Лекция 2.

19 сентября 2001 г.

Напомним некоторые простые факты из спектральной теории одномерного оператора Шредингера с вещественным неособым достаточно быстро убывающим на бесконечности потенциалом

$$L = -\partial_x^2 + u(x). \tag{1}$$

(В значительной степени ее разработка была мотивирована потребностями квантовой механики. Большое количество полезной информации содержится в 3 томе [2]).

Сперва напомним, что для классического движения в локализованном потенциале мы имеем два типа движений – финитные движения и инфинитные. В задаче Кеплера финитное движение – движение по эллиптической орбите, инфинитное движение – движение по параболе или гиперболе. Аналоги финитных траекторий в квантовой задаче – состояния, отвечающие дискретному спектру, аналоги инфинитных траекторий – точки непрерывного спектра.

Оператор L самосопряжен, поэтому его спектр вещественен. Точка E принадлежит спектру оператора L тогда и только тогда, когда уравнение

$$L\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

имеет не быстрее, чем полиномиально растущие по x решения. При этом точка E принадлежит **дискретному спектру**, если уравнение (2) имеет хотя бы одно решение в пространстве $L^2(R)$ (которое, тем самым, убывает на бесконечности).

Для одномерного оператора Шредингера при фиксированном E пространство решений (2) двумерно. Поскольку потенциалом при больших x можно пренебречь, при $E > 0$ мы имеем асимптотику на бесконечности

$$\psi(x) = \alpha_\pm \exp(i\sqrt{E}x) + \beta_\pm \exp(-i\sqrt{E}x) + o(1), \quad x \to \pm\infty, \tag{3}$$

все решения ограничены и осциллируют на бесконечности.

Если же $E > 0$, то при $x \to +\infty$ либо

$$\psi(x) = \alpha \exp(\sqrt{|E|}x)(1 + o(1)), \tag{4}$$

либо

$$\psi(x) = \beta \exp(-\sqrt{|E|}x)(1 + o(1)). \tag{5}$$

Решения с асимптотикой (4) отвечают начальным условиям общего положения, экспоненциально растут на плюс бесконечности, решение с асимптотикиой (5) единственно с точностью до постоянного множителя и экспоненциально убывает на плюс бесконечности. Если это особое решение растет при $x \to -\infty$, то E – не точка спектра, если же оно экспоненциально убывает и при $x \to -\infty$, то E – точка дискретного спектра.

Если потенциал $u(x)$ достаточно хорошо локализован, то число точек дискретного спектра не более чем конечно (может быть и равным 0). Точные условия приведены, например в [2].

Суммируя вышесказанное, получаем:

Теорема 1 *1. Спектр опрератора L вещественен.*

2. Непрерывный спектр L совпадает с полуюсью неотрицательных энергий $E \geq 0$ и имеет кратность 2.

3. Дискретный спектр либо отсутствует либо лежит в области $E < 0$ и содержит конечное число собственных значений конечной кратности. Соответствующие собственные функции экспоненциально убывают на бесконечности.

Определим теперь **данные рассеяния**. Процессу рассеяния частицы с импульсом k $E = k^2$, $k \in \mathbf{R}$ приходящей из $-\infty$ соответствует решение с асимптотикой

$$\psi(k,x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} + o(1), \quad x \to -\infty, \tag{6}$$

$$\psi(k,x) = t(k)e^{ikx} + o(1), \quad x \to +\infty. \tag{7}$$

Слева от рассеивателя мы имеем падающую волну e^{ikx} и отраженную волну $r(k)e^{-kx}$, справа – прошедшую волну $t(k)e^{ikx}$. Величина $t(k)$ называется **коэффициентом прохождения**, $r(k)$ – **коэффициентом отражения**. Поскольку движение при положительной энергии всегда инфинитно, частица либо проходит сквозь барьер, либо отражается от него, откуда следует

$$|t(k)|^2 + |r(k)|^2 = 1. \tag{8}$$

Поскольку потенциал $u(x)$ вещественен, то $\overline{\psi(k,x)}$ – также решение уравнения Шредингера, но уже с импульсом $-k$, поэтому

$$t(-k) = \bar{t}(k), \quad r(-k) = \bar{r}(k). \tag{9}$$

Вместо функции $\psi(k,x)$ нам окажется технически более удобно работать с функцией $\Psi_1(k,x) = \psi(k,x)/t(k)$ с асимптотиками

$$\Psi_1(k,x) = a(k,t)e^{ikx} + b(k,t)e^{-kx} + o(1), \quad x \to -\infty, \tag{10}$$

$$\Psi_1(k,x) = e^{ikx} + o(1), \quad x \to +\infty, \tag{11}$$

где

$$a(k) = \frac{1}{t(k)}, \quad b(k) = \frac{r(k)}{t(k)}. \tag{12}$$

Пусть теперь, $E_j = -\kappa_k^2$ – точка дискретного спектра. Тогда собственную функцию дискретного спектра можно нормировать

$$\Psi_j(x) = e^{-\kappa x}(1 + o(1)), \quad x \to +\infty, \tag{13}$$

и слева имеем

$$\Psi_j(x) = b_j e^{\kappa x}(1 + o(1)), \quad x \to -\infty, \tag{14}$$

где $b_j \neq 0$ – некоторое вещественное число. Известно (смотри, например, [3]), что если перенумеровть точки дискретного спектра в порядке убывания энергии, то число нулей собственной функции равно ее номеру минус 1. Тем самым $b_j > 0$ при нечетных j и $b_j < 0$ при четных.

Тем самым, мы сопоставили потенциалу $u(x)$ следующий набор **данных рассеяния**

1. Функции $a(k)$, $b(k)$ одной вещественной переменной k.

2. Набор точек дискретного спектра $0 > E_1 > E_2 > \ldots > E_n$, $n \geq 0$.

3. Набор n чисел b_j таких, что $b_j(-1)^j < 0$.

Преобразование, сопоставляющее потенциалу $u(x)$ набор данных $a(k)$, $b(k)$, E_j, b_j называется **преобразованием рассеяния**. Докажем, что оно линеаризует уравнение KdV.

Напомним, что уравнение KdV эквивалентно операторному равенству

$$[L, \partial_t - A] = 0, \tag{15}$$

где

$$L = -\partial_x^2 + u(x,t) \tag{16}$$

зависящий от переменной t как от параметра,

$$A = \partial_x^3 - \frac{3}{2}u(x,t)\partial_x - \frac{3}{4}u(x,t)_x. \tag{17}$$

Напомним сперва несложную алгебраическую лемму

Упражнение 1 *Пусть A, B – пара коммутирующих матриц $AB = BA$, A – диагональная матрица, причем на диагонали стоит n_1 раз число λ_1, затем стоит n_2 раза число λ_2 и так далее, и все λ_j предполагаются попарно различными.*

$$A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_2 & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & \lambda_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Тогда B имеет блочно-диагональный вид

$$B = \begin{bmatrix} B_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & B_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & B_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \tag{19}$$

где блоки B_1, B_2, $\dots$ имеют размер $n_1 \times n_1$, $n_2 \times n_2$, $\dots$ соответственно.

При каждом E уравнение

$$(-\partial_x^2 + u(x))\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{20}$$

имеет двумерное пространство решений с базисом $\Psi_1(k,x)$, $\Psi_1(-k,x)$, $E = k^2$. Поскольку операторы L и $\partial_t - A$ коммутируют, то указанное пространство решений инвариантно относительно действия оператора $\partial_t - A$, т.е.

$$(\partial_t - A)\Psi_1(k,x) = \alpha_1(k)\Psi_1(k,x) + \alpha_2(k)\Psi_1(-k,x). \tag{21}$$

Найдем константы $\alpha_1(k)$, $\alpha_2(k)$. Для этого устремим $x \to +\infty$, и, пользуясь тем, что

$$\Psi_1(k,x) = e^{ikx} + o(1), \quad u(x,t) \to 0, \quad A \to \partial_x^3 \ \text{ при } \ x \to +\infty, \tag{22}$$

получаем

$$\alpha_1(k) = ik^3, \quad \alpha_2(k) = 0, \tag{23}$$

т.е.

$$(\partial_t - A)\Psi_1(k,x) = ik^3\Psi_1(k,x). \tag{24}$$

Теперь устремим $x \to -\infty$ и воспользуемся тем, что

$$\Psi_1(k,x) = a(k,t)e^{ikx} + b(k,t)e^{-kx} + o(1), \tag{25}$$

$$u(x,t) \to 0, \quad \partial_t - A \to \partial_t - \partial_x^3 \ \text{ при } \ x \to +\infty, \tag{26}$$

Применяя (25), (26) к (23) получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}a(k,t) + ik^3 a(k,t)\right)e^{ikx} + \left(\frac{\partial}{\partial t}b(k,t) - ik^3 b(k,t)\right)e^{-ikx} + o(1) =$$

$$ik^3 a(k,t)e^{ikx} + ik^3 b(k,t)e^{-ikx} + o(1). \tag{27}$$

Приравнивая множители при одинаковых экспонентах, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}a(k,t)) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t}b(k,t) = 2ik^3 b(k,t). \tag{28}$$

Уравнения (28) элементарно интегрируются, и мы получаем следующий ответ:

Теорема 2 *Если убывающий при $x \to \pm\infty$ потенциал $u(x,t)$ удовлетворяет уравнению KdV, то эволюция данных рассеяния непрерывного спектра имеет вид*

$$a(k,t)) = a(k,0), \quad b(k,t) = e^{2ik^3t}b(k,0), \tag{29}$$

$$r(k,t) = e^{2ik^3t}r(k,0). \tag{30}$$

Совершенно аналогично доказывается:

Теорема 3 *Если убывающий при $x \to \pm\infty$ потенциал $u(x,t)$ удовлетворяет уравнению KdV, то дискретный спектр оператора L не зависит от t, а "данные рассеяния дискретного спектра" эволюционируют по закону*

$$b_j(t) = e^{2\kappa_j^3 t} b_j(0), \quad E_j = -\kappa_j^2, \quad \kappa_j > 0. \tag{31}$$

Тем самым преобразование рассеяния преобразует KdV в тривиальную систему (28) плюс (31). Однако само преобразование крайне нетривиально. Отметим, что в пределе малых $u(x)$ оно переходит в преобразование Фурье потенциала. Действительно, если $u(x) \ll 1$, то

$$a(k) = 1 + o(u(x)), \quad b(k) = \frac{i}{2k} \int\limits_{-\infty}^{\infty} u(z) e^{2ikz} dz = \frac{\pi i}{k} \hat{u}(-2k). \tag{32}$$

Тем самым в линейном пределе мы получаем обычное преобразование Фурье для линеаризованного KdV

$$u_t = \frac{1}{4} u_{xxx}. \tag{33}$$

Следующий шаг – исследование преобразования рассеяния. Для этого нам понадобятся аналитические свойства волновых функций при комплексных значениях импульса.

Определение 1 *Оператор A в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ называется* **ограниченным**, *если для любого вектора $f \in \mathcal{H}$ имеет место оценка*

$$< Af, Af > \leq C_A < f, f >, \tag{34}$$

где C_A – константа, не зависящая от f.

Определение 2 *Оператор A в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ называется* **компактным (фредгольмовым, вполне непрерывным)**, *если образ единичного шара – компактное множество.*

Поскольку любое компактное множество лежит в шаре конечного радиуса, любой компактный оператор автоматически ограничен. Поскольку единичный шар в гильбертовом пространстве некомпактен, ограниченность оператора не влечет за собой его компактности.

Приведем два важнейших примера компактных операторов (без доказательств).

Пример 1 *Пусть X – компактная область в R^n, $K(x,y)$ -непрерывная функция на $X \times X$. Тогда интегральный оператор в пространстве $C(X)$ непрерывных функций на X*

$$(\hat{K}f)(x) = \int\limits_X K(x,y)f(y)d^ny \tag{35}$$

компактен.

Отметим, что этот факт выводится из теоремы Асколи-Арцела о компактности равностепенно непрерывных ограниченных семейств непрерывных функций.

Пример 2 *Пусть X – подмножество R^n, $K(x,y)$ – функция из пространства $L^2(X \times X)$. Тогда интегральный оператор в пространстве $L^2(X)$*

$$(\hat{K}f)(x) = \int\limits_X K(x,y)f(y)d^ny \tag{36}$$

компактен.

Тем самым, интегральные операторы с не слишком сильно сингулярными ядрами компактны.

Перечислим без доказательства некоторые важные свойства компактных операторов.

Теорема 4 *Пусть $\hat{K}$ – компактный оператор. Тогда*

1. *Вне любой окрестности точки 0 спектр $\hat{K}$ содержит не более конечного числа точек конечной кратности.*

2. *Уравнение*
$$(\hat{1} + \hat{K})f = g \tag{37}$$
имеет решение при любом g тогда и только тогда, когда однородное уравнение
$$(\hat{1} + \hat{K})f = 0 \tag{38}$$
не имеет ненулевых решений. Если же (38) имеет ненулевые решения, то для разрешимости уравнения (37) необходимо и достаточно, чтобы его правая часть была ортогональна ядру сопряженного оператора
$$\hat{1} + \hat{K}^*, \tag{39}$$

т.е. имело место

$$< g, f^* >= 0 \quad \textit{для} \quad \textit{любого} \quad f^* \ \textit{такого, что} \quad (\hat{1} + \hat{K}^*) f^* = 0. \quad (40)$$

Здесь $\hat{1}$ обозначает единичный оператор.

Это свойство, называемое **Альтернативой Фредгольма**, *обобщает хорошо известное свойство квадратных конечномерных матриц.*

Замечание 1 *Для квадратной матрицы существование ненулевых решений однородного уравнения эквивалентно обращению в 0 ее определителя. Для операторов вида $\hat{1} + \hat{K}$, где $\hat{K}$ – достаточно хороший интегральный оператор, можно построить так называемый* **определитель Фредгольма**, *равенство нулю которого эквивалентно существованию однородных решений, однако мы не будем им пользоваться.*

Определение 3 *Уравнение в гильбертовом пространстве вида*

$$(\hat{1} + \hat{K}) f = g \quad (41)$$

где $\hat{K}$ – компактный оператор, назывется **уравнением Фредгольма второго рода**.

Определение 4 **Уравнение Фредгольма первого рода** – *уравнение в гильбертовом пространстве вида*

$$\hat{K} f = g \quad (42)$$

где $\hat{K}$ – компактный оператор.

Уравнения первого рода существенно сложнее, чем уравнения второго рода, поскольку они являются некорректными задачами. В нашем курсе нам будут нужны только уравнения второго рода.

Наболее просто вопрос о разрешимости линейного конечномерного уравнения с квадратной матрицей решается, если эта матрица треугольна. В этом случае разрешимость при любой правой части эквивалентна отсутствию нулей на диагонали. Для интегральных уравнений аналогами систем с треугольными матрицами служат уравнения Вольтерра.

Определение 5 *Пусть X – подмножество прямой R^1, $\hat{K}$ – компактный интегральный оператор в пространстве функций на X.*

$$(\hat{K}f)(x) = \int\limits_X K(x,y)f(y)d^n y. \tag{43}$$

$\hat{K}$ называется **оператором Вольтерра**, *если выполнено одно из свойств треугольности:*

1. *$K(x,y) = 0$ при всех $x < y$ (нижнетреугольный оператор).*

2. *$K(x,y) = 0$ при всех $x > y$ (верхнетреугольный оператор).*

Определение 6 *Пусть $\hat{K}$ – оператор Вольтерра. Тогда уравнение*

$$(\hat{1} + \hat{K})f = g \tag{44}$$

уравнением Вольтерра второго рода, *а уравнение*

$$\hat{K}f = g \tag{45}$$

– **уравнением Вольтерра первого рода**.

Уравнение Вольтерра второго рода **всегда однозначно разрешимо**.

На этом мы покончим с абстрактым функциональным анализом и перейдем к исследованию одномерного оператора Шредингера.

$$L = -\partial_x^2 + u(x). \tag{46}$$

Напомним, что потенциал $u(x)$ будем предполагать гладким, вещественным и убывающим на бесконечности не медленнее, чем $1/|x|^{2+\epsilon}$.

Наша ближайшая задача – исследование решений уравнения

$$(-\partial_x^2 + u(x))\Psi = E\Psi. \tag{47}$$

Введем новый спектральный параметр k, $E = k^2$ (как мы увидим далее, k будет иметь смысл импульса падающей частицы). Каждому значению E будет отвечать 2 значения k.

$$(-\partial_x^2 + u(x))\Psi(k,x) = k^2\Psi(k,x). \tag{48}$$

Перейдем от (48) к интегральному уравнению на функцию $\Psi(k,x)$. Для этого сначала перепишем (48) в следующем виде

$$(-\partial_x^2 - k^2)\Psi(k,x) = -u(x)\Psi(k,x). \tag{49}$$

Попробуем построить обратный оператор к $(-\partial_x^2 - k^2)$.

Определение 7 Функцией Грина (фундаментальным решением) *дифференциального оператора M, действующего на функциях в R^n называется решение уравнения*

$$MG(x,y) = \delta(x_1 - y_1)\delta(x_2 - y_2)\dots\delta(x_n - y_n). \tag{50}$$

Если M – оператор с постоянными коэффициентами, то функцию Грина можно выбрать зависящей от разности $x - y$. В этом случае уравнение (50) приобретает вид

$$MG(x) = \delta(x_1)\delta(x_2)\dots\delta(x_n). \tag{51}$$

(Вопрос о существовании и единственности функции Грина не является тривиальным. Мы не будем доказывать никаких общих теорем на этот счет).

По определению, функция Грина оператора $(-\partial_x^2 - k^2)$ – решение уравнения

$$(-\partial_x^2 - k^2)G(k,x) = \delta(x), \tag{52}$$

т.е. она удовлетворяет

$$(-\partial_x^2 - k^2)G(k,x) = 0 \quad \text{при} \quad x \neq 0, \tag{53}$$

в точке 0 она уже не гладкая и выполнено условие сшивки

$$\begin{cases} G(k,x+0) - G(k,x-0) = 0 \\ G'(k,x+0) - G'(k,x-0) = -1. \end{cases} \tag{54}$$

Здесь $G(k,x+0)$ и $G(k,x-0)$ обозначают пределы функции $G(k,x)$ при $x \to 0$ справа и слева соответственно.

Тем самым функция Грина имеет вид

$$G(k,x) = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikx} + \alpha_2 e^{-ikx} & \text{при} \quad x < 0 \\ \alpha_3 e^{ikx} + \alpha_4 e^{-ikx} & \text{при} \quad x > 0 \end{cases} \tag{55}$$

где константы α_j нужно брать такими, чтобы имело место (54).

В частности, уравнению (54) удовлетворяют функции

$$G_1(k,x) = \begin{cases} 0 & \text{при } \ x < 0 \\ -\dfrac{\sin(kx)}{k} & \text{при } \ x > 0, \end{cases} \tag{56}$$

$$G_2(k,x) = \begin{cases} \dfrac{\sin(kx)}{k} & \text{при } \ x < 0 \\ 0 & \text{при } \ x > 0. \end{cases} \tag{57}$$

Теорема 5 *Пусть $\Psi(k,x)$ – некоторое решение интегрального уравнения*

$$\Psi(k,x) = e^{ikx} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} G(k,x-y)u(y)\Psi(k,y)dy, \tag{58}$$

где $G(k,x)$ – какая-нибудь из функций Грина оператора $(-\partial_x^2 - k^2)$. Тогда $\Psi(k,x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению (48).

Для доказательства достаточно применить оператор $(-\partial_x^2 - k^2)$ к обеим частям (58) и воспользоваться определением функции Грина (52).

Теорема 6

1. *Пусть $G(k,x)$ – любая из функций Грина $G_1(k,x)$, $G_2(k,x)$. Тогда при любом вещественном k существует единственное решение уравнения (50) (свое для каждой из функций Грина). Эти решения мы будем обозначать $\Psi_1(k,x)$ и $\Psi_2(k,x)$ соответственно. Обе эти функции удовлетворяют уравнению Шредингера (47)* .

2. *Функции $\Psi_1(k,x)$ и $\Psi_2(k,x)$ при вещественном $k \neq 0$ имеют следующую асимптотику по x:*

$$\Psi_1(k,x) = \begin{cases} a(k)e^{ikx} + b(k)e^{-ikx} + o(1) & \textit{при } \ x \to -\infty \\ e^{ikx} + o(1) & \textit{при } \ x \to +\infty, \end{cases} \tag{59}$$

$$\Psi_2(k,x) = \begin{cases} e^{ikx} + o(1) & \textit{при } \ x \to -\infty \\ d(k)e^{ikx} + c(k)e^{-ikx} + o(1) & \textit{при } \ x \to +\infty, \end{cases} \tag{60}$$

где $a(k)$, $b(k)$, $c(k)$, $d(k)$ – функции переменной k, свои для каждого конкретного потенциала $u(x)$. Эти функции служат **данными рассеяния непрерывного спектра***.*

3. *Функция $\Psi_1(k,x)$ аналитически продолжается по k до голоморфной в верхней полуплоскости $\Im k \geq 0$ функции, и при $|k| \to \infty$ $\Psi_1(k,x) = e^{ikx}(1+o(1))$. Аналогично, функция $\Psi_2(k,x)$ голоморфно продолжается в нижнюю полуплоскость $\Im k \leq 0$, и при $|k| \to \infty$ $\Psi_2(k,x) = e^{ikx}(1+o(1))$.*

Для доказательства используется свойство Вольтерровости интегрального оператора, входящего в уравнение (50).

Пусть теперь $\Im k > 0$. Тогда определена функция $\Psi_1(k,x)$, но в ее асимптотике при $x \to -\infty$ мы не можем увидеть убывающую экспоненту на фоне растущей. Это означает, что функция $a(k)$ аналитически продолжается в верхнюю полуплоскость по k, а $b(k)$ как правило - нет. В специальных случаях, когда $u(x)$ – финитная функция, такое продолжение возможно, однако мы не будем пользоваться этим.

Обсудим теперь спектральный смысл нулей $a(k)$. Если $a(k_j) = 0$, то из асимптотики $\Psi_1(k_j,x)$, видно, что в этом случае она убывает и при $x \to -\infty$, т.е. это точка дискретного спектра. Она может лежать лишь на мнимой оси (иначе бы $\Re\Psi_1(k_j,x)$ и $\Im\Psi_1(k_j,x)$) давали пару линейно независимых ограниченных решений, что невозможно). В этом случае

$$\Psi_1(k_j,x) = b_j e^{-ikx}(1+o(1)) \quad \text{при} \quad x \to -\infty, \tag{61}$$

и, тем самым, каждой точке дискретного спектра $E_j = -\kappa_j^2$ $k_j = I\kappa_j$, $\kappa_j \in \mathbf{R}$ мы сопоставили величину b_j, служащую аналогом данных рассеяния для дискретного спектра.

Список литературы

[1] В.Е.Захаров, С.В.Манаков, С.П.Новиков, Л.П.Питаевский “Теория солитонов. Метод обратной задачи”. М. Наука, 1980.

[2] М.Рид, Б.Саймон. “Методы современной математической физики”, М. Мир, 1977.

[3] Л.Д,Ландау, Е.М.Лифшиц. “Теоретическая физика, том III. Квантовая механика”. М.: Наука, 1974.