Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Кучеренко, Квазиклассика и спектры для N -частичного уравнения Шрёдингера, *Матем. заметки*, 2001, том 70, выпуск 1, 146–149

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm727>

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: 54.147.182.235

26 апреля 2023 г., 17:59:15

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

КВАЗИКЛАССИКА И СПЕКТРЫ ДЛЯ N -ЧАСТИЧНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

В. В. Кучеренко

В статистическом пределе [1], [2] для N -частичного стационарного уравнения Шрёдингера без спина получим следующую задачу на собственные значения на торе $M = (\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)^N$:

$$-\sum_{i=1}^N \varepsilon^2 \Delta_{x_i} \psi + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(|x_i - x_j|) \psi = \lambda \psi; \quad (1)$$

здесь $x_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3)$, решение $\psi \in L_2(M)$, ε^2 – некоторый агрегированный физический параметр в интервале $(0, +\infty)$, а число частиц N стремится к бесконечности.

Отметим, что при $\varepsilon^2 \geq N$ целесообразно поделить уравнение (1) на ε^2 . В результате получим уравнение с малым бинарным потенциалом, к которому применим метод Н. Н. Боголюбова [1]–[4]. Поэтому в дальнейшем мы будем считать, что $\varepsilon^2 \leq N$. Для этого случая будут построены спектральные серии и проведена оценка их точности. Относительно потенциала предположим, что он представим конечным рядом Фурье

$$V(|x - y|) = \sum_{|k|=0}^q \nu_k \exp\{i2\pi(k, (x - y))\}, \quad \nu_k = \nu_{-k} > 0. \quad (2)$$

Асимптотическое приближение к задаче (1) будем искать в виде

$$\psi = \exp\left\{-\frac{\sqrt{N}}{\varepsilon} \varphi(x_1, \dots, x_N)\right\} \rho(x_1, \dots, x_N). \quad (3)$$

Для фазы и амплитуды выберем следующие уравнения:

$$-N \sum_{j=1}^N |\nabla_{x_j} \varphi|^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(|x_i - x_j|) + \varepsilon \sqrt{N} \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j}^1 \varphi = 0, \quad (4)$$

$$\varepsilon \sqrt{N} \left(2 \sum_{j=1}^N \nabla_{x_j} \varphi \nabla_{x_j} \rho + \left[\sum_{j=1}^N \Delta_{x_j}^2 \varphi \right] \rho \right) - \varepsilon^2 \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} \rho = \lambda \rho. \quad (5)$$

Здесь $\Delta^1 = \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j}^1$, $\Delta^2 = \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j}^2$ – некоторое подразбиение оператора Лапласа на две части, которое будет дано ниже.

Фазу и амплитуду будем искать в классе симметричных функций. С этой целью рассмотрим алгебру, порожденную симметричными функциями

$$\xi_k = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{j=1}^N \cos(2\pi(k, x_j)), \quad \eta_k = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{j=1}^N \sin(2\pi(k, x_j)), \quad (6)$$

где $x_j \in \mathbb{R}^3$, $k \in \mathbb{Z}^3$. Нетрудно проверить, что справедливо утверждение.

УТВЕРЖДЕНИЕ. Для всех наборов индексов $k_1, \dots, k_N$ симметризованная тригонометрическая функция $\exp\{i2\pi((k_1, x_1) + \dots + (k_N, x_N))\}$ принадлежит алгебре, порожденной функциями (6).

Таким образом, произвольная симметричная функция из $L_2(M)$ является функцией от образующих (6). В дальнейшем, чтобы исключить зависимые функции $\xi_k, \xi_{-k}, \eta_k, \eta_{-k}$, мы последовательной нумерацией разделим множество индексов $k \in \mathbb{Z}^3$ на два непересекающихся класса $P, \bar{P}$, каждый из которых не содержит двух индексов, сумма которых равна нулю. Итак, в силу утверждения мы можем искать решения уравнений (4), (5) в виде функций от $\xi_k, \eta_k, k \in P$. Возникающие на этом пути проблемы с оценками норм функций можно решить на основе центральной предельной теоремы для вектор-функций [5]. Действительно, функции (6) можно рассматривать как суммы одинаково распределенных независимых случайных величин. Из [5] следует, что для полиномиально растущей по $\xi_k, \eta_k, k \in P$, функции справедливо соотношение

$$\begin{aligned} & \int_M f\{\xi_{k_1}(x), \dots, \xi_{k_p}(x); \eta_{m_1}(x), \dots, \eta_{m_p}(x)\} dx_1 \cdots dx_N \\ &= \pi^{-p} \int_{R^{2p}} f\{t_1 \dots t_p; \tau_1 \dots \tau_p\} \times \exp\left\{-\sum_{i=1}^p (t_i^2 + \tau_i^2)\right\} dt_1 \cdots dt_p d\tau_1 \cdots d\tau_p + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right). \end{aligned} \quad (7)$$

Используя оценку (7), мы сможем вычислить нормы приближенных собственных функций, погрешности от их подстановки в уравнение (1), оценить точность спектральной асимптотики, вычислять различные матричные элементы.

Покажем, что сумма бинарных потенциалов зависит лишь от ξ_k, η_k . В силу условий $\text{Im } \nu_k = 0$, $\nu_k = \nu_{-k}$ получим

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(|x_i - x_j|) &= \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i, j \leq N} V(|x_i - x_j|) - \frac{N}{2} \sum_{|k|=0}^q \nu_k \\ &= N(N-1)2^{-1}\nu_0 - N2^{-1} \sum_{|k|=1}^{\infty} \nu_k + N \sum_{k \in Q} \nu_k (\xi_k^2 + \eta_k^2). \end{aligned}$$

Здесь $Q = P \cap \{k: 1 \leq |k| \leq q\}$. Далее, прямой подстановкой нетрудно убедиться, что задача на собственные значения (1) для симметричных функций, которые в силу утверждения являются функциями, зависящими лишь от $\xi_k, \eta_k, k \in P$, приводится в переменных ξ_k, η_k к следующей точной задаче на собственные значения для уравнения второго порядка с квадратичным потенциалом:

$$\begin{aligned} & 4\pi^2 \varepsilon^2 \sum_{k \in P} \left(k^2 \xi_k \frac{\partial f}{\partial \xi_k} + k^2 \eta_k \frac{\partial f}{\partial \eta_k} \right) - 2\pi^2 \varepsilon^2 \sum_{k \in P} \left(k^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_k^2} + k^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \eta_k^2} \right) \\ & - N^{-1/2} 2\pi^2 \varepsilon^2 \left(\sum_{k \in P} k^2 \xi_{2k} \left(-\frac{\partial^2 f}{\partial \xi_k^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \eta_k^2} \right) \right. \\ & + \sum_{k, m \in P, k \neq m} (k, m) \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \xi_k \partial \xi_m} (\xi_{k-m} - \xi_{k+m}) - \frac{\partial^2 f}{\partial \eta_k \partial \eta_m} (\xi_{k+m} + \xi_{k-m}) \right) \\ & \left. - 2 \sum_{k, m \in P} (k, m) \frac{\partial^2 f}{\partial \xi_k \partial \eta_m} (\eta_{k+m} - \eta_{m-k}) \right) + N \sum_{k \in Q} \nu_k (\xi_k^2 + \eta_k^2) f = \mu f. \end{aligned} \quad (8)$$

Это точное уравнение (8) может служить источником различных приближенных методов.

Выбрав в качестве Δ^1 оператор $\Delta^1 = -4\pi^2 \sum_{k \in P} k^2 (\xi_k \frac{\partial}{\partial \xi_k} + \eta_k \frac{\partial}{\partial \eta_k})$, уравнение (4) для фазы преобразуем к виду

$$\begin{aligned}
 & N \left(- \sum_{k \in P} 2\pi^2 k^2 \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \xi_k} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \eta_k} \right)^2 \right) + \sum_{k \in Q} \nu_k (\xi_k^2 + \eta_k^2) \right) \\
 & + \varepsilon \sqrt{N} (-4\pi^2) \sum_{k \in P} k^2 \left(\xi_k \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_k} + \eta_k \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_k} \right) \\
 & + \sqrt{N} \left(\sum_{k \in P} 2\pi^2 k^2 \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \xi_k} \right)^2 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \eta_k} \right)^2 \right) \xi_{2k} \right. \\
 & - \sum_{k, m \in P, k \neq m} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_k} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_m} 2\pi^2 (k, m) (\xi_{k-m} - \xi_{k+m}) \\
 & - \sum_{k, m \in P, k \neq m} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_k} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_m} 2\pi^2 (k, m) (\xi_{k-m} + \xi_{k+m}) \\
 & \left. + 2 \sum_{k, m \in P} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_k} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_m} 2\pi^2 (k, m) (\eta_{k+m} - \eta_{k-m}) \right) = 0. \quad (9)
 \end{aligned}$$

Уравнение для фазы будем решать методом последовательных приближений с точностью до функций вида $N^{-l/2} R_l$, где

$$R_l = \sum_{k, m \in P} (\xi_k \xi_m A_l + \xi_k \eta_m B_l + \eta_k \eta_m C_l), \quad l < \infty. \quad (10)$$

Здесь A_l, B_l, C_l – некоторые полиномиальные функции от ξ_k, η_k (с постоянными коэффициентами) порядка $2(l-1) + 1$.

Фазу φ будем искать в виде

$$\varphi = - \sum_{k \in Q} \beta_k (\xi_k^2 + \eta_k^2) + \sum_{l=1}^d N^{-l/2} R_l, \quad (11)$$

где R_l – полиномы вида (10), а β_k – корни уравнения

$$\begin{aligned}
 & \beta_k^2 - \frac{\varepsilon}{\sqrt{N}} \beta_k - \frac{1}{8\pi^2 k^2} \nu_k = 0, \\
 & \beta_k = \frac{\varepsilon}{2\sqrt{N}} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{2\nu_k N}{k^2 4\pi^2 \varepsilon^2}} \right). \quad (12)
 \end{aligned}$$

Отметим, что для сходимости интеграла (5) с функцией (11) мы будем должны в формуле (11) выбрать знак так, чтобы $\operatorname{Re} \beta_k < 1$; далее условие вещественности спектра дает $\operatorname{Im} \beta_k = 0$.

Отсюда следует, что если $\nu_k \geq 0$, то мы должны выбрать в (11) знак “минус”, т.е. корень β_k^- . Справедлива лемма.

ЛЕММА. *Существуют такие полиномы R_l вида (10), что фаза (11) удовлетворяет условию (9) с точностью $N^{(-d+1)/2} Q_d$, где Q_d – полином вида (10).*

Решение уравнения переноса будем искать в виде

$$\rho(\dots, n_k, \dots) = \prod_{k \in M} (\xi_k + i\eta_k)^{n_k}, \quad (13)$$

где M – какой-либо конечный набор индексов из P . Справедлива теорема.

ТЕОРЕМА. Пусть $\nu_k > 0$ для $|k| \leq q$ и $0 < \varepsilon^2 \leq N$. Тогда для каждого конечного набора натуральных чисел n_k существует собственное число λ задачи (1) такое, что

$$\lambda = \frac{\nu_0 N^2}{2} - N \sum_{k \in P} \nu_k - 2\varepsilon \sqrt{N} \sum_{k \in P} \beta_k^- k^2 4\pi^2 - 2\varepsilon \sqrt{N} \sum_m \beta_m^- m^2 4\pi^2 n_m + \varepsilon^2 4\pi^2 \sum_m m^2 n_m + O(\varepsilon). \quad (14)$$

Если $\varepsilon^2 \geq N$, то также справедлива формула (14) с оценкой $O(\varepsilon/\sqrt{N})$.

Отметим, что формулы (14) формально применимы и в случае, когда в формуле (2) число $q = \infty$, но коэффициенты ν_k достаточно быстро убывают. Поэтому в дальнейшем условие конечности сумм (2) может быть отброшено.

Нетрудно показать, что линейные комбинации приближенных собственных функций вида (3), (11), (13) плотны в подпространстве симметричных функций из $L_2(M)$. Однако, разложение некоторых функций, например, симметричной функции $\exp\{i2\pi((1, x_1) + \dots + (1, x_N))\}$, будут содержать большие (по N) коэффициенты. Поскольку мы имеем дело с приближенными собственными функциями, то ввиду отмеченного выше роста коэффициентов возможно появление новых приближенных собственных функций и соответственно новых высокоэнергетических спектров. Так, подставляя в (5) функцию

$$\rho(\dots, \xi_k, \eta_k, \dots) \exp\left\{i2\pi \sum_{j=1}^N (l, x_j)\right\}, \quad (15)$$

мы получим несколько видоизмененный спектр. Новые спектральные серии $\lambda(l; \dots, n_m, \dots)$ уравнения (1) выражаются через спектральные серии $\lambda(\dots, n_m, \dots)$ типа (14) по формулам

$$\lambda(l; \dots, n_m, \dots) = \lambda(\dots, n_m, \dots) + \varepsilon^2 N l^2 4\pi^2 + 8\pi^2 \varepsilon^2 \sum_m (l, m) n_m. \quad (16)$$

Приближенные собственные функции, отвечающие спектру (15), получаются из функций (13) домножением на функцию $\exp\{(1, x_1) + \dots + (1, x_N)\}$.

Далее, используя соотношения

$$\sum_{j=1}^N (-i\nabla_{x_j} (\xi_k + i\eta_k)^n) = kn(\xi_k + \eta_k)^n, \quad \sum_{j=1}^N (-i\nabla_{x_j} (\xi^2 + \eta^2)) = 0$$

и формулу (7), получим, что средний импульс, отвечающий состояниям (13), пропорционален $\sum_m m n_m$. Средний же импульс для состояний (15), отвечающих спектру (16), пропорционален $Nl + \sum_m m n_m$.

Анализируя формулы (12), мы видим, что полученные нами спектры совпадают со спектрами Боголюбова [1]–[4], однако при малых значениях параметра ε ряд членов в (12) должен быть отброшен на фоне достаточно грубой оценки $O(\varepsilon)$. Мы получили спектры без каких-либо предположений о малости бинарного взаимодействия, как это делалось в отмеченных выше работах. Формулы для собственных функций являются новыми. Из нашего представления для приближенных собственных функций (3) ясно, что, не выделив экспоненту, содержащую сингулярную зависимость от (большого для реальных сред) параметра $\sqrt{N}/\varepsilon$, невозможно обосновать формулы (12) для спектров в случае сильного взаимодействия и плотных сред.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Боголюбов Н. Н. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1947. Т. 11. № 1. С. 77–90.
2. Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.) Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984.
3. Маслов В. П., Шведов О. Ю. // Докл. РАН. 1994. Т. 335. № 1. С. 42–44.
4. Кучеренко В. В., Маслов В. П. // Докл. РАН. 1996. Т. 348. № 2. С. 169–171.
5. Billingsley P. Probability and Measure. New York: John Wiley & Sons, 1986.