МЕХАНИКА
ТВЕРДОГО ТЕЛА
№ 6 • 2001

УДК 539.3

© 2001 г. А.А. ЛОКШИН, Е.А. САГОМОНЯН

ТЕОРЕМА ВИРИАЛА ДЛЯ ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ХИЛЛА

Как известно, уравнение Хилла с так называемыми непериодическими граничными условиями описывает распространение гармонических волн в периодических структурах [1]; сходные уравнения несколько более общего вида возникают также в задачах квантовой химии [2]. В заметке устанавливается новое интегральное тождество, характеризующее решения рассматриваемых уравнений; это интегральное тождество, сходное по своему характеру с теоремой вириала [3].

Итак, пусть $-\infty < x < \infty$; рассмотрим обобщенное уравнение Хилла

$$Hu \equiv \left[-\frac{d}{dx}F(x)\frac{d}{dx}+V(x)\right]u(x)=Eu(x) \tag{1}$$

в котором функции $F(x)$ и $V(x)$ считаются гладкими, вещественными и 2π-периодическими. Будем анализировать те решения уравнения (1), для которых справедливы так называемые "непериодические граничные условия":

$$u(x+2\pi)=e^{i\sigma}u(x) \tag{2}$$

где σ – некоторое постоянное вещественное число[1].

Пусть $a = \text{const} > 0$; сделаем в уравнении (1) масштабное преобразование $x = a\tilde{x}$. Тогда это уравнение перепишется в следующем виде:

$$\left[-\frac{1}{a^2}\frac{d}{d\tilde{x}}F(a\tilde{x})\frac{d}{d\tilde{x}}+V(a\tilde{x})\right]u(a\tilde{x})=Eu(a\tilde{x}) \tag{3}$$

Для упрощения обозначений положим

$$u(a\tilde{x})=u_a(\tilde{x}),\quad F(a\tilde{x})=F_a(\tilde{x}),\quad V(ax)=V_a(\tilde{x}) \tag{4}$$

а затем условимся опускать волну над x.

Ясно, что с учетом (4) уравнение (3) перепишется в следующем эквивалентном виде:

$$\left[-\frac{d}{dx}F_a(x)\frac{d}{dx}+a^2V_a(x)\right]u_a(x)=a^2Eu_a(x) \tag{5}$$

Введем теперь следующее обозначение. Пусть $v(x)$ и $w(x)$ – две произвольные

[1] Как известно, решения уравнения (1), удовлетворяющие условию (2), называются непериодическими устойчивыми решениями.

кусочно непрерывные комплекснозначные функции, определенные на всей вещественной оси. Положим

$$\langle v, w\rangle \equiv \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\bar{v}(x)w(x)dx \tag{6}$$

(черта обозначает комплексное сопряжение).

Пусть $u = u(x)$ – решение уравнения (1), удовлетворяющее условию (2) и нормированное с помощью равенства

$$\langle u, u\rangle = 1 \tag{7}$$

Тогда в силу (1), очевидно, будем иметь

$$\left\langle\left[-\frac{d}{dx}F(x)\frac{d}{dx}+V(x)\right]u, u_a\right\rangle = E\langle u, u_a\rangle \tag{8}$$

С другой стороны, из (5), очевидно вытекает аналогичное равенство:

$$\left\langle u, \left[-\frac{d}{dx}F_a(x)\frac{d}{dx}+a^2V_a(x)\right]u_a\right\rangle = a^2E\langle u, u_a\rangle \tag{9}$$

Вычтем (8) из (9), в результате получим

$$\left(a^2-1\right)E\langle u, u_a\rangle = -\left\langle u, \frac{d}{dx}F_a(x)\frac{du_a}{dx}\right\rangle + \left\langle\frac{d}{dx}F(x)\frac{du}{dx}, u_a\right\rangle +$$

$$+\left(a^2-1\right)\langle u, V_a u_a\rangle + \langle u, \left(V_a - V\right)u_a\rangle \tag{10}$$

Преобразуем второе слагаемое в правой части (10). Интегрируя по частям и учитывая (2), имеем

$$\left\langle\frac{d}{dx}F(x)\frac{du}{dx}, u_a\right\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d}{dx}\left(F(x), \frac{d\bar{u}}{dx}\right)u_a(x)dx =$$

$$= -\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}F(x)\frac{d\bar{u}}{dx}\frac{du_a}{dx}dx + \frac{1}{2\pi}F(2\pi)\frac{d\bar{u}(2\pi)}{dx}u_a(2\pi) -$$

$$-\frac{1}{2\pi}F(0)\frac{d\bar{u}(0)}{dx}u_a(0) = -\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}F(x)\frac{d\bar{u}}{dx}\frac{du_a}{dx}dx + \frac{F(0)}{2\pi}\frac{d\bar{u}(0)}{dx}\left(e^{-i\sigma}u_a(2\pi) - u_a(0)\right) \tag{11}$$

Здесь использовалось то обстоятельство, что $F(0) = F(2\pi)$ и

$$\frac{d\bar{u}(2\pi)}{dx} = e^{\overline{i\sigma}}\frac{d\bar{u}(0)}{dx} = e^{-i\sigma}\frac{d\bar{u}(0)}{dx}$$

(ибо σ – вещественное число). Далее, преобразуем первое слагаемое в правой части (11). Вторично интегрируя по частям, получаем

$$-\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}F(x)\frac{d\bar{u}}{dx}\frac{du_a}{dx}dx = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\bar{u}(x)\frac{d}{dx}\left(F(x)\frac{du_a}{dx}\right)dx -$$

$$-\frac{1}{2\pi}F(2\pi)\bar{u}(2\pi)\frac{du_a(2\pi)}{dx} + \frac{1}{2\pi}F(0)\bar{u}(0)\frac{du_a(0)}{dx} =$$

$$= \left\langle u, \frac{d}{dx}F(x)\frac{du_a}{dx}\right\rangle - \frac{F(0)\bar{u}(0)}{2\pi}\left(e^{-i\sigma}\frac{du_a(2\pi)}{dx} - \frac{du_a(0)}{dx}\right).$$

Теперь (11) может быть переписано в виде

$$\left\langle \frac{d}{dx}F(x)\frac{du}{dx},\ u_a \right\rangle = \left\langle u,\ \frac{d}{dx}F(x)\frac{du_a}{dx} \right\rangle - \frac{F(0)\bar{u}(0)}{2\pi}\left(e^{-i\sigma}\frac{du_a(2\pi)}{dx} - \frac{du_a(0)}{dx} \right) +$$
$$+ \frac{F(0)}{2\pi}\frac{d\bar{u}(0)}{dx}\left(e^{-i\sigma}u_a(2\pi) - u_a(0) \right) \qquad (12)$$

Далее в силу (2) и (4) имеем

$$u_a(0) = u(0), \quad u_a(2\pi) = u(2\pi a) = e^{i\sigma}u(2\pi(a-1))$$
$$\frac{du_a(0)}{dx} = \frac{d}{dx}u(ax)\Big|_{x=0} = au'(0)$$
$$\frac{du_a(2\pi)}{dx} = \frac{d}{dx}u(ax)\Big|_{x=2\pi} = au'(2\pi a) = ae^{i\sigma}u'(2\pi(a-1))$$

Поэтому (12) перепишется в виде

$$\left\langle \frac{d}{dx}F(x)\frac{du}{dx},\ u_a \right\rangle = \left\langle u,\ \frac{d}{dx}F(x)\frac{du_a}{dx} \right\rangle -$$
$$-\frac{aF(0)\bar{u}(0)}{2\pi}\left[u'(2\pi(a-1)) - u'(0)\right] + \frac{F(0)\bar{u}'(0)}{2\pi}\left[u(2\pi(a-1)) - u(0)\right]$$

Подставив найденное выражение в (10), будем иметь

$$\left(a^2-1\right)E\langle u, u_a\rangle = \left\langle u,\ \frac{d}{dx}\left(F(x) - F_a(x)\right)\frac{du_a}{dx} \right\rangle - \frac{aF(0)\bar{u}(0)}{2\pi}\left[u'(2\pi(a-1)) - u'(0)\right] +$$
$$+\frac{F(0)\bar{u}'(0)}{2\pi}\left[u(2\pi(a-1)) - u(0)\right] + \left(a^2-1\right)\langle u, V_a u_a\rangle + \left\langle u,\ \left(V_a - V\right)u_a \right\rangle$$

Откуда, деля на $(a-1)$, получаем

$$(a+1)E\langle u, u_a\rangle = \left\langle u,\ \frac{d}{dx}\frac{F(x) - F_a(x)}{a-1}\frac{du_a}{dx} \right\rangle - \frac{aF(0)\bar{u}(0)}{2\pi}\frac{u'(2\pi(a-1)) - u'(0)}{a-1} +$$
$$+\frac{F(0)\bar{u}'(0)}{2\pi}\frac{u(2\pi(a-1)) - u(0)}{a-1} + (a+1)\langle u, V_a u_a\rangle + \left\langle u,\ \frac{V_a - V}{a-1}u_a \right\rangle$$

Переходя здесь к пределу при $a \to 1$, очевидно, имеем с учетом нормировки (7):

$$2E = -\left\langle u,\ \frac{d}{dx}\left(xF'(x)\frac{du}{dx} \right) \right\rangle + 2\langle u, Vu\rangle + \langle u, xV'(x)u\rangle - F(0)\bar{u}(0)u''(0) + F(0)|u'(0)|^2 \qquad (13)$$

Итак, приходим к следующему результату.

Теорема. Пусть $F(x)$ и $V(x)$ – гладкие вещественные 2π-периодические функции, и пусть $\sigma \in \mathbf{R}^1$. Пусть далее $u = u(x)$ – классическое решение уравнения (1), удовлетворяющее условиям (2) и (7). Тогда имеет место равенство (13).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бриллюэн Л., Пароди М.* Распространение волн в периодических структурах. М.: ИЛ, 1959. 457 с.
2. *Connor J., Uzer T., Marcus R.* Eigenvalues of the Schrödinger equation for a periodic potential with nonperiodic boundary conditions: A uniform semiclassical analysis // J. Chem. Phys. 1984. V. 80. P. 5095–5105.
3. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982. 428 с.

Москва

Поступила в редакцию
5.07.1999