Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. В. Буслаева, В. С. Буслаев, Сингулярности функции Грина нестационарного уравнения Шрёдингера, *Функц. анализ и его прил.*, 1998, том 32, выпуск 2, 80–83

DOI: <https://doi.org/10.4213/faa412>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 107.22.136.117

26 апреля 2023 г., 17:23:43

Сингулярности функции Грина нестационарного уравнения Шрёдингера*

© 1998. М. В. БУСЛАЕВА, В. С. БУСЛАЕВ

Функция Грина $\psi = \psi(x, y, t)$ нестационарного уравнения Шрёдингера определяется соотношениями

$$i\hbar\psi_t = -\frac{1}{2}\hbar^2\Delta\psi + v(x)\psi, \quad \psi(x, y, 0) = \delta(x - y), \quad t \geq 0, \quad x, y \in \mathbb{R}^d. \quad (1)$$

В дальнейшем предполагаем, что v — гладкая вещественная функция.

При фиксированном $t > 0$ функция ψ может иметь сингулярности по x . Эти сингулярности зависят от скорости роста функции $v(x)$ при $x \rightarrow \infty$. Для v , удовлетворяющей при достаточно больших x условию

$$|v(x)| \leq c|x|^{2\gamma}, \quad \gamma < 1, \quad (2)$$

функция ψ является гладкой, см. [1–4]. Это утверждение, как и ряд ближайших, приведено в упрощенной форме. Если

$$v(x) = \frac{1}{2}x^2 + v_1(x), \quad (3)$$

где v_1 удовлетворяет условию (2), то ψ имеет сингулярности, которые не зависят от v_1 , возникают только при $t = n\pi$, $n = 0, 1, \dots$, и имеют вид $\delta(x - y)$, см. [1, 5]. Если

$$|v(x)| \geq c|x|^{2\gamma}, \quad \gamma > 1, \quad c > 0, \quad (4)$$

то в случае $d = 1$ известно, что при любом $t > 0$ функция ψ имеет сингулярности почти всюду (см. [3]).

Основная цель этой заметки — описание формульного механизма, ответственного за вид сингулярностей функции ψ при $\gamma > 1$ в случае $d = 1$. При определенных ограничениях мы сможем высказать некоторые утверждения о характере сингулярностей функции ψ при $d > 1$.

Итак, пусть сначала $d = 1$. Краткая формулировка общей идеи такова: квазиклассическая асимптотика функции ψ , т.е. ее асимптотика при $\hbar \rightarrow 0$, является одновременно асимптотикой и по гладкости. Более того, вклад в сингулярности дают лишь классические движения, отвечающие (произвольно) большим значениям энергии.

Для построения квазиклассической асимптотики функции ψ следует, прежде всего, рассмотреть классическую динамическую систему $\dot{\xi} = p$, $\dot{p} = -v_x$, $\xi, p \in \mathbb{R}$. Начальному условию (1) соответствует «лагранжево многообразие» $\Gamma_0 = \{(\xi, p) : \xi, p \in \mathbb{R}, \xi = y\}$ и равномерная плотность $\rho_0(p) = 1$ на нем. Классическая динамика за время $t \geq 0$ переводит Γ_0 в «лагранжево многообразие» Γ_t и ρ_0 в плотность $\rho_t : \Gamma_t \rightarrow \mathbb{R}$. Квазиклассическая асимптотика ψ определяется, в первую очередь, этой парой (Γ_t, ρ_t) (см.,

* Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 96-01-00849.

например, [6, 7]). Введем проекцию $\pi_t: \Gamma_t \rightarrow \mathbb{R}_\xi$, $\pi_t(\xi, p) = \xi$. Предположим, что некоторое открытое ограниченное множество $\omega \subset \mathbb{R}_\xi$ обладает тем свойством, что его прообраз $\pi_t^{-1}(\omega)$ является объединением конечного или счетного набора M открытых множеств: $\pi_t^{-1}(\omega) = \bigcup_{m=1}^M \Gamma_t^m(\omega) \subset \Gamma_t$. Геометрически это означает, в частности, что на лагранжевом многообразии Γ_0 находятся M точек (y, p_m^0) , которые за время t переводятся классической системой в точки $(x, p_m) \in \Gamma_t^m(\omega)$. Как известно, квазиклассическая асимптотика функции $\psi(x, t)$ дается суммой стандартно вычисляемых вкладов M точек (y, p_m^0) . Каждый из этих вкладов является гладким и сумма вкладов может оказаться сингулярной только при $M = \infty$.

С этой точки зрения легко понять различие в поведении функции ψ в условиях (2), (3) и (4). При выполнении условия (2) часть многообразия Γ_t , отвечающая движениям с высокой энергией, устроена так же, как для свободной системы, т.е. для системы с $v = 0$. При этом M конечно. Движение многообразия Γ_t под действием потенциала (3) сводится при больших энергиях к вращению: Γ_t при $t \neq n\pi$ — асимптотически линейное многообразие, однозначно проектируемое на $\mathbb{R}_\xi$, а при $t = n\pi$ многообразие Γ_t асимптотически совпадает с Γ_0 . При таких t нельзя пользоваться стандартными квазиклассическими формулами, но аналогичная формула в импульсном представлении (которая и описывает теперь квазиклассическую асимптотику) показывает, что при этом воспроизводятся исходные сингулярности. Для потенциала (4) многообразие Γ_t при любом $t > 0$ асимптотически ведет себя как «спираль», причем $M = \infty$, что и вызывает появление сингулярностей.

Опишем более явно характер сингулярностей. Будем предполагать, что при $x \rightarrow \infty$ потенциал v допускает асимптотическое разложение

$$v \sim \sum_{k=0}^{\infty} v_k |x|^{2\gamma_k}, \quad \gamma = \gamma_0 > 1, \quad \gamma_{k+1} < \gamma_k.$$

В этом случае кривая Γ_t при любом $t > 0$ состоит из двух бесконечных спиралей, убегающих в бесконечность, накручиваясь по часовой стрелке в стандартной ориентации. При этом любой конечный интервал оси $\mathbb{R}_\xi$ регулярно покрывается бесконечным числом ветвей спиралей. Нарушение регулярной проектируемости может происходить лишь на конечном числе ветвей. Изоэнергетические кривые $\frac{1}{2}p^2 + v(x) = E$, по которым происходит классическое движение, имеют вид овалов. В этом случае номер m траектории естественно расщепляется на три индекса n, σ_1, σ_2 , где $n = 0, 1, \dots, \sigma_1, \sigma_2 = \pm 1$. Параметр σ_1 (σ_2) ассоциируется с точкой x (y); он равен знаку импульса p в соответствующей точке траектории. Через n обозначено полное число овалов, пробегаемых траекторией. Будем использовать для нумерации траекторий параметр E вместо t и для траектории обозначение $\gamma_{\sigma_1, \sigma_2}^n(x, y, E)$. Старший член при $h \rightarrow 0$ квазиклассической асимптотики имеет вид

$$\begin{aligned} \psi \sim & \frac{1}{\sqrt{2\pi i h}} \sum_{n, \sigma_1, \sigma_2} (-1)^n \left| (E - v(x))^{1/2} (E - v(y))^{1/2} \frac{\partial^2}{\partial E^2} \Phi_{\sigma_1, \sigma_2}^n \right|^{-1/2} \\ & \times \exp \frac{i}{h} \{ \Phi_{\sigma_1, \sigma_2}^n - Et \}, \end{aligned}$$

где

$$\Phi_{\sigma_1, \sigma_2}^n(x, y, E) = \int_{\gamma_{\sigma_1, \sigma_2}^n(x, y, E)} p \, dx.$$

Параметр E должен быть фиксирован соотношением $(\partial/\partial E)\Phi_{\sigma_1, \sigma_2}^n = t$. Поскольку за сингулярность ответственны большие значения n , это соотношение можно заменить более простым: $n\Phi'(E_n) = t$, где $\Phi(E)$ — площадь, охватываемая овалом. Асимптотически $\Phi(E) \sim \Phi_0 E^\beta$ при $E \rightarrow \infty$, где $\beta = (1 + \gamma)/2\gamma$, $1/2 < \beta < 1$, а $\Phi_0 > 0$ — постоянная. Отсюда $E_n \sim (\Phi_0 \beta n/t)^{1/(1-\beta)}$. Сохраняя эквивалентность сингулярностей, старший член квазиклассической асимптотики можно заменить вполне явным выражением:

$$\begin{aligned} \psi \sim t^{-1/2} g_0 \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \sum_{n \geq 0} (-1)^n \exp \frac{i}{h} (n\Phi_0 E_n^\beta - E_n t) \\ \times \cos\left(\frac{1}{4h} \Phi_0 E_n^\beta + \frac{1}{h} \sqrt{2E_n} x - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{1}{4h} \Phi_0 E_n^\beta - \frac{1}{h} \sqrt{2E_n} y - \frac{\pi}{4}\right), \quad (5) \end{aligned}$$

где $g_0 = (2\pi(1 - \beta))^{-1/2}$. Функция (5), конечно, является негладкой на любом интервале оси x . Конкретный анализ ее аналитических свойств требует специального обсуждения (см. например [8]).

Формула (5) описывает лишь главные сингулярности функции ψ при фиксированном t на любом компакте оси $\mathbb{R}_\xi$. Полное доказательство, конечно, выходит за рамки краткого сообщения. Поправочные слагаемые даются дальнейшими членами квазиклассической асимптотики. Мы не будем обсуждать поправочные слагаемые, но отметим, что, беря в рассмотрение достаточное число таких слагаемых (зависящее от последовательности γ_k), можно описать сингулярности функции ψ с точностью до гладкого дефекта.

Пусть, наконец, $d > 1$. Предположим, что

$$v(x) = v_1(x_1) + \dots + v_d(x_d) + v_{d+1}(x),$$

где $|v_{d+1}(x)| \leq c|x|^{2\gamma}$, $\gamma < 1$, при достаточно больших x и производные функций v_{d+1} имеют (в обычном смысле) прогрессивно подчиненный порядок при $x \rightarrow \infty$. Тогда сингулярности функции $\psi(x, y, t)$ при фиксированном t на фиксированном компакте из $\mathbb{R}^d$ совпадают с сингулярностями произведения $\psi_1(x_1, y_1, t) \dots \psi_d(x_d, y_d, t)$, где $\psi_k(x_k, y_k, t)$ — функция Грина одномерной задачи с потенциалом v_k .

Авторы благодарят Л. В. Капитанского, А. А. Лаптева и Ю. Г. Сафарова, которые привлекли наше внимание к настоящей проблематике, и И. Е. Роднянского за указания по поводу литературы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Zeldich S.* Comm. Math. Phys., **90**, 1–26, 90 (1983).
2. *Craig W., Kapeller T., Strauss W.* Microlocal dispersive smoothing for the Schroedinger equation. Preprint, 1996.
3. *Yajima K.* Smoothness and nonsmoothness of the fundamental solution for initial value problem for time-dependent Schroedinger equations. Preprint, 1995.
4. *Kapitanski L., Rodnianski I.* IMRN, 41–54, No. 2, 1996.
5. *Kapitanski L., Rodnianski I.*

Yajima K. On the fundamental solution of a perturbed harmonic oscillator. Preprint, 1996. **6.** Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. Наука, М., 1976. **7.** Буслаев В. С. Функциональный анализ и его прил., **3**, вып. 3, 17–31 (1969). **8.** Montgomery H. L. Ten lectures on the interface between analytic number theory and harmonic analysis. CBMS, Regional Conference Series in Math., No. 84, Am. Math. Soc., 1994.

Санкт-Петербургский государственный
электротехнический университет
Санкт-Петербургский государственный
университет

Поступило в редакцию
28 февраля 1997 г.

УДК 517.9

Дискретный спектр многочастичного псевдорелятивистского гамильтониана*

© 1998. С. А. Вугальтер, Г. М. Жислин

1. В настоящей заметке устанавливаются свойства дискретного спектра псевдорелятивистских гамильтонианов систем типа атомов и атомных ионов в предположении бесконечности массы ядра. Для атомов и положительных ионов получена асимптотика числа собственных значений вблизи границы существенного спектра. Показано, что асимптотика дискретного спектра в псевдорелятивистском случае аналогична полученной для нерелятивистских гамильтонианов [1], несмотря на то, что релятивистские эффекты влияют на положение существенного спектра.

Наши общие результаты — теоремы 1–4 — даются без учета перестановочной симметрии, ибо этот учет аналогичен проведенному в [1, 6]. Однако, для случая атомов и положительных ионов — ввиду его важности — мы приводим асимптотику дискретного спектра и с учетом запрета Паули (теорема 5).

2. Пусть

$$H_n = \sum_{s=1}^n (\sqrt{p_s^2 + 1} - 1) + \sum_{s=1}^n V_0(|r_s|) + \sum_{s,t=1, s < t}^n V_1(|r_{st}|), \quad (1)$$

где

$$p_s = \frac{1}{i} \nabla_s = \frac{1}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x_s}, \frac{\partial}{\partial y_s}, \frac{\partial}{\partial z_s} \right), \quad V_t(|r_1|) \in \mathcal{L}_{2,\text{loc}}(\mathbb{R}^3), \quad t = 0, 1,$$

$$V_1(|r_1|) \geq 0, \quad V_1(|r_1|) = |r_1|^{-\gamma} \quad \text{при } |r_1| \geq A > 0,$$

$$V_0(|r_1|) \leq 0, \quad V_0(|r_1|) = -Z|r_1|^{-\gamma} \quad \text{при } |r_1| \geq A,$$

$$V_0(|r_1|) > -a_0|r_1|^{-1} \quad \text{при } |r_1| < A,$$

* Исследования поддержаны грантом ИНТАС № 95-0414 и грантом Госкомвуза № 95-02.1-50.