymalibyśmy inne wartości elementów macierzowych E_{11}, E_{12} i E_{22}. Czy wpłynęłoby to na wartości własne macierzy z zadania 10.23? Dlaczego?

LITERATURA POMOCNICZA

J. D. Dixon *Problems in Group Theory*. Blaisdell, Waltham–Mass 1967. Jest to zbiór z rozwiązaniami.

W. Ledermann *The Theory of Finite Groups*. Interscience, New York 1964.

M. Hamermesh *Group Theory*. Addison-Wesley, Reading–Mass. 1962.

M. Tinkham *Group Theory and Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York 1964.

H. Weyl *Theory of Groups and Quantum Mechanics*. Methuen, London 1931.

E. P. Wigner *Group Theory*. Academic Press, New York 1959.

SKOROWIDZ DO TOMU PIERWSZEGO

Antykomutator 132
atom helu 175-176
— wodoru 175

Baza 9, 10, 20, 87, 91, 92, 93, 95, 100, 101, 114, 115, 126, 127, 128, 132
— kartezjańska 9-11
— lewoskrętna 9
— prawoskrętna 9
Bernoulli Jakub 52
Bernoulli Johann 46
Bernoulliego liczby 135
Bessela funkcje 255-256, 285
— nierówność 141, 143, 212, 232
— równanie 285-286
Bohra promień 175
Bohr Niels 8
Born Max 277
brachistochrona 46, 51, 81

Całka prawdopodobieństwa 242
Cauchy'ego ciąg 206
— kryterium zbieżności 209
— nierówność 143
ciało 84, 87, 93
Cramera wzory 113
Czebyszewa równanie 259-260
— wielomiany 257-258, 260, 262
częstość normalna 180

De Moivre'a wzór 131
diagonalizacja 158-164
Diraca funkcja delta 135, 214-219, 222, 238, 241, 283, 284
— macierze 134
Dirac, P. A. M. 222
dopełnienie zbioru 172
drgania normalne 176-183

dyspersja 273
dywergencja 26-28, 34, 40

Einsteina umowa sumacyjna 11, 81, 88, 110
Eulera kąty 13, 16
Eulera–Lagrange'a równanie 47, 49-50, 55-56, 67, 69-70, 75, 77, 82, 168

Fermata zasada 80
Fermiego–Diraca funkcja rozkładu 135
Fouriera funkcje 207
— szereg 229-235, 281
— transformata 236-242, 269, 282, 283
— twierdzenie całkowe 173
— — o splocie 239
funkcja analityczna 33
— delta *patrz* Diraca funkcja delta
— falowa 268
— harmoniczna 33, 248
— odcinkami gładka 232
— tworząca 249, 263
— własna *patrz* wektor własny
funkcje całkowalne z kwadratem 173
— kuliste 242-246
— trygonometryczne 219, 229-236

Gaussa funkcja rozkładu 217, 241
— twierdzenie 27, 42

Gegenbauera równanie 259, 260
— wielomiany 257, 259, 260, 262, 284
gęstość lagrangianu 68
— prawdopodobieństwa 277
Gibbsa zjawisko 234, 281-282
gradient 25-26, 34
Grama–Schmidta proces ortogonalizacji 143-145, 153, 165, 224-255
Greena twierdzenie 42, 284

grupa 84
— abelowa 85, 86, 131
— ciągła 85

Hadamarda nierówność 145
Hamiltona zasada 62, 68, 70, 72, 79
hamiltonian *patrz* operator Hamiltona
Helmholtza równanie 32, 33, 43
Heremite'a równanie 259-260
— wielomiany 125, 249-251, 259, 262, 284
Hilberta przestrzeń 202, 207

Iloczyn skalarny 10, 17, 28, 38, 139-140, 156, 196, 204-205
— wektorowy 19
— wewnętrzny *patrz* iloczyn skalarny
inwersja 21, 152
izoareometryczny problem 80
izometria 150-153
izomorfizm 93-95, 104
izoperymetryczny problem 54-61, 70

Jacobiego równanie 259-260
— wielomiany 256, 262
jądro odwzorowania *patrz* przestrzeń zerowa odwzorowania

Keplera prawa 22-24
Kleina-Gordona równania 82
komutacja macierzy 104-105, 132, 158, 162, 164
— operatorów 147, 274, 276
komutacyjne reguły 122-123, 193
komutator 97, 103, 123, 132, 147, 193
konwulcja *patrz* splot funkcji
Kroneckera delta 10, 20, 37
— iloczyn 126-131, 134
krotność algebraiczna 117
— geometryczna 117
krzywa łańcuchowa 52-53
kwaterniony 199

Lagrange'a mnożnik 55-58, 65, 71, 80, 169-171, 174
— równania 62, 82, 178
lagrangian 61-65, 68, 70, 75, 78-79, 178, 180
Laguerre'a równanie 259
— wielomiany 258, 262
— — stowarzyszone 258, 262
Laplace'a równanie 32-33, 69, 246, 281
laplasjan 32-34, 248
Legendre'a funkcje drugiego rodzaju 228
— — stowarzyszone 244-246
— równanie 227-228, 245, 260, 286
— — stowarzyszone 245-246
Legendre'a wielomiany 40, 219, 223-228, 245, 258, 262, 280, 281, 286
Leibnitza wzór 227-228, 245
Lebesgue'a całka 206
liniowa niezależność wektorów 88-92
Lorentza grupa 197
— macierz 154-157
— metryka 140
— transformacja 19, 154-156, 197

Macierz 12, 99-106
— antysamosprzężona 157, 196
— antysymetryczna 106, 132, 133, 198
— diagonalna 105, 118, 132, 133, 134, 140, 159-161, 176
— idempotentna 105, 132
— izometryczna 196
— kwadratowa 101
— nieosobliwa 106, 133
— obrotu 12, 14, 15, 96, 133, 154
— odwrotna 111-113, 132, 133, 134, 196
— ortogonalna 152, 155, 164
— osobliwa 106, 132, 133
— samosprzężona 155, 157, 196
— sprzężona hermitowsko 105
— — klasycznie 111
— symetryczna 106, 156
— transponowana 14, 105
— unitarna 155, 158, 160-161, 196
Maxwella równania 35-36, 42-43, 82-83, 283
mimośród krzywej 23
Minkowskiego przestrzeń 34, 154

Newtona prawa 18, 22, 168
niezmienniki adiabatyczne 159
Noether twierdzenie 72
norma wektora 139, 145, 205

Operator anihilacji 126, 149, 194, 200
— antyhermitowski 157
— antysymetryczny 157
— d'Alemberta 34
— Hamiltona 116, 122-123, 149, 163, 174-175, 199, 200, 268, 274, 275, 280, 289
— hermitowski 123, 147, 148-149, 169, 177, 251-252, 274, 285, 286
— kreacji 126, 149, 194, 200
— momentu pędu 246, 269, 279-280
— parzystości 257
— przesunięcia 135
— rzutowy 265
— samosprzężony 146-174, 164, 267
— symetryczny 147
— transponowany 156

operator unitarny 177
operatory różniczkowe 24-36
ortogonalności warunek 12
ortonormalny zbiór 9, 140, 141, 144, 151, 203-263, 285, 286
oscylator harmoniczny 122-126, 134, 149, 174-175, 197, 198, 199, 251, 268

Parsevala równość 142, 151, 212, 284
— twierdzenie 238
Pauliego macierze spinowe 120, 132, 134
pęd uogólniony 63
Poissona równanie 32, 33
pole 24
— skalarne 24, 28, 32, 33, 34, 35, 42
— wektorowe 24, 28, 32, 33, 34, 35, 42
potencjał wektorowy 83, 200
prawo relatywistycznego dodawania prędkości 197
przekształcenie izometryczne 150, 153, 154
— liniowe 96-97, 104, 114-115
— — normalne 157
— — odwrotne 98, 106, 114, 132
— ortogonalne 12, 17, 36, 150, 152
— podobieństwa 114-115, 161, 164
— symetryczne 146-148, 157
— unitarne 150, 161, 164
przestrzeń euklidesowa 139, 143
— funkcyjna 204
— unitarna 139, 148
— wektorowa 87
— — czterowymiarowa 199
— zerowa odwzorowania 122
— z iloczynem wewnętrznym 137
pseudoskalar 22, 108
pseudowektor 22, 38
punkt siodłowy 33

Rachunek wariacyjny 45
— zaburzeń 183-195
rekurencyjne związki 250
reprezentacja grupy 94
Riemanna całka 205
— funkcja zeta 233
Riesza–Fischera twierdzenie 207
Rodriguesa wzór 225
rotacja 29-31, 35
rozkład jedności 267
równanie charakterystyczne 116, 118, 120
— dyfuzji 32
— falowe 33, 34, 69, 283
— przewodnictwa cieplnego 32
rząd macierzy 122
rzut wektora 11

Schrödingera równanie 71, 81, 116, 122, 274
Schwarza nierówność 143
skalar 7-9, 84
Sneliusa prawo 80
splot funkcji 239
sprzężenie zespolone 71
stany stacjonarne 277
Stieltjesa całka 265
Stirlinga wzór 218
Sturma–Liouville'a układ 228, 251-263, 285
ślad macierzy 115-116, 118, 133
— tensora 41

Taylora szereg 222
tensor 33–41
— antysymetryczny 38
— elektromagnetyczny energii-pędu 44
— kartezjański 17, 33-41
— kowariantny 19
— momentu bezwładności 39
— — kwadrupolowego 41
— — multipolowego 40
— pola elektromagnetycznego 43
— polaryzacji elektrycznej 39
— symetryczny 38
tensora kontrakcja 33
— składowe 33
twierdzenie o wiriale 196
— o zupełności *patrz* zupełność
— spektralne 267

Ultrakuliste wielomiany *patrz* Gegenbauera wielomiany
uogólnione współczynniki Fouriera 211

Wartość oczekiwana 149, 273, 287
— własna 71, 116-117, 119-125, 133, 134, 149, 152-161, 163-168, 170-175, 189-196, 198, 199, 200, 248, 254-255, 257, 259, 264-280, 287, 288
Weierstrassa twierdzenie 219-223, 229, 242, 249, 263
wektor 7-8, 16-17
— aksjalny *patrz* pseudowektor
— polarny 21
— stanu 268
— własny 116-117, 119-125, 133, 134, 149, 152-157, 158-159, 162-168, 170-175, 189-196, 199, 200, 248, 254-255, 268-269, 272, 287, 288
wielomian charakterystyczny 116, 118, 158-159
więzy 54-61
widmo 117, 162, 172, 173, 267, 288
— ciągłe 173, 267, 272
— zdegenerowane 117, 162, 189-195, 199

współczynniki rozwinięcia *patrz* uogólnione współczynniki Fouriera
współrzędne krzywoliniowe 24-25, 27, 32, 34
— uogólnione 177
wymiar przestrzeni wektorowej 91-92
wyznacznik 106-113, 115, 121, 133, 140, 145, 152
Zasada zachowania momentu pędu 79
zbieżność 207, 209-212, 222, 285
zbiór ortonormalny zupełny 141, 143-145, 151, 162, 210, 212, 223, 225, 231, 243-244, 263, 285
zupełności warunek 212, 238
zupełność 140, 207-214, 219, 223, 262, 285

SKOROWIDZ DO TOMU DRUGIEGO

Amplituda rozpraszania 116, 137, 187-189, 207, 268
atom wodoru 77, 237, 261-262

Babineta zasada 137
Banacha przestrzeń 169-170, 202, 207, 208, 209
Bessela funkcje 72-74, 77, 135, 156, 161
— — sferyczne *patrz* sferyczne funkcje Bessela
— — zmodyfikowane 74
— nierówność 183
— równanie 72-74, 77, 153
Bohra promień atomu wodoru 112, 236
Bolzano–Weierstrassa twierdzenie 198
Borna przybliżenie 117, 202, 251, 268
— szereg 165, 167, 184-186, 194-195, 203, 204

Cauchy'ego ciąg 169, 209, 216
Cauchy'ego–Goursata twierdzenie 28-30, 51
Cauchy'ego–Riemanna równanie 11-12, 78, 80
— twierdzenie 26, 31
— wartość główna *patrz* wartość główna całki
— wzór całkowy 32-34, 79
Cayleya twierdzenie 279-280
charakter 299, 314, 334
cięcie gałęziowe 19, 67, 85
cykle rozłączne 277

Diraca funkcja delta 97-99, 142, 165, 203
— macierze 8
dyfrakcja 130-137
dyspersyjne związki 41-50, 82
— — Kramersa–Kroniga 46
— — z jednym odjęciem 48

Element odwrotny 270-271
— sprzężony 284
energia wiązania 203, 235
Eulera kąty 333

Fale kuliste 115, 129, 132–137, 146, 159
fotony 134
Fouriera całka 141, 258–259
— szereg 141, 200
— transformata 43, 84, 100, 101, 109, 110, 157, 159, 160, 258, 269
— twierdzenie o splocie 43
Fredholma alternatywa 192, 224, 239, 242
— metoda 263-265, 266
— wyznacznik 264
funkcja analityczna 7-14
— beta 69
— błędu 158
— całkowita 12
— delta *patrz* Diraca funkcja delta
— falowa 203, 204, 207, 334
— gamma 69
— harmoniczna 13, 78
— meromorficzna 56, 65, 193, 242
— schodkowa 85
— signum 99
— trygonometryczna 77
— własna *patrz* wektor własny
funkcjonał linowy 189, 207, 208

Gaussa rozkład 142-143
Greena funkcja 87-161, 242
— — opóźniona 152-153
— twierdzenie 26-27, 109, 159
grupa 270-271
— abelowa 271, 310
— ciągła 290
— cykliczna 272-273, 315, 333
— ilorazowa 286-287, 333
— izomorficzna 272-275, 318, 333
— obrotów 296-298, 311, 326-329, 334
— permutacji 276-282, 333
— prosta 286
— transformacji 290
— translacji 333

Hadamarda nierówność 264
hamiltonian 138, 186, 293
Hankela funkcja 74
harmoniki sferyczne 112, 117, 126, 156, 235
Heaviside'a funkcja 88
Hermite'a funkcja 268
— równanie 77
— wielomiany 76-77, 86, 268
Hilberta para transformat 38, 81, 82
— przestrzeń 168, 176, 196, 199-200
Holdera nierówność 203
homomorfizm 333

Iloczyn wewnętrzny 299
indeks podgrupy 333
izometria 212, 252-259

Jądro operatora 88, 164, 183-202, 203, 218, 259, 260, 261, 265, 266, 267
— separowalne 183-189
— skończonego rzędu 189
Jordana lemat 64

Kąt rozpraszania 117, 188
klasa 284, 314, 332, 333
— identyczności 314-315
— równoważności *patrz* klasa
Kleina–Gordona równanie 160
Kroneckera iloczyn 295

Lagrange'a mnożnik 231, 260
— twierdzenie 283
Laguerre'a równanie 77, 85
— wielomiany 76-77, 85
Langevina funkcja 70
Laplace'a równanie 12, 158
laplasjan 158, 333
Laurenta rozwinięcie 53-57
— twierdzenie 51-52
Legendre'a równanie 77
— wielomiany 74-77, 126, 156, 248
Leibnitza reguła 120
liczby hiperzespolone 8
— zespolone 7-8
Liouville'a twierdzenie 35, 79-80
Lippmana–Schwingera równanie 114, 116, 137, 145, 155, 156, 157, 159, 204, 205, 247
Lipschitza warunek 179-181
Lorentza grupa 311

Macierz diagonalna 263
— hermitowska 91
Maxwella równania 78
metoda funkcji wagowej 205
Minkowskiego nierówność 203
moduł 9, 251
Morera twierdzenie 80

Neumanna funkcje 74
— szereg *patrz* szereg Borna
norma funkcjonału liniowego 208
— operatora 168-172, 202, 203, 260, 267
— wektora 168

Obszar jednospójny 30
— wielospójny 30
odwzorowanie konforemne 80
— odwrotne 258
— unitarne 252-259
operator całkowy 164
— hermitowski 153, 158, 186
— idempotentny 171
— rzutowy 171-172, 200, 221
— samosprzężony 158
operatory zwarte 195-202
— — hermitowskie 210-222, 225, 259, 261, 262
oscylator anharmoniczny 180-182, 206
— harmoniczny 77, 206
— — tłumiony 100

Pauliego macierze spinowe 332, 334
Peano aksjomaty 8
permutacje 276-282
pochodne funkcji analitycznych 34-35
podgrupa 275, 332, 333
— inwariantna 285-287
— regularna 281
— sprzężona 285
podstawowe twierdzenie algebry 36
— — analizy 31
Poissona równanie 111, 131
— wzór 80
potencjał kulombowski 112, 117, 176, 235
propagator 140
przedłużenie analityczne 58
przestrzeń dualna 189, 208
— pędów 111, 116
przybliżenie eikonalne 205
— skończonego rzędu 231-239
punkt rozgałęzienia funkcji 19, 67, 85

Reguły wyboru 332
reprezentacja antysymetryczna 318
— grupy 293
— nieprzywiedlna 298-299, 301-304, 306-310, 318, 325-331, 333, 334
— przywiedlna 298, 303
— regularna 293
— unitarna 299-301, 306, 319, 333
rezolwenta operatora 193, 223, 265, 266

Riemanna funkcja dzeta 71
— płaty 17-23, 78, 79
— powierzchnia 19, 78, 79, 207
Riesza–Fischera twierdzenie 169
rozpraszanie 114, 205
równania liniowe 222-231
równanie całkowe drugiego rodzaju 163
— — pierwszego rodzaju 163
— dyfuzji 143
— falowe 150, 160
— przewodnictwa cieplnego 138, 143, 157, 158
Rutherforda różniczkowy przekrój czynny 117

Schläfli wzór całkowy 75, 76
Schrödingera równanie 111-112, 114-115, 118, 125, 128, 138, 144-145, 155, 156, 158, 159, 175-177, 186, 196, 207, 235, 261-262, 322
Schura lematy 301-308
Schwartza nierówność 174, 203
sferyczna funkcja Bessela 74, 118, 120-129, 156
— — Hankela 120-127
— — Neumanna 118, 120-127
Simpsona reguła 263
spinowa funkcja falowa 334, 335
stała dielektryczna 47
stan związany 207, 261, 268
Stokesa twierdzenie 27
Sturma–Liouville'a układ 74, 77

Taylora rozwinięcie 57-58
— twierdzenie 56
teoria residuów 59-71, 82, 83, 84, 266
— zaburzeń 222-231, 323-326, 334, 335
— — Rayleigha–Schrödingera 230
transformacja liniowo ograniczona 170
— sprzężona 190-192
twierdzenie o residuach 59
— o wartości średniej 79, 80
— spektralne 221, 222

Unormowana przestrzeń wektorowa 168
— — — zupełna 169

Volterry równanie całkowe 164, 167, 178

Warstwa 282-288
wartość główna całki 37-41
— własna 149, 185, 211-223, 232-238, 259-263 269, 302-303, 334, 335
warunek przyczynowości 42
— rzeczywistości 45
Weierstrassa twierdzenie 196
wektor własny 147, 149, 211-223, 259, 260, 261 262, 269, 302-303
wielomian 35, 79, 196, 197
wrońskian 106, 154
współczynnik absorpcji 47
— załamania 46-50
wyznacznik 263, 264, 267

Yukawy potencjał 112, 117, 176-177, 188

Zasięg efektywny potencjału 189
— — rozpraszania 189
zbieżność jednostajna 56
— w sensie normy 168, 171-172
— — — średnim 216
związki ortogonalności 309-310, 316

PAŃSTWOWE
WYDAWNICTWO NAUKOWE

Wydanie II. Nakład 10 000+150 egz. Ark. wyd. 22,5. Ark. druk. 21,5. Papier piśmienny III kl. 70 g, 70×100. Oddano do reprodukcji w czerwcu 1975 r. Podpisano do druku w październiku 1975 r. Druk ukończono w grudniu 1975 r.
Zamówienie nr 1886
Cena zł 68.—

BIAŁOSTOCKIE ZAKŁADY GRAFICZNE w Białymstoku