## Глава 10

# ОБЫКНОВЕННЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Операторы $-id/dx$ и $-(d/dx)^2$ на $\mathbb{R}$; регулярные и особые операторы Штурма — Лиувилля; концевые точки типа предельной точки и типа предельной окружности; метод Фробениуса; формулы для резольвенты и спектральных проекторов; разложения по собственным функциям; радиальные уравнения водородоподобного атома в нерелятивистском и релятивистском случаях.

*Предварительные сведения:* гл. 1—9.

В этой главе кратко излагаются основы теории обыкновенных дифференциальных операторов второго порядка, в значительной степени развитой Германом Вейлем.

## 10.1. РЕЗОЛЬВЕНТА И СПЕКТРАЛЬНОЕ СЕМЕЙСТВО ДЛЯ ОПЕРАТОРА $-id/dx$

Обозначим через $T_0$ оператор, определенный для всех распределений $f$ на $\mathbb{R}$ посредством уравнения

$$T_0 f = -if'. \tag{10.1.1}$$

В гильбертовом пространстве $L^2(\mathbb{R})$ мы определим оператор $A$:

$$\boldsymbol{D}(A) = \{f \in L^2 \colon\ f' \in L^2\}, \quad Af = T_0 f = -if'. \tag{10.1.2}$$

В § 7.5 показано, что $A$ является самосопряженным оператором. Отметим, что в соответствии с § 5.6 любое $f$ в $\boldsymbol{D}(A)$ автоматически удовлетворяет граничному условию $f(x) \to 0$ при $x \to \pm\infty$.

Точечный спектр $P\sigma(A)$ является пустым, ибо если $\lambda$ — собственное значение, то собственной функцией будет $Ce^{-i\lambda x}$ ($C = \text{const} \neq 0$), которая не принадлежит $L^2$ ни при каком $\lambda$. С другой стороны, для любого вещественного $\lambda$ можно построить приближенную собственную функцию в виде волнового пакета

$$f(x) = \beta^{1/4} e^{-\beta x^2} e^{i\lambda x} \quad (\beta > 0).$$

Когда $\beta \to 0$, $\|f\|$ постоянна, тогда как $\|Af - \lambda f\| \to 0$. Следовательно, непрерывный спектр $C\sigma(A)$ заполняет всю вещественную ось в плоскости $\lambda$.

Для того чтобы найти резольвенту, мы допустим, что $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$, и будем искать решение $f$ уравнения

$$Af - \lambda f = g, \quad \text{т. е.} \quad -if' - \lambda f = g, \tag{10.1.3}$$

где $g$ — произвольный элемент из $L^2(\mathbb{R})$. Это решение таково:

$$f(x)=(R_\lambda g)(x)=\begin{cases} i\int\limits_{-\infty}^{x} e^{i\lambda(x-x')}g(x')\,dx', & \operatorname{Im}\lambda>0,\\ -i\int\limits_{x}^{\infty} e^{i\lambda(x-x')}g(x')\,dx', & \operatorname{Im}\lambda<0.\end{cases} \tag{10.1.4}$$

Следовательно, резольвента $R_\lambda$ является интегральным оператором.

Упражнения

1. Покажите, что $\|f\|\leqslant|\operatorname{Im}\lambda|^{-1}\|g\|$, т. е. что $\|R_\lambda\|\leqslant|\operatorname{Im}\lambda|^{-1}$. Это обеспечивает второе доказательство того, что $A$ самосопряжен; именно, при $\operatorname{Im}\lambda\neq 0$ оператор $(A-\lambda)^{-1}$ определен во всем $L^2$ и ограничен, следовательно, верхняя и нижняя полуплоскости входят в резольвентное множество (см. § 8.6).

2. Покажите, что если $g$ имеет ограниченный носитель, то $\|f\|(=\|R_\lambda g\|)\leqslant$ $\leqslant\mathrm{const}\cdot|\operatorname{Im}\lambda|^{-1/2}$, где постоянная зависит от $g$, но не от $\lambda$. *Указание.* Выполните преобразование Фурье и вспомните, что $\|\hat f\|=\|f\|$.

3. Интегрируя $R_\lambda$ по подходящему контуру в плоскости $\lambda$ (см. § 9.6), покажите, что для $s<t$ $E_t-E_s$ является интегральным оператором вида

$$((E_t-E_s)g)(x)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{it(x-x')}-e^{is(x-x')}}{2\pi i(x-x')}g(x')\,dx'. \tag{10.1.5}$$

## 10.2. РЕЗОЛЬВЕНТА И СПЕКТРАЛЬНОЕ СЕМЕЙСТВО ДЛЯ ОПЕРАТОРА $-(d/dx)^2$

Здесь оператор $T_0$ задается уравнением $T_0f=-f''$, где $f$ — любое распределение на $\mathbb{R}$. Самосопряженный оператор $A$ определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{D}(A)=\{f\in L^2:\ f''\in L^2\},\quad Af=T_0f=-f''. \tag{10.2.1}$$

Из рассуждений, аналогичных проведенным в предыдущем параграфе, видно, что точечный спектр оператора $A$ пуст и что непрерывный спектр заполняет неотрицательную вещественную ось. Для любого $\lambda$, не лежащего на неотрицательной вещественной оси, уравнение $Af-\lambda f=g$ можно разрешить и найти

$$f(x)=(R_\lambda g)(x)=(1/(2k))\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-k|x-x'|}g(x')\,dx', \tag{10.2.2}$$

где $k=\sqrt{-\lambda}$, $\operatorname{Re}k>0$.

Упражнения

1. Интегрируя резольвенту по подходящему контуру в плоскости $\lambda$, покажите, что спектральный проектор $E_t$ дается формулой

$$(E_t g)(x)=\begin{cases}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\sqrt{t}\,|x-x'|}{\pi\,|x-x'|}\,g(x')\,dx', & t\geqslant 0,\\ 0, & t\leqslant 0.\end{cases} \qquad (10.2.3)$$

2. Проверьте непосредственно, что

$$E_t E_s = E_{\min(t,\,s)}.$$

## 10.3. МЕТОД ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ

Пусть $T_0$ является либо одним из операторов, рассмотренных в последних двух параграфах, либо любым обыкновенным дифференциальным оператором, который имеет постоянные коэффициенты и представляется в виде

$$T_0 = p(-id/dx), \qquad (10.3.1)$$

где $p(k)$ — вещественный полином от вещественного $k$. Мы определим некоторый оператор в $L^2(\mathbb{R})$ следующим образом:

$$\begin{aligned} D(A) &= \{f\in L^2:\ T_0 f\in L^2\},\\ Af &= T_0 f = p(-id/dx)f. \end{aligned} \qquad (10.3.2)$$

Если $\hat{f}(k)$ — преобразование Фурье любого распределения медленного роста $f(x)$ на $\mathbb{R}$, то $k\hat{f}(k)$ является преобразованием Фурье от $(-id/dx)f(x)$, а $p(k)\hat{f}(k)$ — преобразованием Фурье от $p(-id/dx)f(x)$. Следовательно, если $\mathcal{F}$ — унитарный оператор преобразования Фурье в $L^2(\mathbb{R})$, так что $\hat{f}=\mathcal{F}f$, и если $\hat{A}=\mathcal{F}A\mathcal{F}^*$, то определение (10.3.2) принимает вид

$$D(\hat{A})=\{\hat{f}\in L^2:\ p(k)\hat{f}\in L^2\},\qquad \hat{A}\hat{f}=p(k)\hat{f}. \qquad (10.3.3)$$

Ясно, что $\hat{A}$ самосопряжен, а следовательно, $A$, равный $\mathcal{F}^*\hat{A}\mathcal{F}$, также самосопряжен.

Преобразование Фурье уравнения $Af-\lambda f=g$ есть $\hat{A}\hat{f}-\lambda\hat{f}=\hat{g}$; следовательно, если $R_\lambda$ является резольвентой $A$, то оператор $\hat{R}_\lambda=\mathcal{F}R_\lambda\mathcal{F}^*$ есть резольвента оператора $\hat{A}$, и ясно, что

$$(\hat{R}_\lambda\hat{g})(k)=\hat{g}(k)/(p(k)-\lambda). \qquad (10.3.4)$$

Если $C(t+)$ — контур, описанный в § 9.6, то

$$\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{C(t+)}\frac{1}{p(k)-\lambda}\,d\lambda=\begin{cases}1 & \text{при}\quad p(k)\leqslant t,\\ 0 & \text{при}\quad p(k)>t,\end{cases} \qquad (10.3.5)$$

поэтому проектор $\hat{E}_t$ дается формулой

$$(\hat{E}_t\hat{g})(k)=\begin{cases}\hat{g}(k) & \text{для всех таких } k, \text{ что } p(k)\leqslant t,\\ 0 & \text{для всех таких } k, \text{ что } p(k)>t.\end{cases}\qquad(10.3.6)$$

Точнее говоря, это уравнение определяет $\hat{E}_t\hat{g}$ каждый раз, когда $\hat{g}$ — непрерывная функция, но непрерывные функции плотны в $L^2$ и результирующий оператор ограничен, так что $\hat{E}_t$ определен во всем $L^2$ согласно теореме о расширении, сформулированной в начале гл. 7. Спектральные проекторы для $A$ определяются теперь следующим образом:

$$E_t=\mathcal{F}^*\hat{E}_t\mathcal{F}.$$

Побочный результат: если $f$ принадлежит области $\boldsymbol{D}(A)$, определенной в (10.3.2), то все производные $f'$, ..., $f^{(m)}$ принадлежат $L^2(\mathbb{R})$, где $m$ — степень полинома $p(\cdot)$. Чтобы это доказать, заметим сначала, что поскольку $p(k)\hat{f}$ принадлежит $L^2$, $|p(k)|\hat{f}$ также принадлежит $L^2$, следовательно,

$$c_1\hat{f}+c_2|p(k)|\hat{f}$$

принадлежит $L^2$. Теперь выберем $c_1$ и $c_2$ так, что

$$|k^r|<c_1+c_2|p(k)|$$

для всех $k$ и для $r=1, \ldots, m$. Так как $\hat{f}$ принадлежит $L^2(\mathbb{R})$, а значит, заведомо принадлежит $L^2(-K, K)$, $K$ конечно, то распределение $k^r\hat{f}$ принадлежит $L^2(-K, K)$ для любого $r$, и лемма в § 5.5 показывает, что

$$\|k^r\hat{f}\|\leqslant\|c_1\hat{f}+c_2|p(k)|\hat{f}\|$$

для каждого $K$. Правая часть остается ограниченной при $K\to\infty$, следовательно, $k^r\hat{f}\in L^2$, а значит, и $f^{(r)}$ принадлежит $L^2$, что и требовалось доказать.

Метод преобразования Фурье используется в следующей главе для изучения оператора Лапласа и некоторого интегродифференциального оператора.

Мы заключаем этот параграф некоторыми замечаниями об операторе преобразования Фурье $\mathcal{F}$. В случае $n$ измерений

$$(\mathcal{F}f)(\mathbf{x})=\hat{f}(\mathbf{x})=(2\pi)^{-n/2}\int\limits_{\mathbb{R}^n}\!\!\ldots\!\int e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}'}f(\mathbf{x}')\,dx_1'\ldots dx_n'.\qquad(10.3.7)$$

Его резольвентой (для $\lambda^4\neq 1$) является

$$f(\mathbf{x})=(R_\lambda g)(\mathbf{x})=\frac{1}{1-\lambda^4}\left[\lambda^2\hat{g}(\mathbf{x})+\hat{g}(-\mathbf{x})+\lambda^3 g(\mathbf{x})+\lambda g(-\mathbf{x})\right],\qquad(10.3.8)$$

ибо легко видеть, что тогда $\mathcal{F}f-\lambda f=g$, если вспомнить, что $\hat{\hat{g}}(x)=g(-x)$.

Упражнение

1. Формула (10.3.8) показывает, что вся плоскость $\lambda$, кроме точек $\lambda=\pm 1$, $\pm i$, является резольвентным множеством оператора преобразования Фурье $\mathcal{F}$. Поэтому соответствующее разложение единицы $F_z$, определенное на единичной окружности $|z|=1$ (см. (9.10.7)), является ступенчатой функцией со скачками в точках $z=\pm 1$, $\pm i$; скачки суть проекторы $P_1$, $P_{-1}$, $P_i$, $P_{-i}$. Найдите эти проекторы и проверьте, что

$$\mathcal{F}=\sum_{z=1,\, i,\, -1,\, -i} zP_z,\quad I=\sum_{z=1,\, i,\, -1,\, -i} P_z.$$

Покажите, что этот оператор $\mathcal{F}$ не является преобразованием Кэли самосопряженного оператора $A$, но таковым является $\sqrt{i}\,\mathcal{F}$. Найдите $A$. Найдите также собственные функции оператора $\mathcal{F}$ в одномерном случае, для чего сначала покажите, что гауссиан соответствующей ширины инвариантен относительно преобразования Фурье, затем покажите, что если $f(x)$—собственная функция, то $f'(x)\pm xf(x)$—также собственная функция, и используйте свойства функций Эрмита.

## 10.4. РЕГУЛЯРНЫЙ ОПЕРАТОР ШТУРМА — ЛИУВИЛЛЯ

Допустим, что $p(x)$ и $q(x)$—вещественные функции из классов $C^1$ и $C$ соответственно для $a\leqslant x\leqslant b$ и что $p(x)>0$. Обозначим через $T_0$ оператор

$$T_0 f=-(pf')'+qf. \tag{10.4.1}$$

Согласно § 5.4, если $f$ принадлежит $L^2$, то $pf'$ и $qf$ являются распределениями, а поэтому и $T_0 f$—также распределение (но не обязательно принадлежащее $L^2$). Рассмотрим граничные условия

$$\alpha f(a)+\beta f'(a)=0,\quad \gamma f(b)+\delta f'(b)=0, \tag{10.4.2}$$

где $\alpha$, $\beta$, $\gamma$, $\delta$—вещественные постоянные, причем $\alpha$ и $\beta$ не являются одновременно нулями ($\gamma$ и $\delta$ также не являются одновременно нулями). Оператор $A$ типа Штурма—Лиувилля в гильбертовом пространстве $L^2=L^2(a, b)$ теперь определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{D}(A)=\{f\in L^2\colon T_0 f\in L^2,\ f \text{ удовлетворяет } (10.4.2)\}, \tag{10.4.3}$$

$$Af=T_0 f,\quad f\in \boldsymbol{D}(A). \tag{10.4.4}$$

[Заметим, что поскольку $f\in L^2$, $qf\in L^2$, откуда $(pf')'\in L^2$, а следовательно, $f'$—непрерывная функция и граничные условия (10.4.2) имеют смысл.] Методом § 7.5 легко показать, что $A$ самосопряжен. Будет показано, что $A$ имеет чисто точечный спектр с собственными значениями $\lambda_j$, такими, что $|\lambda_j|\to\infty$ при $j\to\infty$ (на самом деле $\lambda_j\to+\infty$). Будет показано, что резольвентой оператора $A$ является компактный интегральный оператор, ядром которого является функция Грина оператора $A-\lambda$; согласно § 8.6, существование резольвенты для всех невещественных $\lambda$ дает другое доказательство самосопряженности $A$, поскольку он, очевидно, симметричен.

Симметрия $A$ является следствием *формальной самосопряженности* $T_0$, под которой имеют в виду, что если интегрирование по частям справедливо, то

$$\int_a^b fT_0g\,dx=\int_a^b gT_0f\,dx+\text{Граничные члены.} \qquad (10.4.5)$$

Иногда вводят в качестве третьего коэффициента функцию $r(x)$, считая ее непрерывной и положительной на $[a, b]$, и записывают уравнение для собственных значений в более общей форме:

$$-(pf')'+qf=\lambda rf. \qquad (10.4.6)$$

Это эквивалентно введению оператора $S_0$, определяемого так:

$$S_0f=(1/r)[-(pf')'+qf], \qquad (10.4.7)$$

который формально самосопряжен в гильбертовом пространстве $L^2_\sigma(a, b)$, где мера $\sigma$ задана посредством $d\sigma(x)=r(x)\,dx$, так что скалярное произведение имеет вид

$$(f, g)=\int_a^b \overline{f(x)}\,g(x)\,r(x)\,dx. \qquad (10.4.8)$$

Ясно, что при надлежащем выборе $p(x)$, $q(x)$ и $r(x)$ самый общий оператор второго порядка можно записать в форме (10.4.7), так что суть теории Штурма—Лиувилля заключается в выборе скалярного произведения, относительно которого рассматриваемый оператор формально самосопряжен. Выбор гильбертова пространства, разумеется, дело физики, и вышеупомянутый выбор отражает важность самосопряженности во многих физических приложениях. Хотя форма (10.4.7) часто удобна для вычислений, для развития теории достаточно более простая форма (10.4.1), которая и будет использоваться в остальной части данной главы.

## 10.5. СУЩЕСТВОВАНИЕ И ЕДИНСТВЕННОСТЬ РЕШЕНИЯ. ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ. СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ

Хотя все величины в формулировке данной задачи вещественны и нет никаких упоминаний об аналитичности, а $p'(x)$ и $q(x)$ не обязательно дифференцируемы, теория аналитических функций играет важную роль в анализе свойств рассматриваемого оператора. Решение одноточечной граничной задачи для оператора

$T_0 - \lambda$ аналитически зависит от $\lambda$, как показывает следующая лемма.

**Лемма.** *Для заданных значений $\varphi(a)$ и $\varphi'(a)$ и для любого вещественного или комплексного $\lambda$ дифференциальное уравнение*

$$T_0\varphi = -(p\varphi')' + q\varphi = \lambda\varphi \tag{10.5.1}$$

*имеет единственное решение $\varphi(x, \lambda)$ для $a \leqslant x \leqslant b$, которое для данного $x$ является целой функцией $\lambda$. [Замечание. Это $\varphi$ в общем случае не принадлежит $\boldsymbol{D}(A)$.]*

Доказательство. Обозначим $\varphi'$ через $\psi$. Тогда дифференциальное уравнение эквивалентно следующей системе интегральных уравнений для $\varphi$ и $\psi$:

$$\begin{aligned} p(x)\psi(x) &= p(a)\varphi' a + \int_a^x [q(x') - \lambda]\,\varphi(x')\,dx', \\ \varphi(x) &= \varphi(a) + \int_a^x \psi(x')\,dx'. \end{aligned} \tag{10.5.2}$$

Эти уравнения решаются итерационным методом Пикара, согласно которому $\varphi$ и $\psi$ заменяются на $\varphi_s$ и $\psi_s$ ($s = 0, 1, 2, \ldots$) в подынтегральных выражениях и на $\varphi_{s+1}$ и $\psi_{s+1}$ в левых частях уравнений. Функции $\varphi_0(x)$ и $\psi_0(x)$ принимают равными нулю; тогда $\varphi_1(x)$ и $\psi_1(x)$ равны константам $\varphi(a)$ и $\psi(a)$, и затем доказывается, что $\varphi_s(x)$ и $\psi_s(x)$ сходятся при $s \to \infty$ и что предельные функции удовлетворяют интегральным уравнениям. Именно, пусть $K$ — любое компактное множество в плоскости $\lambda$, и пусть

$$M = \max\left\{\sup \frac{|q(x') - \lambda|}{p(x)},\ 1\right\},$$

где супремум берется для всех $x$ и $x'$ из $[a, b]$ и для всех $\lambda$ из $K$. Введем обозначения $\Delta_s\varphi = \varphi_{s+1} - \varphi_s$, $\Delta_s\psi = \psi_{s+1} - \psi_s$; тогда

$$\begin{aligned} |\Delta_{s+1}\psi(x)| &\leqslant M \int_a^x |\Delta_s\varphi(x')|\,dx', \\ |\Delta_{s+1}\varphi(x)| &\leqslant M \int_a^x |\Delta_s\psi(x')|\,dx'. \end{aligned} \tag{10.5.3}$$

Если, кроме того, $m = \max\{|\varphi(a)|, |\varphi'(a)|\}$, то при помощи индукции по $s$ получим, что

$$|\Delta_s\psi(x)|,\ |\Delta_s\varphi(x)| \leqslant M^s (x-a)^s m/s! \tag{10.5.4}$$

для всех $x \in [a, b]$ и всех $\lambda \in K$. Следовательно, ряды

$$\varphi(a) + \sum_{s=1}^{\infty} \Delta_s\varphi(x), \quad \varphi'(a) + \sum_{s=1}^{\infty} \Delta_s\psi(x) \tag{10.5.5}$$

сходятся равномерно по $x$ и $\lambda$, поскольку частичные суммы мажорируются частичными суммами степенных рядов для экспоненты в соответствии с (10.5.4). Таким образом, ряды (10.5.5) можно интегрировать почленно, а отсюда следует, что их пределы удовлетворяют интегральным уравнениям, что и требовалось доказать.

Для доказательства единственности используем (10.5.3), опустив индексы и приняв за $\Delta\varphi$ и $\Delta\psi$ соответственно разности $\varphi-\tilde{\varphi}$ и $\varphi'-\tilde{\varphi}'$ для двух решений одноточечной граничной задачи, и покажем, что допущение $\Delta\varphi\not\equiv 0$ ведет к противоречию. Аналитическая зависимость от $\lambda$ появляется как простой побочный результат. Из (10.5.2) видно, что частичные суммы (10.5.5) являются полиномами от $\lambda$, и ряды сходятся равномерно по $\lambda$ на любом компактном множестве $K$ в плоскости $\lambda$. Из теоремы Вейерштрасса о равномерной сходимости аналитических функций (см. книгу Кноппа [1945, § 19]) следует, что $\varphi(x, \lambda)$ для данного $x$ является целой функцией от $\lambda$.

Теперь допустим, что заданные величины $\varphi(a)$ и $\varphi'(a)$ фиксированы (т. е. не зависят от $\lambda$), не равны одновременно нулю и удовлетворяют левому граничному условию

$$\alpha\varphi(a)+\beta\varphi'(a)=0.$$

Тогда $\lambda$ является собственным значением $A$ тогда и только тогда, когда правое граничное условие

$$\gamma\varphi(b, \lambda)+\delta\varphi'(b, \lambda)=0$$

также удовлетворяется. Левая часть этого уравнения является целой функцией $\lambda$ и не обращается тождественно в нуль, так как $A$ — симметрический оператор и потому не имеет невещественных собственных значений. Нули целой функции, не обращающейся тождественно в нуль, представляют собой изолированные точки, следовательно, собственные числа $\lambda_j$ оператора $A$ будут вещественными числами без предельных точек. Единственность $\varphi(x, \lambda)$ для любого $\lambda$ показывает, что пространство собственных функций одномерно.

## 10.6. РЕЗОЛЬВЕНТА. ФУНКЦИЯ ГРИНА. ПОЛНОТА СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Перейдем теперь к построению функции Грина. Можно поменять ролями концевые точки $a$ и $b$; поэтому существует другое решение $\chi(x)=\chi(x, \lambda)$ уравнения (10.5.1), имеющее заданные фиксированные значения $\chi(b)$ и $\chi'(b)$, которые удовлетворяют *правому* граничному условию

$$\gamma\chi(b)+\delta\chi'(b)=0.$$

Из (10.5.1) следует, что вронскиан $\chi\,\partial\varphi/\partial x-\varphi\,\partial\chi/\partial x$ двух решений для данного $\lambda$ есть константа, умноженная на $1/p(x)$. Следовательно, можно определить функцию $h(\lambda)$ для $\lambda$, которое не является собственным значением, с помощью уравнения

$$h(\lambda)\,p(x)\left[\chi(x, \lambda)\frac{\partial\varphi(x, \lambda)}{\partial x}-\varphi(x, \lambda)\frac{\partial\chi(x, \lambda)}{\partial x}\right]=1. \quad (10.6.1)$$

Для $\lambda$, не равного собственному значению $A$, функция Грина имеет вид

$$G(x, y) = G(x, y; \lambda) = h(\lambda) \begin{cases} \varphi(x, \lambda)\chi(y, \lambda), & x \leqslant y, \\ \chi(x, \lambda)\varphi(y, \lambda), & x \geqslant y \end{cases} \quad (a \leqslant x, y \leqslant b). \tag{10.6.2}$$

Для любого фиксированного $y$ функция $G(x, y)$ удовлетворяет граничным условиям при $x=a$ и $x=b$; кроме того, оператор $T_0-\lambda$, будучи применен к $G(x, y)$, дает нуль для всех $x \neq y$, но не для $x=y$, потому что $\lambda$ не является собственным значением (фактически $\partial G/\partial x$ имеет разрыв при $x=y$). В самом деле, $h(\lambda)$ была выбрана так, что

$$\left[-\frac{\partial}{\partial x} p(x) \frac{\partial}{\partial x} + q(x) - \lambda\right] G(x, y) = \delta(x-y), \tag{10.6.3}$$

т. е. так, что $-p(x)(\partial/\partial x) G(x, y)$ имеет единичный скачок при $x=y$. Далее, если $g$ — любое распределение в $L^2$ и если

$$f(x) = \int_a^b G(x, y; \lambda) g(y)\, dy, \tag{10.6.4}$$

то видно, что $f$ удовлетворяет граничным условиям и принадлежит $L^2$ (она непрерывна) и что $T_0 f = \lambda f + g$, поэтому $T_0 f \in L^2$, а значит, $f$ содержится в $\boldsymbol{D}(A)$, и $Af - \lambda f = g$ или $f = R_\lambda g$, где $R_\lambda$ — резольвента оператора $A$, т. е. эта резольвента является интегральным оператором в (10.6.4); это ограниченный оператор (фактически компактный — см. гл. 12), и он определен во всем $L^2$ для любого $\lambda$, которое не является собственным значением $A$.

Отсюда следует новое доказательство самосопряженности $A$ (до сих пор использовалась лишь его симметрия), так как $+i$ и $-i$ принадлежат резольвентному множеству. Следует также, что непрерывный спектр пуст, поскольку любое вещественное $\lambda$, не равное собственному значению, также принадлежит резольвентному множеству. Следовательно, собственные функции образуют базис в $L^2$, т. е. любое $f \in L^2$ может быть разложено по ним, и это разложение сходится в среднем к $f$. Итак, имеется бесконечно много собственных значений (так как каждое собственное пространство одномерно) и $|\lambda_j| \to \infty$ при $j \to \infty$.

## 10.7. БОЛЕЕ ОБЩИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Рассмотрим граничные условия

$$\alpha_i f(a) + \beta_i f'(a) + \gamma_i f(b) + \delta_i f'(b) = 0 \quad (i = 1, 2), \tag{10.7.1}$$

где допускается, что матрица этой системы уравнений имеет ранг 2, так что уравнения независимы. Назовем их *сцепленными* *граничными условиями*. Их можно разрешить относительно каких-либо двух неизвестных, которые будут выражены через два других; пусть эти уравнения разрешены, скажем, относительно $f'(a)$ и $f'(b)$:

$$\begin{aligned} f'(a) &= \varepsilon_1 f(a) + \zeta_1 f(b), \\ f'(b) &= \varepsilon_2 f(a) + \zeta_2 f(b); \end{aligned} \tag{10.7.2}$$

обсуждение других случаев, вполне аналогичных этому, предоставляем читателю. Для того чтобы результирующий оператор $A$ был симметричен, поскольку оператор умножения на $q(x)$ уже симметричен, необходимо и достаточно, чтобы

$$\int_a^b \bar{g}\,(pf')'\,dx = \int_a^b (p\bar{g}')'\,f\,dx$$

для всех $f$ и $g$ в $\boldsymbol{D}(A)$, т. е. для всех $f$ и $g$ из $L^2$, таких, что $(pf')'$ и $(p\bar{g}')'$ принадлежат $L^2$ и что указанные выше граничные условия удовлетворяются для $f$ и $g$. Интегрирование по частям приводит к условию

$$[p(x)(\bar{g}(x)f'(x) - \bar{g}'(x)f(x))]_a^b = 0.$$

Подстановка $f'$ при $x=a$ и $x=b$ из граничных условий (10.7.2) и $\bar{g}'$ при $x=a$ и $x=b$ из соответствующих комплексно сопряженных уравнений, в которых $f$ заменена на $\bar{g}$, дает уравнение, содержащее восемь членов. Значения $f$ и $g$ как при $x=a$, так и при $x=b$ могут быть выбраны произвольно при условии, что $f'$ и $g'$ при $x=a$, $x=b$ затем определяются при помощи (10.7.2). Легко показать, что упомянутое восьмичленное уравнение будет удовлетворяться тогда и только тогда, когда

$$\operatorname{Im}\zeta_2 = \operatorname{Im}\varepsilon_1 = 0, \quad \varepsilon_2 p(b) + \bar{\zeta}_1 p(a) = 0. \tag{10.7.3}$$

Затем точно так же, как в предыдущей задаче, можно использовать методы § 7.5 для того, чтобы доказать самосопряженность оператора $A$, определенного следующим образом:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{D}(A) = \{f \in L^2\colon\ T_0 f \in L^2,\ (10.7.2),\ (10.7.3)\ \text{выполняются}\}, \\ &Af = T_0 f. \end{aligned}$$

Эти результаты иллюстрируют теорему фон Неймана о возможности самосопряженного расширения симметрического оператора. Пусть $T$ — оператор, определенный так:

$$\begin{aligned} &D(T) = \{f \in L^2\colon\ T_0 f \in L^2,\ f(a) = f(b) = f'(a) = f'(b) = 0\}, \\ &Tf = T_0 f \quad \text{для} \quad f \in \boldsymbol{D}(T). \end{aligned} \tag{10.7.4}$$

Оператор $T$ — такой симметричный оператор, что сопряженный ему оператор $T^*$ вообще не имеет никаких граничных условий. В некотором смысле $T$ — минимальный оператор в $H$ (минимальный относительно области определения), полученный из $T_0$, а $T^*$ — максимальный. Для любого $\lambda$ уравнение $T^*f=\lambda f$ имеет два независимых решения, поэтому индексы дефекта оператора $T$ равны (2, 2). Следовательно, согласно теореме фон Неймана (§ 8.6), существует двух-(комплексно)-параметрическое семейство, т. е. четырех-(вещественно)-параметрическое семейство самосопряженных операторов $A$ между $T$ и $T^*$ ($T\subset A\subset T^*$). Рассмотренные выше граничные условия обеспечивают такое семейство: в уравнениях (10.7.2) имеются четыре комплексные постоянные, а уравнения (10.7.3) налагают четыре вещественных ограничения, так что остаются четыре свободных вещественных параметра.

Упражнение

1. Найдите резольвенту рассмотренного выше оператора $A$, т. е. найдите функцию Грина для уравнения $Af-\lambda f=g$.

## 10.8. ОПЕРАТОР ШТУРМА — ЛИУВИЛЛЯ С ОДНОЙ ОСОБОЙ КОНЦЕВОЙ ТОЧКОЙ

До сих пор предполагалось, что область изменения $x$ представляет собой ограниченный замкнутый интервал $[a, b]$ и что коэффициенты $p(x)$ и $q(x)$ непрерывны на $[a, b]$. Если $[a, b]$ заменить интервалом вида $[a, \infty)$ или $[a, b)$ (в последнем случае коэффициенты могут стать бесконечными при $x\to b$), то правая концевая точка ($x=b$) называется *особой*. Задача Штурма — Лиувилля может иметь одну или две особые концевые точки. Часто случается, что в особой концевой точке не требуется никаких граничных условий — требование принадлежности решения к $L^2$ заменяет граничное условие. Это так называемый случай предельной точки (см. ниже), который обычно (но не всегда) встречается в квантовой механике. Радиальные уравнения, которые получаются при разделении переменных в уравнениях Лапласа, Шредингера и Дирака, имеют особые концевые точки при $r=0$ и $r=\infty$. Точка $\infty$ имеет тип предельной точки, следовательно, в ней имеется автоматическое или внутреннее граничное условие, тогда как концевая точка 0 иногда имеет тип предельной точки, а иногда тип предельной окружности, и в последнем случае дополнительное граничное условие должно быть наложено на основании физических соображений; см. ниже § 10.15—10.17.

В этом параграфе и в двух следующих мы рассмотрим случай одной особой концевой точки. Мы возьмем интервал $[0, \infty)$, но точно таким же образом можно рассматривать любой интервал вида $[a, b)$.

Допустим, что при $0 \leqslant x < \infty$ $p(x) \in C^1$, $q(x) \in C$ и $p(x) > 0$. Если $f \in L^2(0, \infty)$ и если $T_0$—оператор, определенный уравнением

$$T_0 f = -(pf')' + qf, \tag{10.8.1}$$

то $T_0 f$ является распределением, поскольку $f$ принадлежит $L^2(0, b)$ для любого конечного $b$, а значит, может быть применена аргументация предшествующих параграфов.

Весьма нелегко дать точный аналог минимального оператора $T$, определенного при помощи (10.7.4), поскольку соответствующее граничное условие при $+\infty$ все еще неизвестно. Поэтому мы выбираем область определения, которая *заведомо* достаточно мала, именно $C_0^\infty(0, \infty)$, даже если результирующий оператор не является замкнутым. Одинаково удовлетворительным был бы выбор $C_0^2(0, \infty)$. В любом случае функции в этой области тождественно обращаются в нуль в некоторой окрестности точки 0 и в некоторой окрестности точки $\infty$. Оператор $T$ определяется следующим образом:

$$D(T) = C_0^\infty, \quad Tf = T_0 f \quad \text{для } f \in C_0^\infty. \tag{10.8.2}$$

Дважды интегрируя по частям в $(Tf, g)$, получим $(f, Tg)$, установив тем самым, что $T$ симметричен. Метод § 7.5 показывает, что сопряженным $T$ оператором является оператор, определяемый без граничных условий:

$$D(T^*) = \{f \in L^2\colon\ T_0 f \in L^2\}, \quad T^* f = T_0 f. \tag{10.8.3}$$

## 10.9. ГРАНИЧНОЕ УСЛОВИЕ В ОСОБОЙ КОНЦЕВОЙ ТОЧКЕ

Согласно теореме фон Неймана из § 8.6, существование и число самосопряженных расширений оператора $T$, заданного формулами (10.8.1), (10.8.2) предшествующего параграфа, определяются индексами дефекта $(m, n)$ оператора $T$, которые являются коразмерностями областей значений операторов $T \pm i$, т. е. размерностями нуль-пространств операторов $T^* \mp i$ или числами линейно независимых решений уравнений $T^* f = \pm if$, где $T^*$ определен в (10.8.3).

Дифференциальное уравнение $T_0 f = \lambda f$ является уравнением второго порядка; следовательно, оно имеет два независимых решения для любого $\lambda$, и, согласно определению (10.8.3) оператора $T^*$, решение $f$ уравнения $T_0 f = \lambda f$ принадлежит области определения оператора $T^*$ тогда и только тогда, когда оно принадлежит $L^2(0, \infty)$. Может случиться, что оба решения уравнения $T_0 f = \lambda f$ (а значит, и все его решения) принадлежат $L^2$. Если это произойдет для одного невещественного $\lambda$, то, согласно лемме § 8.6, это будет иметь место для всех $\lambda$ в данной полуплоскости (верхней или нижней). Кроме того, если $T_0 f = \lambda f$, то $T_0 \bar{f} = \bar{\lambda} \bar{f}$, и $\bar{f} \in L^2$, если $f \in L^2$; следовательно, если решение $f$ принадлежит $L^2$

для одной полуплоскости, то решение принадлежит $L^2$ также и для другой. Фактически для данной задачи все решения принадлежат $L^2$ для всех $\lambda$ (см. книгу Коддингтона и Левинсона [1955]).

Таким образом мы приходим к выводу, что индексы дефекта оператора $T$ суть (0, 0), (1, 1) или (2, 2). Далее мы покажем, что всегда имеется по меньшей мере одно решение уравнения $T_0 f=\lambda f$, принадлежащее $L^2$, и, значит, случай (0, 0) исключается. (Когда существуют *две* особые концевые точки, случай (0, 0) может иметь место, как в § 10.2, где было обнаружено, что оператор $-(d/dx)^2$ на $\mathbb{R}$ самосопряжен без каких-либо граничных условий.)

Пусть $f_i(x)=f_i(x;\lambda)$ $(i=1, 2)$ — решения уравнения $T_0 f=\lambda f$, т. е. уравнения

$$-(pf')'+qf=\lambda f \tag{10.9.1}$$

со следующими начальными условиями:

$$\begin{aligned} f_1(0)&=1, & p(0)f_1'(0)&=0,\\ f_2(0)&=0, & p(0)f_2'(0)&=1. \end{aligned} \tag{10.9.2}$$

Так же как для регулярной задачи Штурма — Лиувилля, вронскиан двух решений (для одного и того же значения $\lambda$) есть константа, умноженная на $1/p(x)$. В самом деле, мы находим, что

$$p(x)\,[f_1(x)f_2'(x)-f_2(x)f_1'(x)]\equiv 1. \tag{10.9.3}$$

Общее решение для данного $\lambda$ с точностью до произвольного постоянного множителя дается формулой

$$f(x)=f_1(x)+mf_2(x), \tag{10.9.4}$$

где $m$ — комплексное число. Мы покажем, что если $\operatorname{Im}\lambda\neq 0$, то имеется по меньшей мере одно значение $m$, для которого $\int_0^\infty |f|^2\,dx$ конечен. Умножив (10.9.1) на $\bar f(x)$ и проинтегрировав от 0 до $b$ (в конечном счете положим $b\to\infty$), после интегрирования по частям мы найдем, что

$$-[\bar f pf']_{x=0}^{x=b}+\int_0^b (p\,|f'|^2+q\,|f|^2)\,dx=\lambda\int_0^b |f|^2\,dx. \tag{10.9.5}$$

Интеграл в левой части принимает вещественное значение. Возьмем мнимые части от всех членов уравнения. Используя начальные условия (10.9.2), прежде всего заметим, что

$$p(0)\operatorname{Im}[\bar f(0)f'(0)]=\operatorname{Im} m;$$

следовательно,

$$-p(b)\operatorname{Im}[\bar f(b)f'(b)]\stackrel{\text{def}}{=}F(m;b)=-\operatorname{Im} m+\operatorname{Im}\lambda\int_0^b |f|^2\,dx. \tag{10.9.6}$$

Положим теперь для простоты $\operatorname{Im}\lambda > 0$ (ясно, что другой случай аналогичен). Мы покажем, что для данного $b$ $F(m; b) < 0$ внутри некоторого круга $D_b$ в плоскости $m$ и $F(m; b) > 0$ вне этого круга. Более того, когда $b$ возрастает, эти круги стягиваются, т. е. если $b' > b$, то $D_{b'}$ содержится в $D_b$. Действительно,

$$F(m; b) = (ip/2)[(\bar{f}_1 + \bar{m}\bar{f}_2)(f_1' + mf_2') - (f_1 + mf_2)(\bar{f}_1' + \bar{m}\bar{f}_2')]_{x=b}, \tag{10.9.7}$$

что можно записать в виде

$$F(m; b) = A|m|^2 + B\operatorname{Re} m + C\operatorname{Im} m + D, \tag{10.9.8}$$

где $A$, $B$, $C$ и $D$ — вещественные коэффициенты и

$$A = -p(b)\operatorname{Im}[\bar{f}_2(b)f_2'(b)] = \operatorname{Im}\lambda \int_a^b |f_2|^2 dx. \tag{10.9.9}$$

Здесь было еще раз использовано (10.9.5) с подстановкой $f_2$ вместо $f$. Ясно, что геометрическим местом точек со свойством $F(m; b) = 0$ будет окружность в плоскости $m$, а более детальные вычисления с использованием (10.9.2) показывают, что радиус этой окружности равен $1/(2A)$. Ясно, что для больших $m$ $F(m; b) > 0$ (в силу (10.9.9) $A > 0$), следовательно, $F < 0$ в круге $D_b$, ограниченном этой окружностью, и $F > 0$ вне его. Наконец, из (10.9.6) следует, что $F(m; b)$ — возрастающая функция $b$ при фиксированном $m$, и, значит, круги стягиваются, когда $b$ возрастает.

Если круги $D_b$ при $b \to \infty$ стягиваются к точке $m_\infty$, говорят, что в данной задаче осуществляется *случай предельной точки* на правом конце ($x = \infty$). Тогда $F(m_\infty; b) \leqslant 0$ для всех $b$ и (10.9.6) показывает, что решение $f(x) = f_1(x) + m_\infty f_2(x)$ квадратично интегрируемо на $(0, \infty)$; в самом деле,

$$\int_0^\infty |f|^2 dx \leqslant \operatorname{Im} m_\infty / \operatorname{Im}\lambda. \tag{10.9.10}$$

Поскольку радиус круга $1/(2A) \to 0$ при $b \to \infty$, из уравнения (10.9.9) следует, что $f_2(x)$ не является квадратично интегрируемой и поэтому нет других квадратично интегрируемых решений, кроме кратных $f(x)$. Как уже было указано выше, если принадлежность $L^2$ была установлена для одного $\lambda$, то она имеет место для всех $\lambda$. В действительности в случае предельной точки условие квадратичной интегрируемости заменяет однородное граничное условие в концевой точке.

Если круги $D_b$ стягиваются к кругу $D_\infty$ ненулевого радиуса, то говорят, что в данной задаче осуществляется *случай предельной окружности* на правом конце. Тогда, взяв любые два значения $m$ в $D_\infty$, легко увидеть, что любая линейная комбинация $f_1$ и $f_2$ квадратично интегрируема. В этом случае квадратичная интегрируемость не эквивалентна граничному условию. Поэтому для задачи Штурма—Лиувилля в случае предельной окружности на одном конце (или на обоих), вообще говоря, требуется некоторое дополнительное условие, наложенное на решение вместо граничного условия, для того чтобы сделать оператор самосопряженным. Примеры будут даны ниже в § 10.15—10.17.

Коддингтон и Левинсон дали следующий критерий установления того, имеет ли оператор Штурма—Лиувилля $T_0$ при $x=\infty$ особую точку типа предельной точки. Если существует функция $M(x)>0$ из класса $C^1$, такая, что

$$\int^{\infty} (pM)^{-1/2}\,dx=\infty \tag{10.9.11}$$

и

$$p^{1/2}M'M^{-3/2} \text{ ограничено}, \quad 0\leqslant x<\infty, \tag{10.9.12}$$

и если $q(x)\geqslant -M(x)$, то при $x=\infty$ оператор $T_0$ имеет особую точку типа предельной точки. Полагая $M=\text{const}$ и $p=\text{const}$ соответственно, можно получить два частных случая.

а) Если $q(x)$ ограничена снизу (возможно, отрицательной) постоянной и $\int^{\infty} p^{-1/2}\,dx$ бесконечен, то оператор $T_0$ имеет особую точку типа предельной точки.

б) Если $q(x)\geqslant -kx^2$, где $k=\text{const}$, то оператор $T_0$, определенный уравнением $T_0 f=-f''+qf$, имеет особую точку типа предельной точки.

## 10.10. РЕГУЛЯРНАЯ ОСОБАЯ ТОЧКА. МЕТОД ФРОБЕНИУСА

Дальнейшая классификация концевой точки, скажем, при $x=a$ возможна в том случае, когда $p(x)$ и $q(x)$ аналитичны вблизи $a$. Запишем уравнение $T_0 f=\lambda f$ в виде

$$f''(x)+P(x)f'(x)+Q(x)f(x)=0, \tag{10.10.1}$$

где $P(x)=p'(x)/p(x)$, $Q(x)=-[q(x)-\lambda]/p(x)$. Концевая точка $a$ является *регулярной особой точкой* уравнения (10.10.1), если $P(x)$ и $Q(x)$ аналитичны в некоторой окрестности точки $a$ в комплексной плоскости $x$, за исключением того, что при $x=a$ $P$ может иметь простой полюс, а $Q$ — полюс не выше второго порядка.

Заметим, что $P(x)$ и $Q(x)$ могут иметь особенность тогда, когда $p(x)$ и $q(x)$ не имеют особенности; достаточно, например, чтобы $p(a)=0$.

Мы увидим, что регулярная особая точка может иметь как тип предельной точки, так и тип предельной окружности. Отметим также, что для данных $p(x)$ и $q(x)$ точка $x=a$ может быть регулярной особой точкой уравнения (10.10.1) для некоторого $\lambda$, а для других не быть таковой. Например, при $p=q=x^3$ нуль является регулярной особой точкой лишь для $\lambda=0$. Однако то, какой случай (предельной точки или предельной окружности) имеет место, согласно предыдущему параграфу, не зависит от $\lambda$; поэтому, чтобы выяснить, какой случай осуществляется, можно использовать любое значение $\lambda$, при котором $a$ является регулярной особой точкой.

Теперь мы опишем так называемый *метод Фробениуса* для нахождения решения вблизи регулярной особой точки.

Разложения функций $P(x)$ и $Q(x)$ в ряд Лорана в окрестности $x=a$ имеют вид

$$\left.\begin{aligned} P(x) &= P_0(x-a)^{-1}+P_1+P_2(x-a)+\ldots, \\ Q(x) &= Q_0(x-a)^{-2}+Q_1(x-a)^{-1}+Q_2+\ldots, \end{aligned}\right\} 0<|x-a|<R \tag{10.10.2}$$

Будем искать решение уравнения (10.10.1) в виде степенного ряда

$$f(x)=(x-a)^{\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-a)^n \quad (a_0\neq 0). \tag{10.10.3}$$

Подставим этот ряд в (10.10.1) и приравняем нулю полученные коэффициенты при различных степенях $x-a$. Это дает *определяющее уравнение для* $\alpha$

$$f(\alpha)\overset{\text{def}}{=}\alpha^2-\alpha+P_0\alpha+Q_0=0 \tag{10.10.4}$$

и последовательность рекуррентных соотношений

$$F(\alpha+l)\,a_l+\sum_{j=1}^{l}\left[(\alpha+l-j)P_j+Q_j\right]a_{l-j}=0 \quad (l=1,2,\ldots) \tag{10.10.5}$$

для коэффициентов $a_1, a_2, \ldots$, выражаемых через $a_0$, который является произвольным. Пусть $\alpha_1$ и $\alpha_2$ — корни определяющего уравнения (10.10.4), упорядоченные так, что $\mathrm{Re}\,\alpha_1\geqslant\mathrm{Re}\,\alpha_2$.

**Теорема.** *Для* $\alpha=\alpha_1$ *ряд* (10.10.3) *с коэффициентами, определяемыми из* (10.10.5), *сходится для* $|x-a|<R$, *и построенная так функция* $f(x)$ *удовлетворяет дифференциальному уравнению* (10.10.1).

Доказательство основано на стандартной теории аналитических функций и приводится в книгах по дифференциальным уравнениям, например в книге Йоргенса и Реллиха [1976].

Для $\alpha=\alpha_2$ этот же метод дает второе решение, если только число $\alpha_1-\alpha_2$ не является целым, но в любом случае второе решение имеет вид

$$g(x)=f(x)\int^{x}\frac{dw}{p(w)f(w)^2}, \tag{10.10.6}$$

что легко показать прямой подстановкой в уравнение $-(pg')'+ qg=\lambda g$. Если в (10.10.6) подставить степенные ряды для $f$ и $p$, то $g(x)$ примет вид

$$g(x)=\begin{cases}(x-a)^{\alpha_2}\varphi_1(x), & \text{если } \alpha_1-\alpha_2 \text{ не целое,}\\ (x-a)^{\alpha_2}\varphi_2(x)+\mathrm{const}\cdot f(x)\ln(x-a), & \\ & \text{если } \alpha_1-\alpha_2 \text{ целое,}\end{cases} \tag{10.10.7}$$

где $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$ — аналитические функции для $|x-a|<R$ и не обращаются в нуль при $x=a$.

Если вспомнить, что $\operatorname{Re}\alpha_1\geqslant\operatorname{Re}\alpha_2$, то из (10.10.3) и (10.10.7) можно увидеть, что $f$ и $g$ принадлежат $L^2(a, a+c)$ при $c<R$, если $\operatorname{Re}\alpha_2>-1/2$; следовательно, это является критерием для случая предельной окружности.

Упражнения

1. Примените метод Фробениуса к уравнению Бесселя для $x=0$ и к уравнению Лежандра для $x=\pm 1$.

2. Что дает данный метод в том частном случае, когда $a$ является регулярной точкой дифференциального уравнения (10.10.1)?

## 10.11. САМОСОПРЯЖЕННОЕ РАСШИРЕНИЕ ОПЕРАТОРА $T$ В СЛУЧАЕ ПРЕДЕЛЬНОЙ ТОЧКИ

В этом параграфе будет показано, что если концевая точка $\infty$ имеет тип предельной точки, то самосопряженные варианты оператора $T_0-(d/dx)\,p\,(d/dx)+q$ могут быть получены наложением граничного условия только в точке $x=0$. Для этого решающим является следующее свойство случая предельной точки.

Оказывается, что функция $f_2(x)$ в этом случае не является квадратично интегрируемой. Можно снова повторить рассуждения § 10.9 с $f_1$ и $f_2$, переопределенными так, чтобы вместо (10.9.2) удовлетворялись граничные условия

$$\begin{aligned} f_1(0)&=\cos\alpha, & p(0)f_1'(0)&=\sin\alpha,\\ f_2(0)&=-\sin\alpha, & p(0)f_2'(0)&=\cos\alpha,\end{aligned} \tag{10.11.1}$$

где $\alpha$ — вещественный параметр. Весь вывод, начиная с (10.9.3), остается неизменным, и мы заключаем, что новая функция $f_2(x)$ также не является квадратично интегрируемой для $\operatorname{Im}\lambda\neq 0$, т. е.

*никакое* решение, удовлетворяющее *вещественному* граничному условию

$$f(0)\cos\alpha + p(0)f'(0)\sin\alpha = 0, \qquad (10.11.2)$$

не является квадратично интегрируемым на $(0, \infty)$ для $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$.

Определим теперь такое расширение $A_\alpha$ оператора $T$ в случае предельной точки, при котором от $f$ не требуется тождественного обращения в нуль вблизи $x=0$, а лишь нужно удовлетворить условию (10.11.2). Мы покажем, что $A_\alpha$ существенно самосопряжен:

$$D(A_\alpha) = \left\{ f \in C^\infty\colon \begin{array}{l} f(x) = 0 \text{ для всех } x > \text{некоторого } b, \\ f(x) \text{ удовлетворяет (10.11.2)} \end{array} \right\}.$$

Методом § 7.5 легко показать, что

$$D(A_\alpha^*) = \{ f \in L^2(0, \infty)\colon T_0 f \in L^2, \text{ (10.11.2) выполняется} \}.$$

Согласно установленному выше свойству случая предельной точки, уравнение $A_\alpha^* f = \lambda f$ не имеет отличных от нуля решений $f$ для $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$, следовательно, индексы дефекта $A_\alpha$ равны $(0, 0)$. Поэтому $A_\alpha$ существенно самосопряжен, а $A_\alpha^*$ является его самосопряженным замыканием. Таким образом, мы имеем однопараметрическое семейство $\{A_\alpha^*\}$ самосопряженных расширений оператора $T$, таких, что $T \subset A_\alpha^* \subset T^*$.

Резольвента $R_\lambda = (A_\alpha - \lambda)^{-1}$ оператора $A_\alpha$, которая потребуется в следующем параграфе для разложения по собственным функциям, получается при помощи функции Грина для $A_\alpha - \lambda$, $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$. Функция Грина содержит квадратично интегрируемое решение уравнения $T_0 f = \lambda f$, которое мы обозначим через $f_3(x)$ или $f_3(x, \lambda)$. Оно определяется формулой

$$f_3(x, \lambda) = f_1(x, \lambda) + m_\infty(\lambda) f_2(x, \lambda), \qquad (10.11.3)$$

где $f_1$ и $f_2$ — решения, удовлетворяющие граничным условиям (10.11.1) при $x=0$. Из (10.9.3) следует, что

$$p(x)[f_2(x) f_3'(x) - f_3(x) f_2'(x)] \equiv -1, \qquad (10.11.4)$$

откуда ясно, что функция Грина имеет вид

$$G(x, y) = G(x, y; \lambda) = \begin{cases} f_2(x) f_3(y), & x \leqslant y, \\ f_3(x) f_2(y), & x \geqslant y. \end{cases} \qquad (10.11.5)$$

При фиксированном $y$ функция $G(x, y)$ принадлежит $L^2$, удовлетворяет граничному условию (10.11.2) при $x=0$ и уравнению

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial x} p(x) \frac{\partial}{\partial x} + q(x) - \lambda \right] G(x, y) = \delta(x-y). \qquad (10.11.6)$$

Поэтому для любой непрерывной функции $g(x)$ в $L^2(0, \infty)$ и для $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$ мы имеем

$$(R_\lambda g)(x) = ((A_\alpha - \lambda)^{-1} g)(x) = \int_0^\infty G(x, y)\, g(y)\, dy =$$

$$= f_3(x) \int_0^x f_2(y)\, g(y)\, dy + f_2(x) \int_x^\infty f_3(y)\, g(y)\, dy. \qquad (10.11.7)$$

Для вещественного $\lambda$, не являющегося собственным значением, интегральный оператор в (10.11.7) существует, но может быть неограниченным, потому что интервал интегрирования теперь $(0, \infty)$. На самом деле он является в точности неограниченным, когда $\lambda$ принадлежит непрерывному спектру $A$. Однако каждый раз, когда уравнение $Af - \lambda f = g$ имеет решение, это решение дается формулой (10.11.7).

## 10.12. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО СОБСТВЕННЫМ ФУНКЦИЯМ

Разложение данной функции или, точнее, данного элемента $g(x)$ из $L^2(0, \infty)$ по собственным функциям оператора $A_\alpha$ содержит суммирование по собственным функциям точечного (дискретного) спектра $A_\alpha$ и интегрирование по собственным функциям непрерывного спектра (эти функции, конечно, не принадлежат $L^2$). Эти две части объединяются путем записи разложения в виде интеграла Стилтьеса.

Если $\lambda \in P\sigma(A_\alpha)$, то функция $f_2(x, \lambda)$, удовлетворяющая условию (10.11.2), которое было использовано в определении оператора $A_\alpha$, является собственной функцией (не обязательно нормированной) и, следовательно, квадратично интегрируемой на $(0, \infty)$. (Было обнаружено, что этого не может быть для невещественного $\lambda$, но, разумеется, любое $\lambda$ из данного спектра вещественно.) Если $\lambda \in C\sigma(A_\alpha)$, то $f_2(x, \lambda)$ не является квадратично интегрируемой, но может быть использована в построении приближенных собственных функций в виде волнового пакета (мы не будем пользоваться таким построением). Итак, мы ожидаем разложение вида

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x, t)\, d\gamma(t), \qquad (10.12.1)$$

где $\gamma(t)$ — некоторая функция ограниченной вариации, которая имеет скачки при собственных значениях $A_\alpha$, меняется непрерывно на непрерывном спектре и является постоянной в любом интервале, не лежащем в спектре. Разложение такого типа получается из спектрального семейства $\{E_t\}$ оператора $A_\alpha$.

Так как $E_t$ получается интегрированием $R_\lambda$ (формула (10.11.7)) по контуру $C(t)$ в плоскости $\lambda$ (см. § 9.6), нам нужно более детально знать зависимость $f_2$ и $f_3$ от $\lambda$. Согласно § 10.5, $f_1''(x, \lambda)$

и $f_2(x, \lambda)$ — целые функции $\lambda$ для каждого $x$, тогда как $f_3(x, \lambda)$ дана формулой (10.11.3). Пусть $m(b, \lambda) = -f_1(b, \lambda)/f_2(b, \lambda)$. В силу (10.9.7) $m(b, \lambda)$ лежит на окружности $F(m; b) = 0$ в плоскости $m$. Так как при $b \to \infty$ эта окружность стягивается к $m_\infty$, мы имеем

$$m_\infty(\lambda) = \lim_{b\to\infty} [-f_1(b, \lambda)/f_2(b, \lambda)]. \qquad (10.12.2)$$

Отсюда можно показать (см. книгу Коддингтона и Левинсона [1955]), что $m_\infty(\lambda)$ аналитична в верхней и нижней полуплоскостях и что $\operatorname{Im} m_\infty(\lambda)$ имеет тот же знак, что и $\operatorname{Im} \lambda$.

Из § 9.6 и уравнения (10.11.7) следует, что проектор $E_t$ имеет вид

$$(E_t g)(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{t} \int_{0}^{\infty} [G(x, y; s+i\varepsilon) - G(x, y; s-i\varepsilon)]\, g(y)\, dy. \qquad (10.12.3)$$

Чтобы упростить дальнейший вывод, допустим, что $g(y)$ — непрерывная функция, равная нулю для всех $y$, бо́льших некоторого $y_0$. Позднее мы обсудим окончательные формулы для случая, когда $g$ — произвольный элемент $L^2(0, \infty)$. Подставив $f_1 + m_\infty f_2$ вместо $f_3$ в выражение для $G$, мы получим вклад от $f_1$, равный нулю, поскольку $f_1$ и $f_2$ непрерывны по $\lambda$, и поэтому в пределе при $\varepsilon \to 0$ вклады от $\lambda = s + i\varepsilon$ и $\lambda = s - i\varepsilon$ взаимно уничтожаются. То, что остается, можно записать так:

$$(E_t g)(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ f_2(x, \lambda) \int_0^\infty f_2(y, \lambda)\, g(y)\, dy\, m_\infty(\lambda) \right]_{\lambda = s - i\varepsilon}^{\lambda = s + i\varepsilon} ds.$$

Функция $m_\infty(s \pm i\varepsilon)$ в общем случае не имеет предела при $\varepsilon \to 0$, но ее интеграл по $s$ имеет предел (см. книгу Коддингтона и Левинсона), и функция

$$\rho(t) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{2\pi i} \int^{t} [m_\infty(s + i\varepsilon) - m_\infty(s - i\varepsilon)]\, ds \qquad (10.12.4)$$

(определенная с точностью до произвольной аддитивной постоянной) — вещественная и неубывающая, поскольку $m_\infty(\bar\lambda) = \overline{m_\infty(\lambda)}$, а $\operatorname{Im} m_\infty(\lambda)$ имеет тот же знак, что и $\operatorname{Im}\lambda$. Следовательно,

$$(E_t g)(x) = \int_{-\infty}^{t} f_2(x, s)\, h(s)\, d\rho(s), \qquad (10.12.5)$$

где

$$h(s) = \int_0^\infty f_2(y, s)\, g(y)\, dy. \qquad (10.12.6)$$

Наконец, в пределе при $t \to +\infty$ (10.12.5) переходит в формулу

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x, s) h(s) d\rho(s). \tag{10.12.7}$$

Это и есть разложение по собственным функциям функции $g(x)$, а (10.12.6) дает формулу для коэффициента разложения $h(s)$. Функция $\rho(s)$ называется *спектральной функцией* оператора $A_\alpha$, а (10.12.4) носит название *формулы Титчмарша*.

Формула (10.12.5) показывает, что поскольку $E_t$ имеет скачки при собственных значениях $A_\alpha$, непрерывна на непрерывном спектре и постоянна в любом $t$-интервале вне спектра, этими же свойствами обладает и $\rho(t)$.

До сих пор предполагалось, что $g(x)$ — непрерывная функция с ограниченным носителем. Рассмотрим более общий случай: пусть $g(x)$ — произвольный элемент $L^2(0, \infty)$, а $h(s)$ — элемент пространства $L^2_\rho$ типа рассмотренного в § 5.9. Тогда формулы (10.12.6) и (10.12.7) можно интерпретировать следующим образом:

$$\begin{aligned} &\text{при } T \to \infty \quad \int_0^T f_2(y, s) g(y) dy \to h(s) \in L^2_\rho, \\ &\text{при } T \to \infty \quad \int_{-T}^{T} f_2(x, s) h(s) d\rho(s) \to g(x) \in L^2(0, \infty). \end{aligned} \tag{10.12.8}$$

В первом из этих соотношений интеграл является вполне определенной функцией $s$ для каждого $T$ (фактически аналитической), поскольку $f_2$ и $g$ принадлежат $L^2(0, T)$, и сходится к $h(s)$ по норме $L^2_\rho$. Интеграл во втором соотношении имеет аналогичный смысл: если $\rho_T(s)$ совпадает с $\rho(s)$ в $(-T, T)$ и постоянна на остальной части оси, то $f_2$ и $h$ принадлежат $L^2_{\rho_T}$, а интеграл сходится к $g(x)$ по норме $L^2(0, \infty)$.

Отображение $g \to h$ подобно преобразованию Фурье; по крайней мере формально, мы имеем равенство Парсеваля

$$\begin{aligned} (h_1, h_2)_{L^2_\rho} &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{h_1(s)} h_2(s) d\rho(s) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{h_1(s)} \int_0^{\infty} f_2(y, s) g_2(y) dy \, d\rho(s) = \\ &= \int_0^{\infty} g_2(y) \int_{-\infty}^{\infty} f_2(y, s) \overline{h_1(s)} d\rho(s) dy = \\ &= \int_0^{\infty} g_2(y) \overline{g_1(y)} dy = (g_1, g_2)_{L^2(0, \infty)}. \end{aligned}$$

До некоторой степени эвристически мы приходим к следующему заключению.

**Теорема.** *Для любого элемента* $g(x)$ *в* $L^2(0, \infty)$ *существует элемент* $h(s)$ *в* $L^2_\rho$, *такой, что справедливы соотношения* (10.12.8); *обратно, для любого* $h(s)$ *в* $L^2_\rho$ *существует элемент* $g(x)$ *в* $L^2(0, \infty)$, *такой, что соотношения* (10,12.8) *справедливы. Отображение* $g \to h$ *является изометрическим изоморфизмом (т. е. унитарным отображением)* $L^2(0, \infty)$ *на* $L^2_\rho$.

Подтверждение этих заключений и другие детали см. в книгах Коддингтона и Левинсона [1955], Йоргенса и Реллиха [1976].

В квантовомеханических формулировках $g(x)$ и $h(s)$ можно рассматривать как волновые функции, которые описывают данное состояние физической системы в двух различных представлениях. В первом представлении диагональна наблюдаемая $x$, а во втором — наблюдаемая $A$.

Получение разложения по собственным функциям в случае двух особых концевых точек будет описано в § 10.14.

## 10.13. СЛУЧАЙ ПРЕДЕЛЬНОЙ ОКРУЖНОСТИ

Рассмотрим оператор $T_0$ из § 10.8 для интервала $[0, \infty)$ на такой области, что $f$ и $T_0 f$ принадлежат $L^2$, причем граничное условие при $x=0$ имеет обычный вид (10.11.2), а именно

$$f(0)\cos\alpha + p(0) f'(0)\sin\alpha = 0 \quad (\alpha \text{ вещественное}). \tag{10.13.1}$$

Допустим, что $T_0$ имеет на $\infty$ особую точку типа предельной окружности, и зададимся вопросом: какие возможные граничные или концевые условия при $x=\infty$ приводят к самосопряженности этого оператора? Ясно, что нельзя просто записать

$$f(\infty)\cos\beta + p(\infty) f'(\infty)\sin\beta = 0,$$

поскольку предельные значения $f$, $p$ и $f'$ при $x=\infty$ вообще лишены смысла. Вместо $p(\infty)$ и $p(\infty)f'(\infty)$ нам нужны два (в общем случае комплексных) числа $c_1$ и $c_2$, которые характеризовали бы асимптотическое поведение $f$. Оказывается, что в случае предельной окружности все $f$, такие, что $f$ и $T_0 f$ принадлежат $L^2$, ведут себя на бесконечности примерно подобным образом и их действительно можно различать при помощи двух таких чисел.

Пусть $\lambda_0$ — любое заданное вещественное число, и пусть $u_1(x)$ и $u_2(x)$ — любые линейно независимые вещественные решения уравнения $T_0 u = \lambda u$. Для любого $g \in L^2$ рассмотрим функцию

$$h(x) = \frac{1}{W}\int_x^\infty [u_1(y)\,u_2(x) - u_1(x)\,u_2(y)]\,g(y)\,dy \tag{10.13.2}$$

(это выражение имеет смысл, поскольку $u_1$, $u_2$ и $g$ принадлежат $L^2$), где

$$W = p(x)\,[u_1(x)\,u_2'(x) - u_1'(x)\,u_2(x)] = \text{const}. \qquad (10.13.3)$$

Непосредственная подстановка $h$ в уравнение дает

$$(T_0 - \lambda_0)\,h = g.$$

Поэтому если $f$ — любая функция, для которой $f$ и $T_0 f$ принадлежат $L^2$, и если $g = (T_0 - \lambda_0) f$, то $f - h$ удовлетворяет однородному уравнению и мы можем записать

$$f(x) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + \frac{1}{W}\int_x^\infty [u_1(y)\,u_2(x) - u_1(x)\,u_2(y)]\,g(y)\,dy, \qquad (10.13.4)$$

где

$$g = (T_0 - \lambda_0) f. \qquad (10.13.5)$$

Обратно, если $g$ — любой элемент из $L^2$, а $c_1$ и $c_2$ — любые, вообще говоря комплексные, постоянные, то функция $f$, заданная формулой (10.13.4), обладает тем свойством, что $f$ и $T_0 f$ принадлежат $L^2$. Постоянные $c_1$ и $c_2$ называются *предельными числами* функции $f(x)$ *относительно* данных решений $u_1$ и $u_2$. Выражение (10.13.4) можно также записать в виде

$$f(x) = u_1(x)\,[c_1 + \varphi_1(x)] + u_2(x)\,[c_2 + \varphi_2(x)],$$

где $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$ стремятся к нулю при $x \to \infty$. Уточнения $c_1$ и $c_2$ вызывают того же сорта ограничения на $f$, что и уточнения $f(a)$ и $f'(a)$ при конечном $a$: для заданных $\lambda_0$, $u_1$, $u_2$ и для любых $\lambda \in \mathbb{C}$ существует в точности одно решение уравнения $T_0 f = \lambda f$, имеющее заданные значения $c_1$ и $c_2$. Более того, при фиксированных $c_1$ и $c_2$ это решение является целой функцией $\lambda$.

Главный результат (доказательство см. в книге Йоргенса и Реллиха [1976]) состоит в следующем:

**Теорема.** (1) *Пусть $\lambda_0$, $u_1(x)$ и $u_2(x)$ заданы, как указано выше. Если $A$ — любое самосопряженное расширение минимального оператора $T$ из* (10.8.2) *в случае особой точки типа предельной окружности на бесконечности и граничного условия типа* (10.13.1) *при $x = 0$, то существует вещественное число $\beta$, такое, что предельные числа $c_1$ и $c_2$ любого элемента $f$ в $\mathbf{D}(A)$ удовлетворяют условию*

$$c_1 \cos\beta + c_2 \sin\beta = 0. \qquad (10.13.6)$$

*Обратно, при любых вещественных* $\alpha$ *и* $\beta$ *оператор* $A_{\alpha\beta}$, *определяемый так:*

$$D(A_{\alpha\beta}) = \{f \in L^2\colon\ T_0 f \in L^2,\ (10.13.1)\ \text{и}\ (10.13.6)\ \text{выполняются}\},$$
$$A_{\alpha\beta} f = T_0 f, \tag{10.13.7}$$

*является самосопряженным расширением оператора* $T$.

(2) *Если* $\lambda_0$, $u_1$ *и* $u_2$ *заменить любыми* $\tilde{\lambda}_0$, $\tilde{u}_1$ *и* $\tilde{u}_2$, *причем* $\tilde{\lambda}_0$ *также вещественно, а* $\tilde{u}_1$ *и* $\tilde{u}_2$ — *линейно независимые вещественные решения уравнения* $T_0 u = \tilde{\lambda}_0 u$, *то значение* $\beta$ *для данного оператора, вообще говоря, получится другим, но семейство самосопряженных расширений оператора* $T$ *останется тем же самым.*

В силу п. (2) теоремы целесообразно для простоты брать в качестве $u_1$ и $u_2$ решения уравнения $T_0 u = 0$.

## 10.14. СЛУЧАЙ ДВУХ ОСОБЫХ КОНЦЕВЫХ ТОЧЕК

Допустим, что рассматриваемый оператор имеет особенности на обоих концах интервала $(a, b)$. (В частности, мы можем иметь или $a = -\infty$, или $b = +\infty$, или и то, и другое вместе.) Для того чтобы классифицировать какой-то конец, скажем $x = a$, мы вводим промежуточную точку $c$ $(a < c < b)$. Если все решения уравнения $T_0 f = \lambda f$ для каждого $\lambda$ квадратично интегрируемы на $(a, c)$, т. е. принадлежат $L^2(a, c)$, то левая концевая точка $x = a$ имеет тип предельной окружности. В противном случае существует только одно решение (с точностью до постоянного множителя) в $L^2(a, c)$ для каждого невещественного $\lambda$ и $a$ имеет тип предельной точки. Правая концевая точка $x = b$ классифицируется аналогично.

Мы покажем, что если обе концевые точки имеют тип предельной точки, то в граничных условиях вообще нет необходимости и оператор $A$, для которого

$$D(A) = \{f \in L^2\colon\ T_0 f \in L^2\}, \quad Af = T_0 f, \tag{10.14.1}$$

самосопряжен. Если одна концевая точка (или обе) имеет (имеют) тип предельной окружности, то в ней (в них) необходимо ставить граничное условие.

Вообще говоря, спектр может состоять из дискретной и непрерывной частей, но Коддингтон и Левинсон [1955], а также Йоргенс и Реллих [1976] показали, что полностью дискретный спектр получается в том случае, когда для оператора $T_0$ реализуется тип предельной окружности на обоих концах и на каждом конце ставится граничное условие типа (10.13.6). Этот результат незначительно перекрывает регулярную задачу Штурма —

Лиувилля в том смысле, что если $p(x)$, $p'(x)$ и $q(x)$ непрерывны в конечном замкнутом интервале $[a, b]$, то для той же задачи в открытом интервале $(a, b)$ (т. е. задачи, в которой мы игнорируем значения $x=a$ и $x=b$) на каждом конце имеются особые точки типа предельной окружности, поскольку все решения уравнения $T_0 f=\lambda f$ квадратично интегрируемы на $(a, b)$.

Упражнение

1. Покажите, что из уравнения Штурма—Лиувилля

$$-(p(x)f'(x))'+q(x)f(x)=\lambda f(x),$$

выполнив преобразование $x\longrightarrow y=y(x)$ и положив $f(x)=\varphi(y)g(y)$ с $\varphi(y)$, выбранной надлежащим образом, можно получить уравнение Штурма—Лиувилля

$$-(\tilde{p}(y)g'(y))'+\tilde{q}(y)g(y)=\lambda g(y).$$

Найдите $\varphi(y)$, $\tilde{p}(y)$, $\tilde{q}(y)$. (Заметим, что $L^2$-норма не сохраняется: в общем случае $\int|f|^2dx\neq\int|g|^2dy$.) Покажите, что если $y(x)=1/x$, то регулярная точка $x=0$ первого уравнения преобразуется в особую концевую точку $y=\infty$ второго уравнения типа предельной окружности.

Когда обе концевые точки $a$ и $b$ имеют тип предельной точки, разложение по собственным функциям аналогично проведенному в § 10.12, за исключением того, что спектр имеет кратность два, т. е. могут быть две линейно независимые собственные функции для данного собственного значения, а также две линейно независимые собственные функции (не в $L^2$) в данной точке непрерывного спектра. Поэтому в разложение по собственным функциям входят два коэффициента $h_1(s)$ и $h_2(s)$. Вместо спектральной функции $\rho(s)$ мы имеем теперь *спектральную матрицу* размера $2\times 2$ с матричными элементами $\rho_{jk}(s)$ ($j$, $k=1$, 2). Соответственно таким характеристикам $\rho(s)$, как вещественность и неубывание, спектральная матрица является эрмитовой, фактически вещественной и симметричной, и неубывающей в том смысле, что для $s'>s$ матрица $\rho_{jk}(s')-\rho_{jk}(s)$ положительно полуопределенна.

Рассмотрим вопрос более детально. Пусть $f_1(x, \lambda)$ и $f_2(x, \lambda)$ — решения уравнения $T_0 f=\lambda f$, удовлетворяющие вещественным граничным условиям в некоторой точке $c\in(a, b)$, причем

$$p(x)[f_1(x)f_2'(x)-f_2(x)f_1'(x)]\equiv 1.$$

Тогда для любого $\lambda$ с $\operatorname{Im}\lambda\neq 0$ потребуем, чтобы $f_3$ и $f_3$ были решениями уравнения $T_0 f=\lambda f$, принадлежащими $L^2(a, c)$ и $L^2(c, b)$ соответственно, и представим их в виде

$$\begin{aligned} f_3(x, \lambda)&=f_1(x, \lambda)+m(\lambda)f_2(x, \lambda),\\ f_4(x, \lambda)&=f_1(x, \lambda)+n(\lambda)f_2(x, \lambda), \end{aligned} \tag{10.14.2}$$

где $m(\lambda)$ и $n(\lambda)$ мы определяем очень похоже на то, как определяли $m_\infty(\lambda)$ в § 10.12, а именно полагаем

$$m(\lambda)=\lim_{x\to a}\frac{-f_1(x,\lambda)}{f_2(x,\lambda)}, \quad n(\lambda)=\lim_{x\to b}\frac{-f_1(x,\lambda)}{f_2(x,\lambda)}. \qquad (10.14.3)$$

Из аналога уравнения (10.9.6), считая в нем $b$ сначала положительным, а затем отрицательным, получаем, что $\operatorname{Im} m(\lambda)$ и $\operatorname{Im} n(\lambda)$ не равны нулю при $\operatorname{Im}\lambda\neq 0$ и противоположны по знаку. Поэтому, когда обе концевые точки имеют тип предельной точки, не существует решения уравнения $T_0 f=\lambda f$, принадлежащего $L^2$ для невещественного $\lambda$, и мы можем теперь показать, что оператор $A$, заданный в (10.14.1), является самосопряженным. Прежде всего если допустить, что $A^*$ не равен $A$, то $A^*$ был бы по крайней мере ограничением $A$, так как нетрудно видеть, что оператор, сопряженный минимальному оператору $T$, заданному посредством

$$D(T)=C_0^\infty, \quad Tf=T_0 f,$$

равен $A$ (см. 10.14.1). Поэтому $A^*$ равен $T^{**}$, т. е. равен замыканию $T$, которое содержится в $A$. Но $A$ не имеет невещественных собственных значений, следовательно, индексы дефекта $A^*$ равны (0, 0), откуда с учетом замкнутости $A$ и $A^*$ следует, что $A^*=A$.

Вместо формул (10.12.6) и (10.12.7) для разложения функции $g(y)\in L^2(a, b)$ по собственным функциям мы имеем (см. книгу Коддингтона и Левинсона [1955])

$$h_j(s)=\int_a^b f_j(y, s)\,g(y)\,dy \quad (j=1, 2), \qquad (10.14.4)$$

$$g(x)=\sum_{j,k=1}^{2}\int_{-\infty}^{\infty} f_j(x, s)\,h_k(s)\,d\rho_{jk}(s). \qquad (10.14.5)$$

Наконец, вместо формулы (10.12.4) для $\rho$ имеем

$$\rho_{jk}(t)=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2\pi i}\int^{t}[M_{jk}(s+i\varepsilon)-M_{jk}(s-i\varepsilon)]\,ds, \qquad (10.14.6)$$

где

$$M_{jk}=\frac{1}{2[m(\lambda)-n(\lambda)]}\begin{pmatrix} 2 & m(\lambda)+n(\lambda)\\ m(\lambda)+n(\lambda) & 2m(\lambda)\,n(\lambda)\end{pmatrix}. \qquad (10.14.7)$$

Примеры будут рассмотрены в следующих двух параграфах. Часто суммирование в (10.14.5) обходится введением новой переменной вместо $s=\lambda$ или эквивалентным действием. Например, для оператора $-(d/dx)^2$ имеются две собственные функции непрерывного спектра для каждого $\lambda>0$, а именно $e^{\pm i\sqrt{\lambda}x}$, но их можно записать в виде $e^{isx}$, где теперь новая переменная $s=\sqrt{\lambda}$ меняется от $-\infty$ до $\infty$.

## 10.15. УРАВНЕНИЕ БЕССЕЛЯ

При разделении переменных в двумерном приведенном волновом уравнении $\nabla^2 u + k^2 u = 0$ в полярных координатах $r$, $\theta$ путем представления решения в виде $u(r, \theta) = R(r)\,\Theta(\theta)$ мы получаем для множителя $R(r)$ уравнение

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) + \left(k^2 - \frac{l^2}{r^2}\right)R = 0, \tag{10.15.1}$$

где $l^2$ — константа разделения; $k^2$ играет роль параметра собственного значения $\lambda$. В задаче о приведенном волновом уравнении появляются только целые значения $l$, но мы потребуем лишь, чтобы $l$ было вещественным. Во всяком случае, поскольку в уравнении фигурирует только $l^2$, мы можем считать, что $l \geqslant 0$. Если положить $r = x$, $k^2 = \lambda$ и $\sqrt{r}\,R(r) = f(x)$, то уравнение (10.15.1) можно записать как

$$-f'' + \frac{l^2 - 1/4}{x^2} f = \lambda f. \tag{10.15.2}$$

Это уравнение имеет вид уравнения Штурма—Лиувилля в интервале $(0, \infty)$, причем $p = 1$, $q = (l^2 - 1/4)/x^2$. Согласно критерию § 10.9, правая концевая точка $x = \infty$ имеет тип предельной точки для всех значений $l$. Левая концевая точка $x = 0$ является регулярной особой точкой. Определяющее уравнение выглядит так: $\alpha^2 - \alpha + (-l^2 + {}^1/_4) = 0$, откуда $\alpha = 1/2 \pm l$, и значит, $x = 0$ имеет тип предельной окружности при $0 \leqslant l < 1$ и тип предельной точки при $l \geqslant 1$.

Сначала допустим, что $l \geqslant 1$, т. е. что нет необходимости в граничных условиях, и оператор $A_l$, определенный в $L^2(0, \infty)$ следующим образом:

$$\begin{aligned} D(A_l) &= \{f \in L^2 \colon\ T_0 f \in L^2\}, \\ A_l f &= T_0 f = -f'' + \frac{l^2 - 1/4}{x^2} f, \end{aligned} \tag{10.15.3}$$

самосопряжен. Несколько изменив рассуждения предыдущего параграфа, фундаментальные решения $f_1$ и $f_2$ уравнения $T_0 f = \lambda f$ можно взять в виде

$$\begin{aligned} f_1(r, \lambda) &= \sqrt{\frac{\pi r}{2}}\, J_l(kr) \sim \frac{1}{\sqrt{k}} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \\ f_2(r, \lambda) &= \sqrt{\frac{\pi r}{4}}\, Y_l(kr) \sim \frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \end{aligned} \tag{10.15.4}$$

где $J_l$ и $Y_l$ — функции Бесселя и Неймана и

$$k = \sqrt{\lambda}, \quad \operatorname{Re} k > 0. \tag{10.15.5}$$

Символ $\sim$ указывает на то, что данное асимптотическое представление имеет силу при $r \to \infty$. В отличие от соответствующих функций в предыдущем параграфе функции $f_1$ и $f_2$ не являются целыми функциями $\lambda$ при фиксированном $r$, но аналитичны в плоскости $\lambda$ с разрезом вдоль отрицательной вещественной полуоси. Из асимптотических представлений или из разложений около $r=0$ мы находим, что вронскиан имеет значение

$$f_1 f_2' - f_2 f_1' = 1.$$

Как и в § 10.14, в случае $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$ мы обозначим решения, квадратично интегрируемые вблизи нуля и бесконечности, соответственно через

$$\begin{aligned} f_3(x, \lambda) &= f_1(x, \lambda) + m(\lambda) f_2(x, \lambda), \\ f_4(x, \lambda) &= f_1(x, \lambda) + n(\lambda) f_2(x, \lambda). \end{aligned} \tag{10.15.6}$$

Тогда $f_3 f_4' - f_4 f_3' = n(\lambda) - m(\lambda)$, а функция Грина будет иметь вид

$$G(x, y) = G(x, y; \lambda) = \frac{1}{m(\lambda) - n(\lambda)} \begin{cases} f_3(x, \lambda) f_4(y, \lambda), & x < y, \\ f_4(x, \lambda) f_3(y, \lambda), & x > y. \end{cases} \tag{10.15.7}$$

Нам известно, что $\sqrt{r} J_l(kr)$ при $l \geqslant 1$ квадратично интегрируема в любом интервале $(0, c)$, тогда как $\sqrt{r} Y_l(kr)$ не является таковой из-за особенности $Y_l$ при $r=0$. Поэтому $f_3 \equiv f_1$, т. е. $m(\lambda) \equiv 0$. Для того чтобы определить $n(\lambda)$, введем функции Ганкеля

$$\begin{aligned} H_l^{(1)}(z) &= J_l(z) + iY_l(z) \sim \sqrt{2/(\pi z)}\, e^{i(z - l\pi/2 - \pi/4)}, \\ H_l^{(2)}(z) &= J_l(z) - iY_l(z) \sim \sqrt{2/(\pi z)}\, e^{-i(z - l\pi/2 - \pi/4)}. \end{aligned} \tag{10.15.8}$$

Ясно, что для получения решения, квадратично интегрируемого на $(c, \infty)$, нужно взять $f_4$ пропорциональной функции $\sqrt{r} H_l^{(1)}(kr)$ при $\operatorname{Im} k > 0$ и пропорциональной $\sqrt{r} H_l^{(2)}(kr)$ при $\operatorname{Im} k < 0$. Для $\operatorname{Re} k > 0$ по предположению $\operatorname{Im} k$ имеет тот же знак, что и $\operatorname{Im}\lambda$; следовательно,

$$m(\lambda) = 0, \quad n(\lambda) = i \operatorname{sign} \operatorname{Im}(\lambda). \tag{10.15.9}$$

Обсудим теперь спектр оператора $A_l$. Прежде всего, поскольку $\sqrt{r} J_l(kr)$ не интегрируема квадратично на $(0, \infty)$ при любом $k$, собственных функций (в строгом смысле) не существует, т. е. точечный спектр пуст. Для $\lambda < 0$ можно взять $k = i\sqrt{-\lambda}$, где имеется в виду положительное значение квадратного корня, и $f_4 = \sqrt{\pi r/2}\, H_l^{(1)}(kr)$. Тогда из (10.15.7) нетрудно установить, что интегральный оператор $(A_l - \lambda)^{-1} = \int G(x, y) \ldots dy$ ограничен.

Следовательно, отрицательная вещественная полуось плоскости $\lambda$ принадлежит резольвентному множеству, и мы приходим к выводу, что спектр полностью непрерывен и лежит на полуоси $[0, \infty)$.

Разложение по собственным функциям задается формулами (10.14.4)—(10.14.7) § 10.14, но со следующей модификацией. Когда $\lambda$ пересекает отрицательную вещественную полуось, претерпевает скачок не только $n(\lambda)$, но и функции $f_1$ и $f_2$ (тогда как $m(\lambda) \equiv 0$), причем таким образом, что функция Грина $G(x, y; \lambda)$ остается непрерывной при этом переходе $\lambda$ через полуось, потому что отрицательная полуось принадлежит резольвентному множеству, а функция Грина является ядром резольвенты $(A_l - \lambda)^{-1}$, которое непрерывно на резольвентном множестве. Поэтому $G(x, y; s+i\varepsilon) - G(x, y; s-i\varepsilon) \to 0$ при $\varepsilon \to 0$. Следовательно, $\rho_{jk}(t)$ определяется формулой (10.14.6) для $t \geqslant 0$ и является константой для $t < 0$. Принимая эту константу равной нулю, получаем

$$(\rho_{jk}(t)) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \text{для } t < 0, \\ \begin{pmatrix} t/\pi & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \text{для } t \geqslant 0. \end{cases} \tag{10.15.10}$$

Итак, разложение по собственным функциям для заданной функции $g(r) \in L^2(0, \infty)$ имеет вид

$$h(s) = h_1(s) = \int_0^\infty \sqrt{\pi r/2}\, J_l(\sqrt{s}r)\, g(r)\, dr, \tag{10.15.11}$$

$$g(r) = (1/\pi) \int_0^\infty \sqrt{\pi r/2}\, J_l(\sqrt{s}r)\, h(s)\, ds. \tag{10.15.12}$$

Согласно Титчмаршу [1946], этот результат принадлежит Ганкелю.

При $0 \leqslant l < 1$ точка $r = 0$ имеет тип предельной окружности. Поэтому существует много самосопряженных расширений минимального оператора, соответствующего $T_0$, зависящих от граничного условия при $r = 0$, которое следует брать из физических соображений. Не затрагивая общий случай, мы лишь отметим, что при $l = 0$ в задаче о приведенном волновом уравнении $\nabla^2 u + k^2 u = 0$ в двух измерениях разумным требованием является самосопряженность $\nabla^2$ как оператора в пространстве $L^2(\mathbb{R}^2)$. Тогда, как будет показано в следующей главе, хотя $f_1$ и $f_2$ ограничены и поэтому квадратично интегрируемы на $(0, c)$ для любого $c < \infty$, решение $R(r) = Y_0(kr)$ следует исключить из-за логарифмической особенности при $r = 0$. После этого все приведенные выше формулы имеют силу при $l=0$. Отметим мимоходом, что в соответствующей задаче о релятивистском водородоподобном атоме с орбитальным квантовым числом $l=0$ требование, заключающееся в том, чтобы волновая функция была *конечной* в начале координат (как $J_0(kr)$ в нашем случае), было бы неприемлемым (гамильтониан не был бы самосопряженным, и не существовало бы вообще никаких собственных функций); см. § 10.17.

Из-за нулей в матрице (10.15.10) второе решение $f_2$ (10.15.4) не входит в разложение по собственным функциям. Поэтому спектр является простым (кратность равна единице). Это следствие свойств функции $f_1(x, \lambda)$. В самом деле, Йоргенс и Реллих [1976] доказали для любого оператора Штурма—Лиувилля на $x$-интервале $(a, b)$ следующую теорему.

**Теорема.** *Пусть $Q$—открытый прямоугольник в плоскости $\lambda$, симметричный относительно вещественной оси* (*см. рис.* 10.1) *и содержащий интервал* $[\lambda_1, \lambda_2]$, *в котором нет собственных значений оператора $A$. Допустим, что существует решение $f_1(x, \lambda)$ уравнения $T_0 f=\lambda f$, такое, что*

(1) *$f_1$ аналитична по $\lambda$ в $Q$ и вещественна для вещественного $\lambda$;*

(2) *ни для какого $\lambda \in Q$ $f_1$ как функция $x$ не обращается тождественно в нуль;*

(3) *$f_1 \in L^2(a, c)$ для всех $\lambda \in Q$ при некотором $c$, $a<c<b$. Тогда спектр оператора $A$ в $[\lambda_1, \lambda_2]$ имеет кратность $\leqslant 1$. Ясно, что в условии* (3) *$L^2(a, c)$ можно заменить на $L^2(c, b)$.*

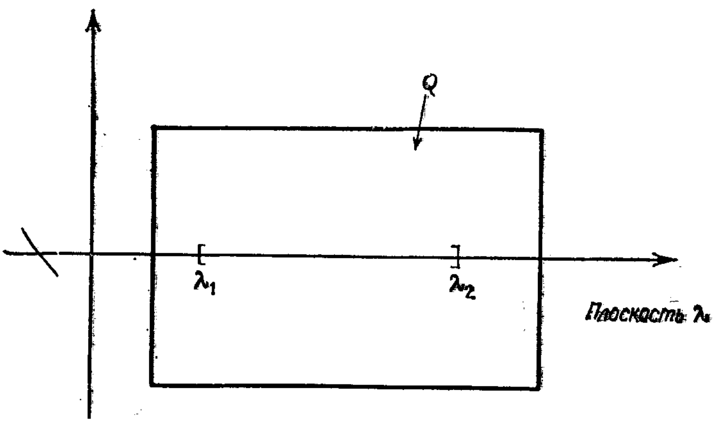


Рис. 10.1. Диаграмма для теоремы Йоргенса и Реллиха.

**Замечание.** Кратность, равная нулю, означала бы, что в $[\lambda_1, \lambda_2]$ спектр пуст.

Применение данной теоремы читатель найдет в следующем параграфе.

Упражнение.

1. Рассмотрите задачи на собственные значения для уравнения (10.15.2) на интервалах $(0, a)$, $(a, b)$ и $(a, \infty)$. Найдите соответствующие разложения по собственным функциям.

## 10.16. НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЙ ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

Уравнение Шредингера для стационарных состояний электрона в кулоновом поле с фиксированным точечным зарядом $Ze$ в начале координат записывается в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u+\frac{-Ze^2}{r}u=Eu$$

(в обычных обозначениях). Здесь нет никакого безразмерного параметра. Путем подходящего выбора единиц длины и энергии это уравнение можно записать в виде

$$-\nabla^2 u-(2/r)\,u=\lambda u. \tag{10.16.1}$$

Разделением переменных можно получить решения специального вида $u=R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)$ в сферических координатах $r$, $\theta$, $\varphi$. Обозначая $rR(r)$ через $f(r)$, получаем радиальное уравнение следующего вида:

$$T_0 f\overset{\text{def}}{=}-f''+\left(\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2}{r}\right)f=\lambda f, \tag{10.16.2}$$

где $l$ — неотрицательное целое. Это задача Штурма—Лиувилля на $(0, \infty)$. Как и в задаче об уравнении Бесселя, в данной задаче имеет место случай предельной точки на бесконечности для всех $l$ и этот же случай при $r=0$ для $l=1, 2, \ldots$. Для $l=0$ в нуле имеем случай предельной окружности.

Для $l=1, 2, \ldots$ оператор $A_l$, определяемый формулами

$$\boldsymbol{D}(A_l)=\{f\in L^2(0, \infty)\colon T_0 f\in L^2\},\quad A_l f=T_0 f, \tag{10.16.3}$$

самосопряжен. Для $l=0$ в точке $r=0$ необходимо поставить граничное условие: оно может быть взято в виде (10.13.6) и зависеть от параметра $\beta\in[0, \pi)$. Самосопряженный оператор с таким граничным условием мы обозначим через $A_{0\beta}$.

Для $l\geqslant 1$ собственные значения оператора $A_l$ суть

$$\lambda_n=-1/n^2,\quad n=l+1,\ l+2,\ \ldots \tag{10.16.4}$$

(формула Бальмера для энергетических уровней); все они являются простыми. Обозначим через $\varphi_{nl}(r)$ соответствующие нормированные собственные функции, которые можно найти в любой книге по квантовой механике.

Йоргенс и Реллих [1976] исследовали собственные значения операторов $A_{0\beta}$ и обнаружили, что они лежат в интервалах

$$-\frac{1}{(n-1)^2} < \lambda_n \leqslant -\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \ldots . \tag{10.16.5}$$

Для одного значения $\beta$, именно $\beta = 0$, по Йоргенсу и Реллиху $\lambda_n$ достигает верхнего предела интервала (10.16.5). Отсюда следует, что в этом случае формула Бальмера справедлива также и для $l = 0$. Рассматривая полный гамильтониан $-\nabla^2 - 2/r$, можно показать, что $\beta = 0$ дает физически корректное граничное условие (см. следующую главу).

Йоргенс и Реллих доказали следующие свойства спектра для $l \geqslant 1$: (1) собственными значениями оператора $A_l$ являются лишь те числа, которые дает формула Бальмера (10.16.4); (2) на полуоси $\lambda < 0$ нет непрерывных частей спектра, т. е. любой интервал на $\lambda < 0$, не содержащий какого-либо значения (10.16.4), принадлежит резольвентному множеству; (3) неотрицательная вещественная полуось $\lambda \geqslant 0$ составляет непрерывный спектр; (4) этот спектр простой.

Решением уравнения $T_0 f = \lambda f$ является функция

$$f(r, \lambda) = r^{l+1} e^{-i\sqrt{\lambda} r} F\left(l + 1 + i/\sqrt{\lambda},\ 2l+2,\ 2i\sqrt{\lambda} r\right), \tag{10.16.6}$$

где $\sqrt{\lambda}$ обозначает главную ветвь квадратного корня ($|\arg\sqrt{\lambda}| < \pi/2$), а $F$ — вырожденная гипергеометрическая функция Куммера

$$F(a, c, z) = {}_1F_1(a; c; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(c)_n n!} z^n, \tag{10.16.7}$$

где

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_n = a(a+1)\ldots(a+n-1) \quad \text{для } n > 0. \tag{10.16.8}$$

Это решение $f(r, \lambda)$ является аналитической функцией в плоскости с разрезом $|\arg\lambda| < \pi$ при фиксированном $r$, оно квадратично интегрируемо по $r$ на $(0, c)$ $(c < \infty)$ для любого $\lambda$; наконец, несмотря на свой внешний вид, это решение вещественно для вещественного $\lambda$. Поэтому простота непрерывного спектра следует из теоремы предыдущего параграфа.

Согласно Йоргенсу и Реллиху, разложение по собственным функциям для данной функции $g(r)$ из $L^2(0, \infty)$ имеет вид

$$g(r) = \sum_{n=l+1}^{\infty} c_n \varphi_{nl}(r) + \int_0^{\infty} f(r, s) h(s)\, d\rho(s), \tag{10.16.9}$$

где

$$c_n = \int_0^\infty \varphi_{nl}(r)\, g(r)\, dr, \qquad (10.16.10)$$

$$h(s) = \int_0^\infty f(r,\ s)\, g(r)\, dr, \qquad (10.16.11)$$

а спектральная функция $\rho(s)$ задана формулой

$$d\rho(s) = \frac{1}{2\pi}(2\sqrt{s})^{2l+1} e^{\pi/\sqrt{s}} \left| \frac{\Gamma(l+1+i/\sqrt{s})}{\Gamma(2l+2)} \right|^2 ds. \qquad (10.16.12)$$

Эти формулы справедливы и для $l=0$, если в граничном условии для оператора $A_{0\beta}$ положить $\beta=0$.

## 10.17. РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

В релятивистском случае имеется безразмерный параметр $\alpha=\alpha_0 Z$, причем $\alpha_0=e^2/(\hbar c)=(137.03)^{-1}$. Исходя из физических соображений, можно считать, что формулировка этой задачи теряет смысл для $Z \gtrsim 137$, и мы принимаем $0<\alpha<1$. Как будет показано в следующей главе, имеются две радиальные функции $f(r)$ и $g(r)$. Выберем в качестве единиц длины и энергии $\hbar/(mc)$ и $mc^2$ соответственно; тогда уравнения для $f$ и $g$ запишутся в виде

$$\left.\begin{aligned} &\left(\lambda+1+\frac{\alpha}{r}\right) f - g' - \frac{1+k}{r} g = 0, \\ &\left(\lambda-1+\frac{\alpha}{r}\right) g + f' + \frac{1-k}{r} f = 0 \end{aligned}\right\} \quad (0<r<\infty), \qquad (10.17.1)$$

где $k$ — целое число, отличное от нуля, а $\lambda$ — энергия. Исключение одной из функций, скажем $f$, приводит к уравнению второго порядка для другой функции, именно

$$g'' + Pg' + Qg = 0, \qquad (10.17.2)$$

где

$$\begin{aligned} P(r) &= \frac{3}{r} - \frac{\lambda+1}{(\lambda+1)r+\alpha}, \\ Q(r) &= \left(\lambda+\frac{\alpha}{r}\right)^2 - 1 - \frac{k^2+k}{r^2} + \frac{(k+1)\alpha}{r^2[(\lambda+1)r+\alpha]}. \end{aligned} \qquad (10.17.3)$$

Это уравнение можно формально привести к самосопряженному виду $-(pg')'+qg=0$, положив

$$p(r) = \exp\int P(r)\, dr, \quad q(r) = -p(r)\, Q(r).$$

Однако этот результат не имеет вида уравнения Штурма—Лиувилля вследствие того, что параметр $\lambda$ (собственное значение) входит в уравнение весьма сложным образом. Тем не менее, как показали Роос и Сангрен [1962], можно воспользоваться идеями предыдущих параграфов.

Введем двухкомпонентный вектор $\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$ и оператор $T_0$ следующим образом:

$$T_0\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}=\frac{1}{r}\begin{pmatrix} (rg)' \\ -(rf)' \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} -1-\alpha/r & k/r \\ k/r & 1-\alpha/r \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \qquad (10.17.4)$$

В силу симметрии входящей сюда матрицы видно, что оператор формально самосопряжен относительно скалярного произведения

$$\left(\begin{pmatrix} f_1 \\ g_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} f_2 \\ g_2 \end{pmatrix}\right)=\int_a^b (\bar{f}_1 f_2+\bar{g}_1 g_2)\, r^2\, dr, \qquad (10.17.5)$$

а уравнения (10.17.1) принимают вид

$$T_0\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \qquad (10.17.6)$$

Допустим теперь, что $f$ и $g$ удовлетворяют этим уравнениям. Умножим первое уравнение из (10.17.1) на $\bar{f}$, второе — на $\bar{g}$, сложим их и, умножив на $r^2$, проинтегрируем по $r$ от $a$ до $b$ $(0<a<b<\infty)$. Затем проинтегрируем член, содержащий $(r\bar{g})(rf)'$, по частям. Большинство полученных членов вещественны, и, взяв всюду мнимые части, мы найдем, что

$$\operatorname{Im}\lambda \int_a^b (|f|^2+|g|^2)\, r^2\, dr+[r^2 \operatorname{Im}\bar{g}(r) f(r)]_a^b=0. \qquad (10.17.7)$$

Положим теперь $a=1$ и допустим, что существуют два решения (мы будем отмечать их индексами 1 и 2), такие, что

$$\begin{aligned} f_1(1)&=0, & f_2(1)&=1,\\ g_1(1)&=1, & g_2(1)&=0. \end{aligned} \qquad (10.17.8)$$

Тогда общее решение (с точностью до постоянного множителя) имеет вид

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f_1 \\ g_1 \end{pmatrix}+m\begin{pmatrix} f_2 \\ g_2 \end{pmatrix}, \qquad (10.17.9)$$

соответствующий (10.9.4), причем $m$ — комплексное число. Подставим это решение в (10.17.7). Из начальных условий (10.17.8) следует, что $\operatorname{Im}\overline{g(1)}f(1)=\operatorname{Im} m$, и поэтому

$$-\operatorname{Im} m+\operatorname{Im}\lambda \int_1^b (|f|^2+|g|^2)\, r^2\, dr=F(m;\, b)\overset{\text{def}}{=}-b^2 \operatorname{Im}\overline{g(b)}\, f(b)=$$

$$=A|m|^2+B\operatorname{Re} m+C\operatorname{Im} m+D, \qquad (10.17.10)$$

как в (10.9.6)—(10.9.8), где теперь

$$A = -b^2 \operatorname{Im} \overline{g_2(b)} f_2(b) = \operatorname{Im}\lambda \int_1^b (|f_2|^2 + |g_2|^2) r^2 dr. \quad (10.17.11)$$

Далее теория совпадает с изложенной в § 10.9—10.14, за исключением того, что гильбертово пространство $L^2(a, b)$ заменяется гильбертовым пространством $\boldsymbol{H}(a, b)$ со скалярным произведением типа $L^2$, заданным формулой (10.17.5). В частности, здесь применимы свойства концевых точек типа предельной точки и типа предельной окружности.

Легко видеть, что концевая точка $r=\infty$ имеет тип предельной точки. Из уравнений (10.17.1) следует, что $f$ и $g$ асимптотически ведут себя или обе как $e^{\mu r}$, или обе как $e^{-\mu r}$, где $\mu = \sqrt{1-\lambda^2}$. Значит, лишь в одном из этих случаев осуществляется квадратичная интегрируемость на $(1, \infty)$ для $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$.

Концевая точка $r=0$, как видно из (10.17.2), (10.17.3), будет регулярной особой точкой уравнения для $g$. В обозначениях (10.10.2) $P_0 = 3$, $Q_0 = \alpha^2 - k^2 + 1$. Поэтому определяющее уравнение (в котором теперь показатель обозначается через $\gamma$, а не через $\alpha$) записывается в виде $(\gamma+1)^2 + \alpha^2 - k^2 = 0$, откуда $\gamma_1, \gamma_2 = -1 \pm \sqrt{k^2-\alpha^2}$. При малых $r$ два решения уравнения (10.17.2) ведут себя, как $g(r) \sim r^{\gamma_1}$ и $g(r) \sim r^{\gamma_2}$.

Допустим теперь, что $\alpha < \sqrt{3/4}$, т.е. $Z \leqslant 118$ Квантовое число $k$ представляет собой отличное от нуля целое, и значит, $k^2 \geqslant 1$. Мы видим, что $\gamma_1 > -1/2$, $\gamma_2 < -3/2$. Поэтому $|g|^2 r^2$ интегрируемо на $(0, 1)$ для $\gamma = \gamma_1$, но не интегрируемо для $\gamma = \gamma_2$. Следовательно, в $r=0$ имеет место случай предельной точки, а оператор, определяемый формулами

$$\boldsymbol{D}(A) = \left\{ \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \in \boldsymbol{H}(0, \infty) \colon T_0 \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \in \boldsymbol{H} \right\}, \quad A \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = T_0 \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix},$$

самосопряжен без каких-либо граничных условий.

Для $\sqrt{3/4} < \alpha < 1$ $(119 \leqslant Z \leqslant 137)$ в концевой точке $r=0$ все еще имеет место случай предельной точки при $|k| \geqslant 1$, но он переходит в случай предельной окружности при $k = \pm 1$, поскольку тогда оба показателя $\gamma_1$ и $\gamma_2$ больше или равны $-3/2$, так что для всех решений $g$ $|g|^2 r^2$ интегрируемо на $(0, 1)$. В этом случае для каждого невещественного $\lambda$ решение, ведущее себя подобно $e^{-\mu r}$ $(\mu = \sqrt{1-\lambda^2},\ \operatorname{Re}\mu > 0)$, принадлежит $\boldsymbol{H}$. Поэтому индексы дефекта минимального оператора, основанного на $T_0$, равны (1, 1), и для получения самосопряженного оператора требуется граничное условие при $r=0$. Физически приемлемое граничное условие будет обсуждаться в следующей главе.