詳細解答

STEP III 1988，第 7 題

純數學 • 微分方程與正交性

> **STEP III 1988，第 7 題**
>
> 繼續閱讀之前，請先看題目（原題為英文）。題目載於 STEP Support Programme 的試題資料庫：
>
> step.maths.org/questions/88-s3-q7

本題在 *Beyond STEP* 第 8.6 節量子振子中有完整的引導式講解：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hant/ch08/quantum-oscillator.html

關鍵思路

第一部分純粹是代入（substitution）：把試探函數（trial function）求導兩次，再比較 x 各次冪的係數，便可確定 λ。第二部分是經典的「朗斯基技巧」（Wronskian trick）：組合 $y_m y_n' - y_n y_m'$ 的導數中，麻煩的 $\omega^2 x^2$ 項會互相抵消，只剩下 $y_m y_n$ 的一個倍數。之後把這個導數在整條實數線上積分就很容易，因為在 $\pm\infty$ 處的條件令邊界項（boundary terms）全部消失。

解答

全篇以撇號表示 $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$。把方程寫成以下形式會比較方便：

$$y_n'' = \left(\omega^2 x^2 - (2n+1)\omega\right) y_n. \tag{$*$}$$

$n = 0$ 的情況

取 $y_0 = \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，則

$$y_0' = -2\lambda x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}, \qquad y_0'' = \left(4\lambda^2 x^2 - 2\lambda\right)\mathrm{e}^{-\lambda x^2}.$$

代入 $n = 0$ 時的 $(*)$，並約去非零因子 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，我們需要

$$4\lambda^2 x^2 - 2\lambda = \omega^2 x^2 - \omega \quad \text{對所有} x.$$

比較常數項得 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$，這時 x^2 項亦相符，因為 $4\lambda^2 = \omega^2$。（$4\lambda^2 = \omega^2$ 的另一個根 $\lambda = -\frac{1}{2}\omega$ 不滿足常數項的要求。）

$n = 1$ 的情況

取 $y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，則

$$\begin{aligned} y_1' &= (1 - 2\lambda x^2)\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}, \\ y_1'' &= \big(-4\lambda x - 2\lambda x(1 - 2\lambda x^2)\big)\mathrm{e}^{-\lambda x^2} = (4\lambda^2 x^3 - 6\lambda x)\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}. \end{aligned}$$

$n = 1$ 時的方程 $(*)$ 要求 $y_1'' = (\omega^2 x^2 - 3\omega)\,x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，即

$$4\lambda^2 x^3 - 6\lambda x = \omega^2 x^3 - 3\omega x \quad \text{對所有} x,$$

而這同樣恰好在 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$ 時成立。因此同一個常數對兩個函數都適用：

$$\lambda = \tfrac{1}{2}\omega, \qquad y_0 = \mathrm{e}^{-\omega x^2/2}, \qquad y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\omega x^2/2}.$$

無窮遠處的條件

由於 $\lambda = \frac{1}{2}\omega > 0$，凡是形如（多項式）$\times \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 的函數，當 $x \to \pm\infty$ 時都趨向 0，因為 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 衰減的速度比 x 的任何次冪增長的速度都要快。函數 y_0、y_0'、y_1 和 y_1' 全部屬於這種形式（對應的多項式分別是 1、$-2\lambda x$、x 和 $1 - 2\lambda x^2$），所以這四個函數在兩端都趨向 0，符合要求。

恆等式

根據積法則（product rule），$y_m' y_n'$ 項互相抵消：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big(y_m y_n' - y_n y_m'\big) = y_m' y_n' + y_m y_n'' - y_n' y_m' - y_n y_m'' = y_m y_n'' - y_n y_m''.$$

現在對 y_n'' 和 y_m'' 都使用 $(*)$：

$$\begin{aligned} y_m y_n'' - y_n y_m'' &= \big(\omega^2 x^2 - (2n+1)\omega\big) y_m y_n - \big(\omega^2 x^2 - (2m+1)\omega\big) y_m y_n \\ &= \big((2m+1) - (2n+1)\big)\omega\, y_m y_n \\ &= 2(m-n)\,\omega\, y_m y_n, \end{aligned}$$

這就是所要求的結果。

正交性

想一想 在嘗試證明這個無窮積分等於零之前，我們怎樣知道它確實存在？

我們先在有限區間上處理，再讓兩個端點分別趨向無窮；這樣存在性便自然而然地得到。記 $W = y_m y_n' - y_n y_m'$。對任意 $S, R > 0$，把恆等式由 $-S$ 積分至 R，得

$$2(m-n)\,\omega \int_{-S}^{R} y_m y_n \,\mathrm{d}x = W(R) - W(-S).$$

當 $R \to \infty$ 時，根據題目所給的條件，y_m, y_n, y_m', y_n' 各自趨向 0，所以 $W(R) \to 0$。同理，當 $S \to \infty$ 時 $W(-S) \to 0$。因此右邊趨向 0，故積分 $\int_{-\infty}^{\infty} y_m y_n \,\mathrm{d}x$ 收斂(converges)，並且

$$2(m-n)\,\omega \int_{-\infty}^{\infty} y_m y_n \,\mathrm{d}x = 0.$$

若 $m \neq n$，則 $2(m-n)\omega \neq 0$，因為 $\omega > 0$。兩邊除以它，得

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_m(x)\, y_n(x) \,\mathrm{d}x = 0,$$

正如所求。請留意，這裏只用到方程本身和兩端的條件：我們從來不需要 y_m 或 y_n 的具體公式。

驗算

- 當 $m = 0$、$n = 1$ 時，結果可以直接看出：$y_0 y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\omega x^2}$ 是奇函數（odd function），所以它在整條實數線上的積分是 0。
- 一個沒那麼顯然的檢驗：$y_2 = (2\omega x^2 - 1)\mathrm{e}^{-\omega x^2/2}$ 滿足 $n = 2$ 時的方程（不妨自己試試）。利用 $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\omega}$ 和 $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$，可得 $\int y_0 y_2 \,\mathrm{d}x = 2\omega \cdot \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega} - \sqrt{\pi/\omega} = 0$。
- 數值方面，取 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$ 時，方程在隨機點上的殘差（residual）對 $n = 0, 1, 2$ 都小於 10^{-6}；以有限差分（finite differences）檢驗，導數恆等式準確至 10^{-4}；而在 $[-30, 30]$ 上使用辛普森法則（Simpson's rule），對 $\omega = 0.5, 1, 2.5$，$\int y_0 y_1$、$\int y_0 y_2$、$\int y_1 y_2$ 全部小於 10^{-15}。

常見錯誤

- 只比較 x^2 的係數而得出 $\lambda = \pm\frac{1}{2}\omega$：常數項排除了負號（無窮遠處的衰減條件亦然）。
- 忘記說明邊界項為何消失：這正是同時用到 y_n 和 y_n' 兩個條件的地方。
- 除以 $m - n$ 時，沒有指出它不等於零，亦沒有指出 $\omega > 0$。

STEP 之外

這就是量子諧振子（quantum harmonic oscillator）：y_n 是它的能量態，$(2n+1)\omega$ 是它的能級（相差一個比例常數），而這些函數是埃爾米特多項式（Hermite polynomials）乘以一個高斯函數（Gaussian）。這個正交性（orthogonality）論證是施圖姆－劉維爾理論（Sturm–Liouville theory）的一個特例；該理論證明，自伴（self-adjoint）微分算子對應於不同特徵值（eigenvalue）的特徵函數（eigenfunction）必定正交，正如對稱矩陣的特徵向量（eigenvector）一樣。Boyce 與 DiPrima 所著的 *Elementary Differential Equations*（微分方程入門教材）涵蓋邊值問題和施圖姆－劉維爾理論。

Beyond STEP 詳細解答：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hant/。解答文字採用 CC0 1.0；題目本身版權屬 Cambridge University Press & Assessment 所有（©），本文件不予轉載。由機器從英文翻譯而成；尚未經審閱。