Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Арсеньев, Оценка функции Грина оператора Шредингера, *ТМФ*, 1998, том 115, номер 1, 85–92

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf859>

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: 18.234.197.8

26 апреля 2023 г., 15:19:05

© 1998 г.

А. А. Арсеньев*

ОЦЕНКА ФУНКЦИИ ГРИНА ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА

Получено приближенное представление функции Грина оператора Шредингера.

1. Рассмотрим задачу Коши для уравнения Шредингера

$$i\hbar\partial_t\psi = -(\hbar^2/2)\nabla_x^2\psi + V\psi, \quad x \in R^m, \quad t \in R_+^1, \quad \psi \in L^2(R^m, dx). \quad (1)$$

Пусть $U(t, \hbar)$ – разрешающий оператор задачи (1), рассматриваемой как абстрактная задача Коши в $L^2(R^m, dx)$. Задача (1) и оператор $U(t, \hbar)$ хорошо изучены. Сведения о работах до 1990 г. содержатся в книге [1], новейшие достижения обсуждаются в статьях [2, 3], описание методов, с которыми работают физики, можно найти в [4]. Однако пока решены не все проблемы. В задачах квантовой химии и физики твердого тела возникает ситуация, когда размерность задачи высока, параметр $\hbar$ мал, но изучаемые эффекты имеют порядок $O(\exp(-\delta/\hbar))$. В этом случае нельзя ограничиваться асимптотическим разложением по малому параметру $\hbar$, а необходимо прибегать к нетрадиционным численным методам. Особенно остро эти проблемы проявляются при вычислении вигнеровской функции распределения, т.е. вейлевского символа матрицы плотности $\rho(t) = U(t, \hbar)\rho(0)U(t, \hbar)^*$. В связи с этими, а также некоторыми другими проблемами квантовой механики в ряде работ [5–9] изучались решения задачи (1) специального вида – гауссовы волновые пакеты.

В данной статье показано, что небольшая модификация предложенного в работах [5–7] варианта техники гауссовых волновых пакетов позволяет получить равномерную по параметру $\hbar$ аппроксимацию оператора $U(t, \hbar)$ в равномерной операторной топологии на сколь угодно большом отрезке времени. Подчеркнем, что получение асимптотических разложений по $\hbar$ не является целью нашей работы. Мы лишь следим за равномерностью всех оценок по параметру $\hbar$.

Обратим внимание на то, что с математической точки зрения развитый в работах [5–7] вариант техники гауссовых волновых пакетов является интересным обобщением классического метода “замороженных коэффициентов” Леви. Поэтому мы надеемся, что спе-

*Московский государственный университет, Москва, Россия

специалистам по математической физике будет интересен приводимый ниже пример задачи, решенной данным методом.

Основной результат работы изложен в теореме 2.

2. Нам понадобится обобщение преобразования Фурье, которое в книге [10] названо FBI-преобразованием, а мы будем называть его преобразованием Фурье–Гаусса и на функциях $\varphi \in C_0^\infty(R^m)$ определим формулой

$$F: \varphi(x) \rightarrow F(\varphi|\hbar, \sigma, q, p) = \int \exp(-(|x - q|^2/2\hbar\sigma) - i\langle p, x - q \rangle/\hbar) \varphi(x) dx. \quad (2)$$

В формуле (2) символ $\langle, \rangle$ означает скалярное произведение в R^m , $\sigma, \hbar$ – произвольные положительные константы, интегрирование ведется по R^m .

Хорошо известно [10], что справедливы формула обращения

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= (2\pi\hbar)^{-m} (\pi\hbar\sigma)^{-m/2} \times \\ &\times \int \exp(-(|x - q|^2/2\hbar\sigma) + i\langle p, x - q \rangle/\hbar) F(\varphi|\hbar, \sigma, q, p) dq dp \end{aligned} \quad (3)$$

и равенство Парсеваля

$$\int |\varphi(x)|^2 dx = (2\pi\hbar)^{-m} (\pi\hbar\sigma)^{-m/2} \int |F(\varphi|\hbar, \sigma, q, p)|^2 dq dp. \quad (4)$$

В правой части формул (3), (4) интегрирование ведется по R^{2m} . Для $\varphi \in C_0^\infty(R^m)$ формулы (3), (4) доказываются прямым вычислением. На случай $\varphi \in L^2(R^m, dx)$ доказательство переносится предельным переходом на основе равенства (4). Таким образом, интеграл в (3) нужно, вообще говоря, понимать как несобственный в пространстве $L^2(R^m, dx)$.

В дальнейшем мы будем предполагать, что $V(x)$ – заданная на R^m действительная функция, которая принадлежит пространству $L^1(R^m, dx)$ и преобразование Фурье которой

$$\widehat{V}(k) = \int \exp(-i\langle k, x \rangle) V(x) dx$$

удовлетворяет условию

$$\int (1 + |k|)^3 |\widehat{V}(k)| dk < \infty. \quad (5)$$

Из (5) следует, что $V \in C_b^3(R^m)$.

Отметим, что первый дифференциал заданной на R^m функции $V(x)$ канонически порождает в R^m векторное поле $x \rightarrow DV(x)$, а второй дифференциал – поле линейных операторов $x \rightarrow D^2V(x) \in L(R^m \rightarrow R^m)$.

Напомним основные факты теории гауссовых волновых пакетов. Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \partial_t Q &= P, \quad Q(0) = q_0, \quad \partial_t P = -DV(Q), \quad P(0) = p_0, \quad Q, P \in R^m, \\ \partial_t A &= iB, \quad A(0) = \sigma E, \quad \partial_t B = iD^2V(Q)B, \quad B(0) = E, \quad A, B \in \text{Mat}(m, C), \end{aligned} \quad (6)$$

где $\sigma > 0$ – действительный параметр, E – единичная матрица. Решение системы (6) существует глобально по времени и непрерывно дифференцируемо по q_0, p_0 , причем преобразование $(q_0, p_0) \rightarrow (Q(t|q_0, p_0), P(t|q_0, p_0))$ есть сохраняющий меру Лебега диффеоморфизм пространства R^{2m} . В дальнейшем мы для $Z \in \text{Mat}(m, C)$ по определению положим

$$\langle x, Zy \rangle = \langle x, (\text{Re } Z)y \rangle + i \langle x, (\text{Im } Z)y \rangle.$$

ЛЕММА 1 [6]. Если A и B – решения системы (6), то:

- 1) матрицы A и B обратимы при всех $t > 0$;
- 2) оператор BA^{-1} самосопряжен: $\langle x, BA^{-1}y \rangle = \langle y, BA^{-1}x \rangle$;
- 3) справедливо равенство $\text{Re}(BA^{-1}) = \sigma(AA^*)^{-1}$, где A^* – матрица, комплексно-сопряженная к транспонированной матрице A .

ЛЕММА 2. Если потенциал V удовлетворяет сформулированным выше условиям, то существует такое зависящее только от V число $\varepsilon > 0$, что при $0 \leq t \leq \sigma \leq \varepsilon$ равномерно по $q_0, p_0 \in R^m$ выполнены следующие оценки:

- 1) $\|A - (\sigma + it)E\| \leq \text{const } \sigma^3$;
- 2) $\|B - E\| \leq \text{const } \sigma^2$;
- 3) $\|(A + \sigma B)/(2\sigma + it) - E\| \leq \text{const } \sigma^2$;
- 4) $\sigma^{m/2} |\det(A + \sigma B)|^{-1/2} \leq \text{const}$;
- 5) $\text{Re}(A(A + \sigma B)^{-1}) = ((2\sigma^2 + t^2)/(4\sigma^2 + t^2))(E + O(\sigma^2))$;
- 6) $\text{Im}(A(A + \sigma B)^{-1}) = ((t\sigma)/(4\sigma^2 + t^2))(E + O(\sigma^2))$;
- 7) $\text{Re}(B(A + \sigma B)^{-1}) = (2\sigma/(4\sigma^2 + t^2))(E + O(\sigma^2))$;
- 8) $\text{Im}(B(A + \sigma B)^{-1}) = -(t/(4\sigma^2 + t^2))(E + O(\sigma^2))$;
- 9) $\text{Re}[\sigma \langle \xi, A(A + \sigma B)^{-1} \xi \rangle + \langle \eta, B(A + \sigma B)^{-1} \eta \rangle - i \langle \eta, A(A + \sigma B)^{-1} \xi \rangle] \geq 0.3(\sigma |\xi|^2 + \sigma^{-1} |\eta|^2)(1 + O(\sigma^2))$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Матрица A удовлетворяет интегральному уравнению

$$A = (\sigma + it)E - \int_0^t (t - \tau) D^2 V(Q(\tau)) A(\tau) d\tau.$$

Из этого уравнения и неравенства Гроузола получаем оценку сверху для нормы матрицы A на отрезке $0 \leq t \leq \sigma \leq \varepsilon$. Далее в интегральном уравнении свободный член переносим влево, а норму правой части оцениваем сверху. Получаем оценку 1. Ее подставляем в интегральное уравнение для B и получаем оценку 2. Остальные оценки – следствие первых двух при достаточно малом ε . Лемма доказана.

Ниже для определенности мы будем считать, что норма матриц – это l^2 -норма.

На решениях системы (6) определим функционал

$$S(t|q_0, p_0) = \int_0^t (P(\tau|q_0, p_0)/2 - V(Q(\tau|q_0, p_0))) d\tau. \quad (7)$$

Зададим функцию

$$W(x, t|q_0, p_0) = 2^{-m}(\pi\hbar)^{-3m/2}(\det A)^{-1/2} \times \\ \times \exp\left(-(\langle x - Q, BA^{-1}(x - Q) \rangle/2 - i\langle P, x - Q \rangle - iS)/\hbar\right). \quad (8)$$

В (8) величины A, B, Q, P рассматриваются как решения системы (6).

Теория гауссовых волновых пакетов основана на следующей лемме.

ЛЕММА 3. *Функция W есть решение задачи*

$$i\hbar\partial_t W = -(\hbar^2/2)\nabla_x^2 W + [V(Q) + \langle DV(Q), x - Q \rangle + \\ + (1/2)\langle x - Q, D^2V(Q)(x - Q) \rangle]W, \\ W(x, +0|q_0, p_0) = (2\pi\hbar)^{-m}(\pi\hbar\sigma)^{-m/2} \times \\ \times \exp\left(-(|x - q_0|^2/2\sigma - i\langle p_0, x - q_0 \rangle)/\hbar\right). \quad (9)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО проводится прямым вычислением (см. также [11]).

На функциях из $C_0^\infty(R^m)$ определим оператор

$$K(t, \sigma): \psi_0(x) \rightarrow K(t, \sigma)\psi_0(x) = \int W(x, t|q_0, p_0)F(\psi_0|\hbar, \sigma, q_0, p_0) dq_0 dp_0. \quad (10)$$

ЛЕММА 4. *Функция $\psi(x, t) = K(t, \sigma)\psi_0(x)$ есть решение задачи*

$$i\hbar\partial_t \psi = -(\hbar^2/2)\nabla_x^2 \psi + V\psi + R(t)\psi_0, \quad \psi(x, +0) = \psi_0(x), \quad (11)$$

где

$$R(t)\psi_0(x) = \int r(Q(t|q_0, p_0), x)W(x, t|q_0, p_0)F(\psi_0|\hbar, \sigma, q_0, p_0) dq_0 dp_0 \quad (12)$$

и

$$r(q, x) = V(q) + \langle DV(q), x - q \rangle + (1/2)\langle x - q, D^2V(q)(x - q) \rangle - V(x). \quad (13)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО леммы 4 следует из формулы обращения (3) и равенства (9).

3. Содержательная часть работы посвящена преобразованию оператора невязки R и оценке его нормы.

ЛЕММА 5. *Справедливо равенство*

$$r(q, x) \exp(i\langle p, x - q \rangle/\hbar) = (2\pi)^{-m}(-1/2) \int_0^1 ds (1-s)^2 \int dk \widehat{V}(k) \times \\ \times \exp(i\langle k, q \rangle) \{D_s^3 \exp(i\langle p + s\hbar k, x - q \rangle/\hbar)\}.$$

Для ДОКАЗАТЕЛЬСТВА используется выражение остаточного члена ряда Тейлора через интеграл от производной.

ЛЕММА 6. *Преобразование Фурье–Гаусса от функции*

$$\omega(x, Q, P) = \exp\left(-(\langle x - Q, C(x - Q) \rangle / 2 - i\langle P, x - Q \rangle) / \hbar\right)$$

есть

$$\begin{aligned} F(\omega | \hbar, \sigma, q, p) &= \pi^{m/2} (2\sigma\hbar)^{m/2} (\det(E + \sigma C))^{-1/2} \times \\ &\times \exp\left(-(\sigma\langle P - p, (E + \sigma C)^{-1}(P - p) \rangle / 2 + \right. \\ &+ \langle Q - q, C(E + \sigma C)^{-1}(Q - q) \rangle / 2 - \\ &\left. - i\langle q - Q, (E + \sigma C)^{-1}(P - p) \rangle - i\langle p, q - Q \rangle) / \hbar\right). \end{aligned}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО проводится вычислением гауссова интеграла.

Комбинируя леммы 5 и 6, получаем следующую лемму.

ЛЕММА 7. *Преобразование Фурье–Гаусса от функции $R(t)\psi_0$ есть*

$$\begin{aligned} F(R(t)\psi_0 | \hbar, \sigma, q, p) &= 2^{-m/2} (\pi\hbar)^{-m} \sigma^{m/2} (-1/2) (2\pi)^{-m} \times \\ &\times \int_0^1 ds (1-s)^2 \int dk \widehat{V}(k) \int dq_0 dp_0 (\det(A + \sigma B))^{-1/2} \times \\ &\times D_s^3 \left\{ \exp\left(-(\sigma\langle P + s\hbar k - p, A(A + \sigma B)^{-1}(P + s\hbar k - p) \rangle / 2 - \right. \right. \\ &- i\langle q - Q, A(A + \sigma B)^{-1}(P + s\hbar k - p) \rangle + \\ &+ \langle Q - q, B(A + \sigma B)^{-1}(Q - q) \rangle / 2 - iS(t)) / \hbar \Big) \Big\} \times \\ &\times \exp(i\langle k, Q \rangle) F(\psi_0 | \hbar, \sigma, q_0, p_0). \end{aligned} \tag{14}$$

В формуле (14) величины A, B, Q, P рассматриваются как зависящие от t, q_0, p_0 решения системы (6), функционал $S(t)$ определен соотношением (7).

Положим

$$\begin{aligned} \beta(s) &= -\sigma\langle P + s\hbar k - p, A(A + \sigma B)^{-1}(P + s\hbar k - p) \rangle / (2\hbar) + \\ &+ i\langle q - Q, A(A + \sigma B)^{-1}(P + s\hbar k - p) \rangle / \hbar. \end{aligned}$$

По лемме 2 получаем, что на отрезке $0 \leq t \leq \sigma \leq \varepsilon$ верны оценки

$$\begin{aligned} |\beta'(s)| &\leq \text{const}(1 + |k|)(\sigma|P + s\hbar k - p| + |Q - q|), \\ |\beta''(s)| &\leq \text{const}(1 + |k|)^2 \sigma \hbar. \end{aligned}$$

ЛЕММА 8. В формуле (14) при некотором $\delta > 0$ и $0 \leq t \leq \sigma \leq \varepsilon$ равномерно по $q_0, p_0 \in R^m$ выполнена оценка

$$\begin{aligned} |D_s^3\{\dots\}| &\leq \text{const}(1 + |k|)^3 \left(\sigma^2 \hbar |P + s\hbar k - p| + \sigma \hbar |Q - q| + \right. \\ &\quad \left. + \sigma^3 |P + s\hbar k - p|^3 + |Q - q|^3 \right) \times \\ &\quad \times \exp\left(-\delta(\sigma |P + s\hbar k - p|^2 + \sigma^{-1} |Q - q|^2)/\hbar\right) \end{aligned}$$

и поэтому

$$\int |D_s^3\{\dots\}| dq dp \leq \text{const}(1 + |k|)^3 \hbar^{m+3/2} \sigma^{3/2}. \quad (15)$$

Данная лемма следует из леммы 2.

ТЕОРЕМА 1. Если число $\varepsilon > 0$ выбрано в соответствии с леммой 2, то на интервале $0 \leq t \leq \sigma \leq \varepsilon$ справедлива оценка

$$\|R(t)\psi_0\|_{L^2(R^m, dx)} \leq \text{const} \|\psi_0\|_{L^2(R^m, dx)} \hbar^{3/2} \sigma^{3/2}. \quad (16)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из формулы (14) следует, что для преобразования Фурье–Гаусса функции $R(t)\psi_0$ справедлива оценка

$$\begin{aligned} \|F(R(t)\psi_0)\|_{L^2(R^{2m}, dq dp)} &\leq \text{const} \hbar^{-m} \sigma^{m/2} \int_0^1 ds (1-s)^2 \times \\ &\quad \times \int dk |\widehat{V}(k)| \left\| \left[\int dq_0 dp_0 (\dots) \right] \right\|_{L^2(R^{2m}, dp dq)}. \end{aligned} \quad (17)$$

В (17) сделаем замену переменных $dq_0 dp_0 \rightarrow dQ dP$, подынтегральное выражение $(\dots)$ оценим по модулю и учтем оценку 4 леммы 2. Далее используем оценку Карлемана для нормы интегрального оператора с ядром, зависящим от разности аргументов, и оценку (15). Затем вернемся к старым переменным интегрирования. Получим, что

$$\|F(R(t)\psi_0)\|_{L^2(R^{2m}, dq dp)} \leq \text{const} \hbar^{3/2} \sigma^{3/2} \|F(\psi_0)\|_{L^2(R^{2m}, dq dp)}.$$

Теперь используем равенство Парсеваля. Теорема доказана.

4. Переходим к изложению основного результата.

ТЕОРЕМА 2. Если выполнены сформулированные в разделе 2 условия на потенциал, то существует такое $\varepsilon > 0$ и для любого фиксированного $T < \infty$ существует такая константа $a(T) < \infty$, что при $0 \leq t \leq \min(\varepsilon n, T)$ и всех целых n выполнена оценка

$$\|K^n(t/n, t/n) - U(t, \hbar)\| \leq \text{const} a(T) \hbar^{1/2} n^{-3/2}.$$

Норма взята в пространстве $L^2(R^m, dx)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Выберем $\varepsilon > 0$ так, чтобы были выполнены оценки леммы 2. Из уравнения (11) следует, что

$$K(t, \sigma) = U(t, \hbar) + \hbar^{-1} \int_0^1 U(t - \tau, \hbar) R(\tau) d\tau.$$

Поэтому в силу теоремы 1 имеем

$$\|K(t, \sigma) - U(t, \hbar)\| \leq \text{const } \hbar^{1/2} \sigma^{5/2}, \quad 0 \leq t \leq \sigma \leq \varepsilon.$$

Если $\sigma = t/n \leq \varepsilon$, то отсюда следует, что

$$\|K(t/n, t/n) - U(t/n, \hbar)\| \leq \text{const } \hbar^{1/2} n^{-5/2},$$

но

$$K^n(t/n, t/n) = (U(t/n, \hbar) + K(t/n, t/n) - U(t/n, \hbar))^n = U(t, \hbar) + \{\dots\}. \quad (18)$$

Так как $\|U(t, \hbar)\| = 1$, то в формуле (18) имеем, что

$$\|\{\dots\}\| \leq \left(1 + \|K(t/n, t/n) - U(t/n, \hbar)\|\right)^n - 1 \leq a \hbar^{1/2} n^{-3/2}.$$

Теорема доказана.

Формулой (10) оператор K определен на функциях из $C_0^\infty(R^m)$. На функции из $L^2(R^m, dx)$ он продолжается по непрерывности. При попытке записать оператор K как интегральный оператор в $L^2(R^m, dx)$ мы обнаруживаем, что его интегральное ядро задается осцилляторным интегралом. Над преобразованием Фурье–Гаусса оператор K определяется абсолютно сходящимся интегралом

$$\begin{aligned} F(K(t, \sigma)\psi | \hbar, \sigma, q, p) &= 2^{-m/2} (\pi \hbar)^{-m} \sigma^{m/2} \times \\ &\times \int dq_0 dp_0 \exp \left(-(\sigma \langle P - p, A(A + \sigma B)^{-1}(P - p) \rangle / 2 + \right. \\ &+ \langle Q - q, B(A + \sigma B)^{-1}(Q - q) \rangle / 2 - \\ &- i \langle q - Q, A(A + \sigma B)^{-1}(P - p) \rangle - i \langle p, q - Q \rangle - i S(t)) / \hbar \Big) \times \\ &\times (\det(A + \sigma B))^{-1/2} F(\psi | \hbar, \sigma, q_0, p_0). \end{aligned} \quad (19)$$

В формуле (19) величины A, B, Q, P – решение системы (6), функционал $S(t)$ задан формулой (7).

Теорема 2 сводит задачу вычисления функции Грина оператора Шредингера к традиционной для методов Монте-Карло задаче итерации интегрального оператора. Такой прием уже использовался для вычисления функции Грина, но исследователи исходили

либо из ряда Неймана, либо из основанных на формуле Троттера вариантов фейнмановского представления функции Грина. Сравнение разных подходов будет проведено в другом месте.

В заключение заметим, что применениям преобразования Фурье–Гаусса и гауссовым волновым пакетам посвящено много работ. Мы не могли упомянуть все важные исследования в этой области. Предлагаемые в данной работе новшества, по существу, сводятся к двум: мы рассматриваем преобразование Фурье–Гаусса с переменным параметром и используем преобразование Фурье–Гаусса для оценки нормы невязки. Основной результат — оценка функции Грина в равномерной операторной топологии равномерно по параметру $\hbar$ и аппроксимация функции Грина в форме, удобной для вычисления вейлевского символа матрицы плотности $\rho(t)$.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 97-01-00787.

Список литературы

- [1] *Х. Цикон, Р. Фрёзе, В. Кириш, Б. Саймон.* Операторы Шредингера. М.: Мир, 1990.
- [2] *F. Treves.* Commun. Pure Appl. Math. 1995. V. 48. № 1. P. 13–78.
- [3] *W. Craig, T. Kappler, W. Straus.* Commun. Pure Appl. Math. 1995. V. 48. № 8. P. 769–860.
- [4] *A. O. Barvinsky, T. A. Osborn, Yu. V. Gusev.* J. Math. Phys. 1995. V. 36. № 1. P. 30–61.
- [5] *E. J. Heller.* J. Chem. Phys. 1976. V. 65. P. 4979–4989.
- [6] *G. A. Hagedorn.* Commun. Math. Phys. 1980. V. 71. № 1. P. 77–93.
- [7] *S. L. Robinson.* J. Math. Phys. 1993. V. 34. № 6. P. 2185–2205.
- [8] *R. G. Littlejohn.* Phys. Rep. 1986. V. 138. № 4–5. P. 193–291.
- [9] *V. G. Bagrov, V. V. Belov, A. Yu. Trifonov.* Ann. Phys. 1996. V. 244. № 2. P. 231–290.
- [10] *G. B. Folland.* Harmonic Analysis in Phase Space. In: Annals of Mathematical Studies. V. 122. Princeton: Princeton Univ., 1989.
- [11] *В. В. Додонов, В. И. Манько.* Тр. ФИАН. 1987. Т. 183. С. 182–288.

Поступила в редакцию 12.XI.1997 г.