



МЕХАНИКО-
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

ШАФАРЕВИЧ
АНДРЕЙ ИГОРЕВИЧ

МЕХМАТ МГУ

—
КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ
НА VK.COM/TEACHINMSU.

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ
VK.COM/TEACHINMSU.



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА
СТУДЕНТКУ ФАКУЛЬТЕТА ВМК МГУ
НЕДОЛИВКО ЮЛИЮ НИКОЛАЕВНУ

Содержание

Лекция 1	5
Введение	5
Краткий план курса	6
Начальные сведения из квантовой механики	7
Обратная ситуация	10
Лекция 2	12
Описание движения в классической системе	12
Описание движения в квантовой системе	13
Свойства вейлевских дифференциальных операторов	15
Квантовые задачи	17
Постановка задачи для классической системы	18
Лекция 3	21
Постановка задачи для квантовой системы	21
Оператор мондромии	21
Комплексификация пространства L	23
Матрица оператора M	25
Радиоактивный распад	27
Лекция 4	28
Радиоактивный распад (продолжение)	28
Резонансное тунелирование	30
Квантовый гармонический осцилятор	32
Лекция 5	36
Квантовый гармонический осцилятор (продолжение)	36
Многомерный квантовый гармонический осцилятор	38
Локальная теорема об осциляторном приближении	40
Глобальная теорема об осциляторном приближении	42
Лекция 6	44
Первоначальные сведения из теории Морса	44
Когомологии де Рама	47
Геометрический смысл	48
Теорема Морса	49
Лекция 7	50
Евклидова структура в пространстве внешних форм	50
Свойства оператора Ходжа	51
Оператор Лапласа–Бельтрами	53
Лекция 8	55
Свойства оператора Лапласа–Бельтрами	55
Оператор Виттена	58

Лекция 9	59
Представление оператора Виттена	59
Локальная теорема об осцилляторном приближении	62
Глобальная теорема об осцилляторном приближении	64
Лекция 10	65
Доказательство слабого неравенства Морса	65
Доказательство теоремы Морса об индексах	67
Доказательство сильного неравенства Морса	68
Заключение	68

Лекция 1

Введение

Речь в курсе пойдет о некоторых связях между геометрией и квантовой механикой. Обычно математический аппарат нужен, чтобы развивать или обосновывать физическую теорию. В данном курсе ситуация обратная: есть геометрическая, то-логическая задача, которую можно развивать методами квантовой физики.

Раздел топологии, о котором пойдет речь, – начальная часть *теории Морса*.¹ Приведем самый простой пример.

Пусть M – гладкая компактная ориентируемая двумерная поверхность. Известно, что она гомеоморфна поверхности, обозначаемой

$$M_g, \quad g \geq 0.$$

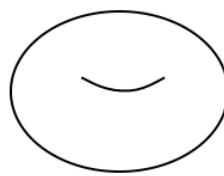
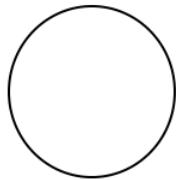


Рис. 1.1. $g = 0$, сфера

Рис. 1.2. $g = 1$, тор

Рис. 1.3. $g = 2$, крендель

На M_g рассмотрим гладкую функцию

$$f : M \rightarrow \mathbb{R}.$$

Критические точки f определяются как

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_2} = 0,$$

или, в более инвариантном виде, p – критическая, если

$$d(p)f = 0.$$

Будем считать, что критических точек конечное число и они невырожденные, т.е. матрица

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \end{pmatrix}$$

невырождена, или, по-другому, $d^2(p)f$ невырожден.

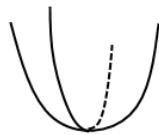


Рис. 1.4. локальный ми-
нимум



Рис. 1.5. локальный ма-
ксимум

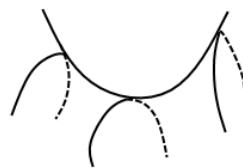


Рис. 1.6. седло

Существует 3 типа невырожденных критических точек (рис.1.4-1.6).

Оказывается, что количество критических точек определяется числом g . Простейшая связь такая:

Число локальных максимумов ≥ 1 ;

Число локальных минимумов ≥ 1 ;

Число седел $\geq 2g$.

Это простейший случай неравенства Морса.

Краткий план курса

У теоремы Морса есть чисто топологические доказательства. Как оказалось, есть и другие доказательства, основанные на соображениях квантовой механики. Мы будем пользоваться квантовым аналогом того, что в классической механике называется *теорией малых колебаний*.

Пару слов про науку о малых колебаниях. Частица движется в поле каких-то сил с потенциальной энергией $V(x)$. Пусть у системы одна степень свободы.

Поместим частицу в точку x_0 , в которой потенциальная энергия $V(x)$ имеет минимум, так, чтобы полная энергия частицы была равна потенциальной. Частица никуда не сможет сместиться по ЗСЭ (закону сохранения энергии).

Если сообщить частице чуть больше энергии, она будет двигаться, но далеко уйти не сможет (рис. 1.7). Т.к. энергия мало отличается от значения в x_0 , разложим $V(x)$ по формуле Тейлора:

$$V(x) \sim V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2.$$

В многомерном случае разложение будет выглядеть как

$$V(x) \sim V(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0, V''(x_0)(x - x_0))^2,$$

¹Теория Морса – большая область геометрии и топологии, которая изучает связь между характеристиками многообразий и поведением типичных гладких функций на них.

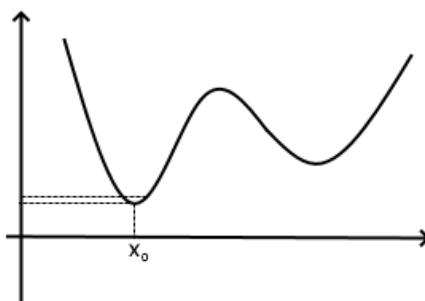


Рис. 1.7. Потенциальная энергия $V(x)$.

где $V''(x_0)$ – матрица вторых производных в т. x_0 .

Оказывается, что те же самые соображения можем применять и в случае, когда имеем дело с квантовой частицей (осцилляторное приближение).

Речь в курсе пойдет о том, как применить эти соображения квантовой механики к задачам топологии. Курс будет состоять из двух частей:

1. Сведения из математического аппарата квантовой механики, схема квантования, базовые задачи об описании квантовых спектров.
2. Геометрическая часть:
 - а) Первоначальные сведения из теории Морса;
 - б) Начальные сведения из теории Ходжа;
 - в) Конструкция, позволяющая применять к теории Морса технику из квантовой механики.

Начальные сведения из квантовой механики

Считается, что начало квантовой механики положила работа Планка, изданная в 1900 г. К концу XIX в. в физике были противоречия и в теории, и в экспериментах. Планк пытался устранить теоретический парадокс.

Два примера ситуаций, которые нельзя было объяснить до возникновения квантовой механики:

1. Фотоэффект (экспериментальный парадокс).

Есть пластиинка из металла (серебра), ее облучают светом. Фотоэффект состоит в том, что под действием света из пластиинки вылетают электроны. В XIX в. господствовала волновая теория света.

У света можно менять частоту ω и интенсивность I ; также можем посчитать кинетическую энергию E .

С точки зрения классической физики зависимость от характеристик волны следующая. От амплитуды колебаний световой волны явление зависит напрямую, от ω не очень сильно. Если частота ω маленькая, электроны вылетать будут, но понадобится больше времени.

Когда изучали закономерности, оказалось, что ситуация противоположная:

- 1) E не зависит от I .
- 2) E растет линейно с ростом частоты.
- 3) Явление *красной границы*, т.е. если $\omega < \omega_0$, электроны не вылетают.

С точки зрения классической механики эти противоречия объяснить не удалось.

2. Теория чёрного излучения (теоретический парадокс).

Есть некоторое тело, которое поддерживается при какой-то температуре. Магнитными лучами облучаем тело, часть лучей поглощается. Из-за ненулевой температуры происходит некоторое излучение.

У нас есть две характеристики: поглощательная способность (доля энергии, которую тело поглощает) и излучательная способность (то, сколько энергии излучаем в бесконечно малом интервале частот от ω до $\omega + \Delta$).

В этой теории были обнаружены некоторые закономерности, одной из которых является *закон Кирхгофа*. Он говорит о том, что отношение излучательной к поглощательной способности зависит только от температуры, но не от тела. Как следствие, если тело поглощает весь свет (чёрное тело), то излучательная способность такого чёрного тела $\epsilon(\omega)$ зависит только от температуры (и от частоты ω света). Теория чёрного излучения изучает свойства $\epsilon(\omega)$.

Базовые результаты, которые были известны:

- 1) Закон Стеффана–Больцмана.

$$E = \int_0^\infty \epsilon(\omega) d\omega = CT^4,$$

где T – температура.

- 2) Закон Вина. Этот закон говорит о том, что

$$\epsilon(\omega) = T^3 f(\omega/T).$$

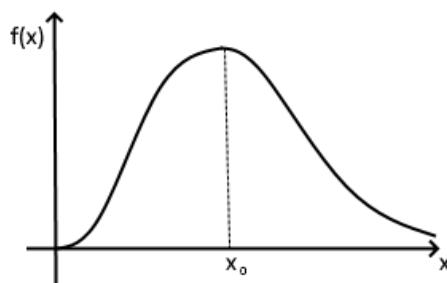


Рис. 1.8. Поведение функции $f(x)$.

Функция f должна вести себя так, как на рис.1.8.

- 3) Теория Рэлея–Джинса.

Мысль следующая. По закону Кирхгофа, структура черного тела не имеет значения, поэтому можем придумать удобный механизм. Будем считать, что тело состоит из маленьких заряженных осцилляторов. Если маленький заряд излучает энергию u , то все тело излучает энергию

$$e^{-\beta u}, \quad \beta = 1/kT.$$

Излучательная способность

$$\epsilon(\omega) = C\omega^2\bar{u},$$

$$\bar{u} = \frac{\int_0^\infty ue^{-\beta u} du}{\int_0^\infty e^{-\beta u} du}.$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} \bar{u} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_0^\infty e^{-\beta u} du = \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta} = kT. \end{aligned}$$

Тогда

$$\epsilon(\omega) = C_1\omega^2 T.$$

Формально согласуется с законом Вина, если перегруппировать

$$\epsilon(\omega) = C_1 T^3 (\omega/T)^2.$$

При значениях, близких к нулю, поведение $\epsilon(\omega)$ совпадает с законом Вина. При больших поведение совершенно отличается, и интеграл E полной энергии излучения расходится. Это получило название *ультрафиолетовой катастрофы*.

Планк предложил в схеме, аналогичной схеме в теории Рэлея-Джинса, предположить, что частицы могут излучать энергию, кратную какой-то минимальной порции:

$$u = nu_0, \quad n \geq 0.$$

Так как теперь энергия принимает дискретные значения,

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nu_0 e^{-\beta nu_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta nu_0}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta u_0 n} = \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta} \ln (1 - e^{-\beta u_0}) = \frac{u_0 e^{-\beta u_0}}{1 - e^{-\beta u_0}} = \frac{u_0}{e^{\beta u_0} - 1}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\epsilon(\omega) = \frac{C\omega^2 u_0}{e^{u_0/(kT)} - 1}.$$

Чтобы эта формула не противоречила з-ну Вина, возьмем $u_0 = \hbar\omega$. Получим

$$\epsilon(\omega) = \frac{C_1 \omega^3}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1}.$$

Эта функция ведет себя так, как нужно.

Положение об излучении энергии порциями спасло теорию Рэлея-Джинса. Отсюда и название *квантовая физика* (из-за порций энергии).

Два замечания по поводу рассуждений, приведённых выше.

Первое замечание. В вычислении \bar{u} в теории Планка принципиально важным является $u_0 = h\omega$ (в теории Рэлея-Джинса не зависело от ω).

Второе замечание. Аналогичные рассуждения можно применить для объяснения фотоэффекта. Каждый квант может отдать свою энергию

$$u_0 = h\omega,$$

которая зависит от ω . Формула, приводимая Энштейном, выглядела так:

$$E_{\text{эл}} = h\omega - A,$$

где A – минимальная энергия, которую нужно сообщить электрону, чтобы выбить его.

Эта формула объясняет зависимость энергии электронов от ω и красную границу.

Обратная ситуация

В работе де Бройля был предложен обратный подход, то есть в некоторых ситуациях рассматривать частицу как волну.

Рассмотрим гармоническое колебание, которое описывается функцией

$$\psi_0(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}. \quad (1)$$

Де Бройль предположил, что если есть квантовая частица, движущаяся, например, слева направо, то с ней нужно связать волну (1). Частота ω должна быть связана с энергией частицы как

$$E = h\omega,$$

а импульс частицы

$$p = hk.$$

Можно записать

$$\psi_0(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}.$$

Не совсем понятно, что нужно делать, если хотим исследовать более сложные волны $\psi(x, t)$, в которых импульс и координаты могут меняться со временем. Де Бройль предложил, учитывая, что

$$-ih\frac{\partial\psi_0}{\partial x} = p\psi_0,$$

$$ih\frac{\partial\psi_0}{\partial t} = E\psi_0,$$

заменить p и E на операторы

$$\hat{p} = -ih \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\hat{E} = ih \frac{\partial}{\partial t}.$$

Идея состоит в следующем. При переходе к квантовой системе состояния считаем функциями, а наблюдаемые величины – операторами.

Теперь надо придумать, как записать уравнение движения.

В системе классической механики функция Гамильтона выглядит как

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2} + V(x).$$

Полная энергия системы приравнивается к $H(x, p)$:

$$E = H(x, p) = \frac{p^2}{2} + V(x).$$

Перейдя к квантовой системе и заменив наблюдаемые величины операторами, получим для волны ψ уравнение

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(h^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi. \quad (2)$$

Уравнение (2) называется *уравнением Шрёдингера*.

Лекция 2

Описание движения в классической системе

Сформулируем теперь формальную схему квантования, которая сопоставляет системе классической механики систему квантовой физики.

Вспомним сначала, как устроена классическая система.

1. Пространство состояний.

$$\mathbb{R}^{2n}, x = (x_1, \dots, x_n); p = (p_1, \dots, p_n), \quad y = (x, p) \in \mathbb{R}^{2n}$$

2. Пространство наблюдаемых.

Это пространство гладких функций

$$f : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}.$$

В дальнейшем наложим на них некоторые ограничения.

3. Динамика.

Фиксируем $H(x, p)$ – функцию полной энергии, или функцию Гамильтона. Уравнение Гамильтона задается следующим образом:

$$\begin{cases} \dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \\ \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial x_j}. \end{cases}$$

Скажем два слова о инвариантной форме записи.

Рассмотрим в пространстве состояний

$$\omega = \sum_{j=1}^n dp_j dx_j$$

– стандартную симплектическую форму.

Эта форма невырожденная, так как в базисе (x, p) имеет матрицу

$$\begin{pmatrix} 0 & E \\ -E & 0 \end{pmatrix}$$

Если зафиксируем такую форму, то обнаружим, что функции f порождают векторные поля v_f .

Для $P \in \mathbb{R}^{2n}$, $\xi \in T_P \mathbb{R}^{2n}$, где $T_P \mathbb{R}^{2n}$ – пространство касательных в точке P ,

$$\omega(\xi, v_f) = df(\xi). \quad (3)$$

v_f называется *гамильтоновым полем*, соответствующим функции f .

Рассмотрим

$$\xi = (\xi_x, \xi_p) \in \mathbb{R}^{2n}.$$

Запишем равенство (3)

$$\sum_{j=1}^n (\xi_{p_j} v_{x_j} - v_{p_j} \xi_{x_j}) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \xi_{x_j} + \frac{\partial f}{\partial p_j} \xi_{p_j} \right),$$

где у v_{fy} пропускаем индекс f для сокращения записи.

Получается, что

$$v_f = \left(\frac{\partial f}{\partial p}, \frac{\partial f}{\partial x} \right).$$

Таким образом, уравнения Гамильтона можем записать так:

$$\dot{y} = v_H(y).$$

На функциях можем определить следующую операцию.

Определение 1. Для гладких функций f, g из пространства наблюдаемых скобка Пуассона определяется как

$$\{f, g\} = \omega(v_f, v_g) = dy(v_f) = \partial_{v_f}(g) = -\partial_{v_g}(f).$$

Запишем в координатах (x, p) :

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial x_j} - \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} \right).$$

Из формулы (и определения) вытекает, что скобка Пуассона обладает свойствами:

1. Билинейна;
2. Кососимметрична

$$\{f, g\} = -\{g, f\};$$

3. Для $\forall f, g, w$

$$\{\{f, g\}, w\} + \{\{g, w\}, f\} + \{\{w, f\}, g\} = 0.$$

Кроме того, в пространстве наблюдаемых у нас есть и операция *поточечного умножения* функций.

Замечание В дальнейшем будем рассматривать наблюдаемые, которые являются многочленами по p , то есть

$$f = \sum_m f_m(x) p^m,$$

где $m = (m_1, \dots, m_n)$, а $p^m = p^{m_1} \dots p^{m_n}$ (моном).

Описание движения в квантовой системе

Перейдем теперь к квантовой системе.

1. Пространство состояний.

Это пространство $L^2(\mathbb{R}^n)$ функций $\psi(x)$.

2. Пространство наблюдаемых.

На прошлой лекции обсуждали, что если есть классическая наблюдаемая $f(x, p)$, в квантовой системе нам нужно сделать переход

$$p_j \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}.$$

В общем случае, когда f – произвольные функции, непонятно, как делать такой переход. Поэтому мы и ввели ограничение, чтобы f были полиномами по p . В этом случае, обозначив функцию после подстановки f^+ , получим

$$f^+v = \sum_m f_m(x) \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m v,$$

где

$$\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m = \left(-ih \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{m_1} \dots \left(-ih \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^{m_n}.$$

Заметим, что f могли бы записать и так:

$$f = \sum_m p^m f_m(x).$$

Тогда обозначим функцию после замены как f^- и получим

$$f^-v = \sum_m \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m (f_m(x)v).$$

Нам удобно выбрать не какую-либо из этих функций, а некоторую их симметризацию.

Запишем

$$f^+v = \sum_m \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m (f_m(y)v(x)) \Big|_{y=x},$$

$$f^-v = \sum_m \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m (f_m(x)v(x)) \Big|_{y=x}.$$

Во втором случае, конечно, это совсем формальная запись, т.к. нет зависимости от y .

Определение 2. Пусть $f = \sum_m f_m(x)p^m$. Вейлевский дифференциальный оператор \hat{f} , соответствующий f , это

$$\hat{f}v = \sum_m \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m \left(f_m \left(\frac{x+y}{2} \right) v(x) \right) \Big|_{y=x}.$$

Замечание. Вейлевские дифференциальные операторы будем рассматривать в качестве наблюдаемых.

3. Динамика.

Фиксируем вейлевский оператор \hat{H} . Тогда изменения состояния ψ описываются уравнением Шрёдингера

$$ih \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi.$$

Самый стандартный выбор функции Гамильтона – сумма потенциальной и кинетической энергий

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x).$$

Тогда вейлевский оператор

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x),$$

где Δ – сумма вторых производных.

Это и есть формальная схема квантования.

Свойства вейлевских дифференциальных операторов

Напомним, что у классических наблюдаемых f и g введены две операции: поточечное умножение fg и скобка Пуассона $\{f, g\}$.

Для вейлевских операторов \hat{f} и \hat{g} можно ввести композицию $\hat{f}\hat{g}$. Аналогом скобки Пуассона будет *коммутатор*

$$[\hat{f}, \hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}.$$

Эти две операции оказываются тесно связаны с операциями для классических наблюдаемых, а именно переходят в них, если $\hbar \rightarrow 0$.²

Нам будет удобно рассматривать *квантовую скобку Пуассона*

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_q = \frac{i}{\hbar}[\hat{f}, \hat{g}].$$

Утверждение 1. В квазиклассическом пределе при $\hbar \rightarrow 0$

$$\hat{f}\hat{g} = \hat{f}\hat{g} + O(\hbar), \quad \{\hat{f}, \hat{g}\}_q = \{f, g\} + O(\hbar).^3$$

Доказательство. Все формулы линейны по f и g , значит, достаточно доказать, когда $f(x, p), g(x, p)$ – это мономы. Будем применять индукцию по степени монома f .

Установим перед этим, что такое формула, которая описывает композицию мономов. Рассмотрим

$$\hat{p}_j = -i \frac{\partial}{\partial x_j} \hat{F},$$

где \hat{F} – произвольный вейлевский оператор. Тогда можно утверждать, что

$$\hat{p}_j \hat{F} = \widehat{p_j F} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \widehat{F}}{\partial x_j},$$

²Предел при $\hbar \rightarrow 0$ называется *квазиклассическим пределом*.

³Имеется в виду следующая формальная вещь. f и g – многочлены по перепененной p , а их коэффициенты $f_m(x, h)$ и $g_m(x, p)$ – это гладкие по x функции, возможно, многочлены по h . Тогда \hat{f} и \hat{g} тоже будут многочленами по h . Считаем, что $O(\hbar)$ многочлен, у которого нет нулевого коэффициента.

$$\hat{F}\hat{p}_j = \widehat{p_j F} + \frac{ih}{2} \frac{\partial \widehat{F}}{\partial x_j}.$$

Обе эти формулы проверяются прямым дифференцированием. Проверим первую из них.

Пусть $F(x, p) = a(x)p^m$. Тогда

$$\begin{aligned} \hat{p}_j \hat{F} v &= \left(-ih \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \left(\left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m a \left(\frac{x+y}{2} \right) v(x) \Big|_{y=x} \right) = \\ &= \left(-ih \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m a \left(\frac{x+y}{2} \right) v(x) \right) \Big|_{y=x} - \\ &\quad - \left(-ih \frac{\partial}{\partial y_j} \left(-ih \frac{\partial}{\partial x} \right)^m a \left(\frac{x+y}{2} \right) v(x) \right) \Big|_{y=x}. \end{aligned}$$

Верхняя строчка – просто вейлевский оператор, снизу дифференцирование только a :

$$\hat{p}_j \hat{F} v = \widehat{p_j F} - \frac{ih}{2} \left(-ih \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^m \frac{\partial a}{\partial x_j} \left(\frac{x+y}{2} \right) v(x) \Big|_{y=x},$$

значит, снизу тоже вейлевский оператор.

Вернемся к доказательству равенств.

1. Докажем, что

$$\hat{f}\hat{g} = \hat{f}g + O(h).$$

База индукции следует из наших формул.

Проверим шаг индукции. Допустим, равенство доказано для всех мономов, которые не превосходят k . Тогда

$$\begin{aligned} f = p_j f_0, \quad \hat{f}\hat{g} &= \widehat{p_j f_0} \hat{g} = \\ &= \hat{p}_j \hat{f}_0 \hat{g} + \frac{ih}{2} \frac{\partial \widehat{f_0}}{\partial x_j} \hat{g}. \end{aligned}$$

Второе слагаемое уже $O(h)$, в первом есть формула для монома степени k , которая нам известна. Получаем

$$\hat{f}\hat{g} = \hat{p}_j \widehat{f_0 g} + O(h) = \widehat{p f_0 g} + O(h).$$

2. Доказываем

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_q = \{f, g\} + O(h).$$

Базу индукции, аналогично, проверять не будем.

Шаг индукции. Берем моном нужного вида. Тогда

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_q = \frac{i}{h} (\widehat{p_j f_0} \hat{g} - \hat{g} \widehat{p_j f_0}) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left(\hat{p}_j \hat{f}_0 \hat{g} + \frac{ih}{2} \widehat{\frac{\partial f_0}{\partial x_j}} \hat{g} - \hat{g} \hat{p}_j \hat{f}_0 - \frac{ih}{2} \hat{g} \widehat{\frac{\partial f_0}{\partial x_j}} \right).$$

Вычитая из верхнего нижнее, получим

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_q = \frac{i}{\hbar} (\hat{p}_j \hat{f}_0 \hat{g} - \hat{p}_j \hat{g} \hat{f}_0 - ih \widehat{\frac{\partial g}{\partial x_j}} \hat{f}_0) + \frac{ih}{2} \left\{ \widehat{\frac{\partial f_0}{\partial x_j}}, \hat{g} \right\}_q.$$

Это мономы порядка k и $O(\hbar)$.

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_q = \hat{p}_j \{\hat{f}_0, \hat{g}\}_q + \widehat{\frac{\partial g}{\partial x_j}} \hat{f}_0 + O(\hbar),$$

первое слагаемое – моном порядка k . Перепишем, объединив с первой формулой:

$$\begin{aligned} \{\hat{f}, \hat{g}\}_q &= p_j \widehat{\{f_0, g\}} + \widehat{\frac{\partial g}{\partial x_j}} f_0 + O(\hbar) = \\ &= \left(p_j \widehat{\{f_0 g\}} + \widehat{\frac{\partial g}{\partial x_j}} f_0 \right) + O(\hbar). \end{aligned}$$

Осталось убедиться, что вот эта классическая наблюдаемая функция и есть скобка Пуассона.

$$\{fg\} = \{p_j f_0, g\} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial p_k} (f_0 p_j) \frac{\partial g}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} (f_0 p_j) \frac{\partial g}{\partial p_k} \right),$$

дифференцируя, получим, что

$$\{fg\} = p_j \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial f_0}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial x_k} - \frac{\partial g}{\partial p_k} \frac{\partial f_0}{\partial x_k} \right) + f_0 \frac{\partial g}{\partial x_j},$$

а это и есть нужное выражение.

Утверждение доказано.

Квантовые задачи

Итак, у нас есть какая-то классическая система, из нее получили квантовую. Хотим решать задачи.

Найти эволюцию состояния – значит решить уравнение Шрёдингера

$$ih \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

где \hat{H} – вейлевский оператор.

Среди всех состояний квантовой системы принято выделять *стационарные состояния*, в которых энергия не меняется со временем.

Рассмотрим простейшую ситуацию

$$\psi_0 = e^{i(px-Et)/\hbar},$$

энергия не меняется со временем, принимает значение E .

Если к этой функции применить квантовый оператор

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\psi_0 = E\psi_0,$$

то, очевидно, ψ_0 – собственная функция оператора.

Рассмотрим равенства вида

$$ih\frac{\partial}{\partial t}\psi_0 = E\psi_0.$$

Получим, что

$$H^*\psi = E\psi$$

– это стационарное уравнение Шрёдингера.

Стандартная ситуация, как мы говорили,

$$\begin{aligned} H(x, p) &= \frac{p^2}{2} + V(x), \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x). \end{aligned} \tag{4}$$

Нужно изучить спектр оператора (4). Вычислить его точно – дело безнадежное даже в одномерном случае, в котором уравнение Шрёдингера выглядит так:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V(x)\psi = E\psi \tag{5}$$

Это линейное дифференциальное уравнение второго порядка. Известно, что если $V(x)$ – произвольная функция, невозможно написать явную формулу для решения и найти явным образом спектр.

Есть два возможных пути, которых можно придерживаться. Во-первых, изучать качественные свойства спектра (как устроены значения энергии, их множества, соответствующие состояния). Во-вторых, можно их искать приближенно. *Теорема об осцилляторном приближении* использует оба варианта.

Прежде, чем перейти к этой теореме, обсудим пример.

Постановка задачи для классической системы

Одномерный пример.

Будем рассматривать одномерное уравнение. Относительно $V(x)$ предположим следующее (рис.2.1):

$$V(x) = 0 \text{ вне } [x_1, x_2].$$

Хочется понять, как ведет себя квантовая система в такой ситуации. Вспомним сначала, как ведет себя система классическая.

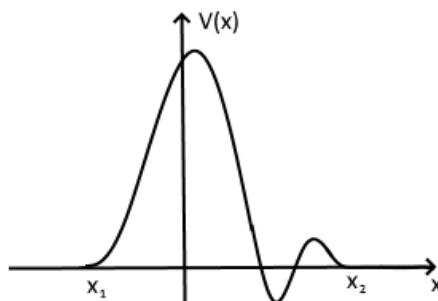


Рис. 2.1. $V(x)$.

С точки зрения физической интерпретации, $V(x)$ – потенциальная энергия сил, действующих в системе. Вся она локализована на некотором отрезке, вне отрезка сил нет и за его пределами частица движется абсолютно свободно.

Естественная физическая задача выглядит так. Некоторая частица попадает в область, ограниченную отрезком, где сосредоточены силы. Нужно понять, что может произойти с частицей.

В классической ситуации нужно рассмотреть функцию Гамильтона:

$$H(x, p) = \frac{1}{2}p^2 + V(x)$$

и решить уравнения Гамильтона:

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}. \end{cases}$$

Решения уравнений и будут траекториями нашей системы.

Если мы нарисуем пространство состояний классической системы (двумерную плоскость с координатами x и p), то траектории системы Гамильтона являются линиями уровня H , заданного уравнением

$$H(x, p) = E,$$

где E – полная энергия системы.

Рассмотрим возможные случаи:

1) Частица налетает с достаточно большой энергией:

$$E > \max V(x).$$

Тогда из вышенаписанного:

$$p^2 = 2(E - V(x)).$$

Так как правая часть строго положительная, можно извлечь корень. Уравнение задает две кривых.

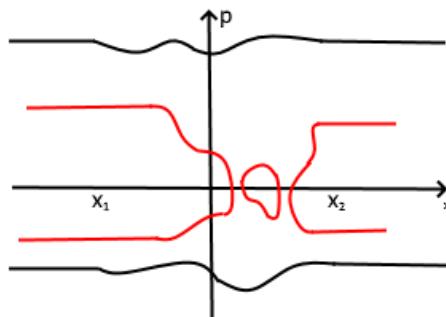


Рис. 2.2. Траектории частицы.

Частица налетает на систему и, поскольку у нее большая собственная энергия, пролетает через нее. Верхняя линия иллюстрирует случай для частицы, которая летит слева направо, нижняя – в обратную сторону (рис. 2.2, черные линии).

2) Не очень большая энергия:

$$E < \max V(X).$$

Возможны три случая. Частица летела слева и повернула, летела справа и повернула или изначально находилась внутри системы и движется внутри нее (рис. 2.2, красные линии).

Лекция 3

Постановка задачи для квантовой системы

Теперь рассмотрим соответствующую квантовую систему.

Если мы ищем состояние с постоянной энергией, квантовая система описывается следующим уравнением Шрёдингера ⁴:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V(x)\psi = E\psi. \quad (6)$$

Чтобы изучить возможных значения энергии системы, нужно рассмотреть спектр дифференциального оператора второго порядка в левой части (6). Нас интересует, как ведут себя сами состояния (решения уравнения).

Будем рассматривать $E > 0$.

Оператор мондромии

Обозначим через L пространство решений (6). Это двумерное линейное пространство, состоящее из гладких функций.

Если $E > 0$, функции из L ограничены со всеми производными.

При $x \notin [x_1, x_2]$ уравнение (6) превращается в

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' = E\psi.$$

У этого уравнения два линейно независимых решения:

$$\cos kx \text{ и } \sin kx, \text{ где } k^2 = 2E/\hbar^2.$$

Обозначим пространство решений этого уравнения через L_0 (линейная комбинация $\cos kx$ и $\sin kx$).

Определим два оператора $B_{\pm} : L \rightarrow L_0$:

$$B_{-}u(x) = u_0(x), \quad \text{если } u = u_0 \text{ при } x < x_1,$$

$$B_{+}u(x) = u_0(x), \quad \text{если } u = u_0 \text{ при } x > x_2.$$

Это линейные операторы и изоморфизмы линейных пространств.

Определение 3. Оператором мондромии уравнения Шрёдингера (6) называется оператор

$$M = B_{+}B_{-}^{-1} : L_0 \rightarrow L_0.$$

Этот оператор описывает преобразование некоторого вектора из L_0 в другой вектор из L_0 под действием уравнения Шрёдингера. Он зависит от параметра E .

Фиксируем в L_0 базис:

$$e_1 = \cos kx, \quad e_2 = \sin kx.$$

⁴ $V(x)$ – гладкая функция, равная 0 вне отрезка (см. предыдущую лекцию).

Любой $\xi \in L_0$ разложим по этому базису. Зафиксируем еще кососимметричную невырожденную форму

$$[\xi, \eta] = \xi_1 \eta_2 - \xi_2 \eta_1.$$

Ее принято называть *кососкалярным произведением*⁵.

Утверждение 2. *M сохраняет кососкалярное произведение, то есть*

$$[M\xi, M\eta] = [\xi, \eta], \quad \forall \xi, \eta \in L_0.$$

Доказательство. Определим в L кососимметричную билинейную форму

$$\{\psi, \phi\} = \psi' \phi - \psi \phi'.$$

Убедимся, что функция в правой части является числом. Для этого перепишем (6):

$$\psi'' + \frac{2(E - V)}{h^2} \psi = 0,$$

$$\phi'' + \frac{2(E - V)}{h^2} \phi = 0.$$

Домножая первое из уравнений на ϕ , второе на ψ и вычитая одно из второго:

$$\psi'' \phi - \phi'' \psi = 0 = \{\psi, \phi\}'.$$

Теперь убедимся, что B_- и B_+ переводят $\{\psi, \phi\}$ в $[\xi, \eta]$. Для этого рассмотрим решения ψ и ϕ уравнения (6).

B_- сопоставляет этим решениям такие линейные комбинации $\cos kx$ и $\sin kx$, что эти решения совпадают с ними при $x < x_1$:

$$\psi = \xi_1 \cos kx + \xi_2 \sin kx, \quad \phi = \eta_1 \cos kx + \eta_2 \sin kx, \quad x < x_1.$$

Вычислим ⁶:

$$\begin{aligned} \{\psi, \phi\} &= (-\xi_1 k \sin kx + \xi_2 k \cos kx) (\eta_1 \cos kx + \eta_2 \sin kx) - \\ &\quad - (-\eta_1 k \sin kx + \eta_2 k \cos kx) (\xi_1 \cos kx + \xi_2 \sin kx) = \\ &= k (-\xi_1 \eta_2 + \xi_2 \eta_1) = -k[B_- \psi, B_- \phi]. \end{aligned}$$

Аналогично для B_+ получим

$$\{\psi, \phi\} = -k[B_+ \psi, B_+ \phi].$$

Воспользовавшись полученными результатами, для $\xi, \eta \in L_0$ получим:

$$\begin{aligned} [M\xi, M\eta] &= [B_+ B_-^{-1}(\xi), B_+ B_-^{-1}(\eta)] = \\ &= -\frac{1}{k} \{B_-^{-1}(\xi), B_-^{-1}(\eta)\} = [\xi, \eta]. \end{aligned}$$

Утверждение доказано.

Следствие.

$$\det M = 1.$$

Заметим, что в базисе (e_1, e_2) оператор M задается как матрица размера 2×2 .

⁵Фактически это площадь параллелограмма, построенного на данных векторах.

⁶Поскольку результат не зависит от x , мы можем работать только с $x < x_1$.

Комплексификация пространства L

Вспомним физический смысл задачи.

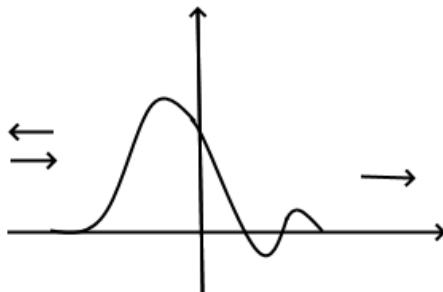


Рис. 3.1. Движение частицы через поле сил.

Есть потенциал, сосредоточенный на каком-то отрезке $[x_1, x_2]$. Мы изучаем частицу, которая налетает на эту область (рис.3.1).

Свободная частица, летящая слева направо, описывается волной де Бройля:

$$\psi_0 = e^{i(kx - \omega t)} \sim e^{ikx}.$$

Физический смысл такой функции следующий: частица летит слева направо и пролетает область.

В случае, когда частица меняет свое направление и начинает лететь в обратную сторону, функция меняется на

$$e^{-ikx - i\omega t} \sim e^{-ikx}.$$

Для того, чтобы делать выводы о том, в какую сторону направлена частица, удобнее работать с комплексным базисом.

Рассмотрим пространство L_0 и его комплексификацию ${}^C L_0$. Рассмотрим базис этой комплексификации:

$$f_1 = e^{ikx} = e_1 + ie_2, \quad f_2 = e^{-ikx} = e_1 - ie_2.$$

1. В ${}^C L_0$ можно продолжить кососимметричную форму $[., .]$.

2. Кроме этого, рассмотрим еще эрмитову форму

$$\langle \xi, \eta \rangle = \frac{1}{2i} [\xi, \bar{\eta}].$$

Убедимся, что базис (f_1, f_2) является эрмитово ортонормированным относительно данной эрмитовой формы:

$$\langle f_1, f_1 \rangle = \frac{1}{2i} [e_1 + ie_2, e_1 - ie_2] = \frac{i}{2i} ([e_2, e_1] - [e_1, e_2]) = -[e_1, e_2] = -1;$$

$$\begin{aligned} \langle f_1, f_2 \rangle &= \frac{1}{2i} [e_1 + ie_2, e_1 + ie_2] = 0; \\ \langle f_1, f_2 \rangle &= 1. \end{aligned}$$

Данная эрмитова форма не положительно определенная, имеет сигнатуру (1, 1).

3. Кроме того, в $\mathbb{C}L_0$ есть структура комплексного сопряжения, то есть действительная структура.

Соответственно, имеются группы невырожденных операторов, сохраняющих каждую из структур 1-3. Пусть

$$A : \mathbb{C}L_0 \rightarrow \mathbb{C}L_0.$$

Если A сохраняет $[., .]$, то группа таких операторов обозначается $\mathcal{S}_p(1, \mathbb{C})$ ⁷ или $SL(2, \mathbb{C})$ ⁸.

Если оператор сохраняет $\langle ., . \rangle$, группа таких операторов обозначается $U(1, 1)$ ⁹.

Группа операторов, сохраняющих действительную форму (т.е. $A\bar{\xi} = \overline{A\xi}$), обозначается $GL(2, \mathbb{R})$ ¹⁰.

Утверждение 3.

$$\mathcal{S}_p(1, \mathbb{C}) \cap U(1, 1) \in GL(2, \mathbb{R});$$

$$\mathcal{S}_p(1, \mathbb{C}) \cap GL(2, \mathbb{R}) \in U(1, 1);$$

$$U(1, 1) \cap GL(2, \mathbb{R}) \in \mathcal{S}_p(1, \mathbb{C}).$$

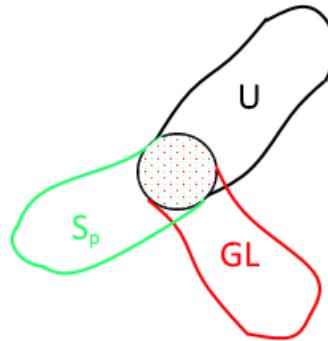


Рис. 3.2. Взаимное расположение $GL(2, \mathbb{R})$, $U(1, 1)$ и $\mathcal{S}_p(1, \mathbb{C})$.

Замечание. На рис.3.2 показано, как располагаются группы операторов.

Доказательство. Второе и третье утверждение доказываются одинаково. Докажем второе.

⁷ \mathcal{S} , потому что симплектический, т.е. сохраняющий кососкалярное произведение.

⁸ То есть группа 2×2 -матриц комплексных с определителем 1.

⁹ Унитарные операторы, которые сохраняют эрмитову форму с такой сигнатурой.

¹⁰ Группа вещественных невырожденных 2×2 -матриц.

Известно, что оператор сохраняет кососкалярное произведение и коммутирует с комплексным сопряжением. Нужно доказать, что он сохраняет эрмитово произведение.

$$\begin{aligned} < A\xi, A\eta > &= \frac{1}{2i} [A\xi, \bar{A\eta}] = \{ \text{коммутирует с комплексным сопряжением} \} = \\ &= \frac{1}{2i} [A\xi, A\bar{\eta}] = \{ \text{сохраняет кососкалярное произведение} \} = \frac{1}{2i} [\xi, \bar{\eta}] = < \xi, \eta >. \end{aligned}$$

Доказательство третьего утверждения аналогично.

Докажем первое утверждение. Пусть есть оператор A , сохраняющий кососкалярное произведение и эрмитову форму. Рассмотрим следующее выражение:

$$\begin{aligned} < A\eta, A\bar{\xi} - \bar{A\xi} > &= < A\eta, A\bar{\xi} > - < A\eta, \bar{A\xi} > = \\ &= < \eta, \bar{\xi} > - 2i [A\eta, A\xi] = < \eta, \bar{\xi} > - 2i [\eta, \xi] = 0. \end{aligned}$$

Утверждение доказано.

Группа, которая является пересечением групп $S_p(1, \mathbb{C})$, $U(1, 1)$ и $GL(2, \mathbb{R})$, называется группой $SL(2, \mathbb{R})$ или $SU(1, 1)$. Матрицы в вещественном базисе операторов из этой группы являются вещественной 2×2 -матрицей с определителем 1, $(1, 1)$ -унитарная.

Матрица оператора M

Матрица эрмитовой формы (ссылка) в эрмитово-ортонормированном базисе выглядит следующим образом:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

Матрица оператора мондромии M в эрмитово-ортонормированном базисе удовлетворяет соотношению

$$M^*IM = I, \text{ или } M^*I = IM^{-1},$$

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix}, \quad M^* = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & \bar{\beta} \\ \bar{\gamma} & \bar{\delta} \end{pmatrix}.$$

Запишем теперь это соотношение:

$$\begin{pmatrix} -\bar{\alpha} & \bar{\beta} \\ -\bar{\gamma} & \bar{\delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\bar{\delta} & \bar{\gamma} \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix},$$

откуда $\delta = \bar{\alpha}$, $\gamma = \bar{\beta}$. Значит, в этом базисе матрица оператора M выглядит так:

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ \beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix},$$

$$\det M = 1 \Rightarrow |\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1.$$

Вернемся к физической интерпретации (рис.3.3).

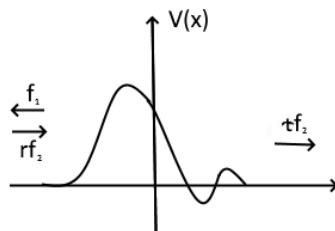


Рис. 3.3. Коэффициенты
движения частицы.

Утверждение 4. $\exists!$ решение уравнения Шрёдингера такое, что

$$\psi = \begin{cases} f_1 + rf_2, & x < x_1, \\ \tau f_1, & x > x_2 \end{cases},$$

где τ и r – некоторые комплексные коэффициенты.

Доказательство. Мы должны доказать, что существуют единственным образом определенные τ и r такие, что

$$M \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix}.$$

С учетом представления M для базиса получим, что

$$\begin{cases} \alpha + r\bar{\beta} = \tau \\ \beta + r\bar{\alpha} = 0 \end{cases}$$

Очевидно, что $r = -\beta/\bar{\alpha}$, $\tau = \alpha - |\beta|^2/\bar{\alpha} = (|\alpha|^2 - |\beta|^2)/\bar{\alpha} = 1/\bar{\alpha}$.
Утверждение доказано.

Это единственное решение описывает нашу ситуацию.

Обозначим $T = |\tau|^2$, $R = |r|^2$.

$$T + R = \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2} + \frac{1}{|\alpha|^2} = \frac{1 + |\beta|^2}{|\alpha|^2} = 1.$$

Определение 4. Число T называется *коэффициентом прохождения*, а R – *коэффициентом отражения*.

Поскольку в сумме T и R дают 1, их можно интерпретировать как вероятности (T – это вероятность того, что частица пролетела через область, R – вероятность того, что повернула назад).

Получается совершенно отличная от решения классической механики ситуация: какое бы значение не принимала энергия, всегда существует ненулевая вероятность,

что частица пролетит слева направо. Это явление называется *туннельным эффектом*.

Обратный эффект, когда при больших значениях энергии частица может отразиться с ненулевой ¹¹, называется *надбарьерным отражением*.

Рассмотрим два примера, имеющих отношение к туннельному эффекту.

Радиоактивный распад

Будем рассматривать α -распад. Были выявлены следующие закономерности:

1) Предположим, имеется $N(t)$ ядер. Это количество меняется с течением времени.

$$N(t) = N_0 e^{-t/t_0},$$

где N_0 – изначальное количество ядер, t_0 – период полураспада;

2) t_0 очень велико;

3) t_0 сильно зависит от энергии.

В основе теории α -распада лежал туннельный эффект. Идея состоит в следующем.

В нашей ситуации T – вероятность распада атома. Тогда она обладает следующими свойствами:

1) T – очень мала;

2) $(\partial T / \partial E) / T$ – велика.

Квазиклассический предел:

$$\lim_{h \rightarrow 0} T = 0;$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial E} \ln T = \infty.$$

¹¹При некоторых значениях энергии R может равняться нулю, но вообще говоря его значение отлично от нуля.

Лекция 4

Радиоактивный распад (продолжение)

Будем рассматривать простейшую модель.

Уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V(x)\psi = E\psi.$$

Предположим, что $V(x)$ имеет следующий вид ¹²:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \in [0, a], \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

Будем считать, что $E < V_0$.

Когда обсуждалось решение уравнения Шрёдингера, мы говорили о бесконечно дифференцируемой функции $V(x)$. Решить уравнение с описанной выше функцией, которая имеет разрывы первого рода, мы тоже можем.

Обсудим, как должна выглядеть ψ . Эта функция не может быть гладкой. Чтобы левая часть уравнения скомпенсировалась, нужно, чтобы ψ и ψ' были непрерывны, а ψ'' тоже имела разрыв первого рода в точках 0 и a .

Рассмотрим решение уравнения:

$$\psi = e^{ikx}, \quad x < 0,$$

$$\psi = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}, \quad x > a.$$

Если найдем коэффициент α , то сможем вычислить

$$T = \frac{1}{|\alpha|^2}.$$

Будем искать α . Рассмотрим уравнение в трех областях.

I. $x < 0$. Решение уравнения в этой области:

$$\psi = e^{ikx}, \quad k^2 = 2E/\hbar^2.$$

II. $x \in [0, a]$. В этой области уравнение выглядит так:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V_0\psi = E\psi,$$

$$\psi'' = \kappa^2\psi, \quad \kappa^2 = \frac{2(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

¹²В физике такую ситуацию принято называть потенциальным прямоугольным барьером

Решение уравнения в этой области:

$$\psi = A \operatorname{ch} \kappa x + B \operatorname{sh} \kappa x.$$

Функция в точке 0 непрерывна:

$$\lim_{x \rightarrow 0-0} e^{ikx} = \lim_{x \rightarrow 0+0} A \operatorname{ch} \kappa x + B \operatorname{sh} \kappa x,$$

$$1 = A.$$

Первая производная непрерывна тоже:

$$\lim_{x \rightarrow 0-0} (e^{ikx})' = \lim_{x \rightarrow 0+0} (A \operatorname{ch} \kappa x + B \operatorname{sh} \kappa x)',$$

$$ik = \kappa B.$$

Значит, в этой области

$$\psi = \operatorname{ch} \kappa x + \frac{ik}{\kappa} \operatorname{sh} \kappa x.$$

III. $x > a$. Решение уравнения в это области:

$$\psi = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}.$$

Ограничение на непрерывность функции в точке a :

$$\lim_{x \rightarrow a-0} \operatorname{ch} \kappa x + \frac{ik}{\kappa} \operatorname{sh} \kappa x = \lim_{x \rightarrow a-0} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx},$$

$$\operatorname{ch} \kappa a + \frac{ik}{\kappa} \operatorname{sh} \kappa a = \alpha e^{ika} + \beta e^{-ika}.$$

Аналогично для производных:

$$\kappa \left(\operatorname{sh} \kappa a + \frac{ik}{\kappa} \operatorname{ch} \kappa a \right) = ik (\alpha e^{ika} - \beta e^{-ika}).$$

Поделим нижнее из уравнений на ik и прибавим к верхнему:

$$2\alpha e^{ika} = 2 \operatorname{ch} \kappa a + \left(\frac{ik}{\kappa} + \frac{\kappa}{ik} \right) \operatorname{sh} \kappa a.$$

Таким образом, нашли α и теперь можем посчитать T :

$$T = \frac{1}{|\operatorname{ch} \kappa a + \left(\frac{ik}{\kappa} + \frac{\kappa}{ik} \right) \operatorname{sh} \kappa a|^2} = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \kappa a + \left(\frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4k^2 \kappa^2} \right) \operatorname{sh}^2 \kappa a}.$$

Проверим, верно ли, что коэффициент прохождения T обладает свойствами 1-2 (см. предыдущую лекцию). Перед применением квазиклассического предела вспомним, что

$$k = \frac{\sqrt{2E}}{h}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2(V_0 - E)}}{h}.$$

При $h \rightarrow 0$

$$T \sim \frac{4}{1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{4k^2\kappa^2}} e^{-2a\sqrt{2(V_0 - E)}/h} \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0.$$

Заметим, что при $h \rightarrow 0$ T ведет себя следующим образом:

$$T = b(E) e^{-\frac{\sigma(E)}{h}},$$
$$\frac{\partial T}{\partial E} = \left(b'(E) - \frac{1}{h} \sigma'(E) b \right) e^{-\frac{\sigma}{h}},$$
$$\frac{\partial T / \partial E}{T} = \frac{b'}{b} - \frac{1}{h} \sigma'(E) \rightarrow \infty, \quad h \rightarrow 0.$$

Итак, это очень грубая модель, но она использовалась в физических работах. Ее можно уточнить, если развить науку о том, как вычислять квазиклассический предел для коэффициентов прохождения и отражения. Это не очень просто, надо изучать решения уравнений в комплексной области. Как правило, свойства 1-2 будут выполняться¹³.

Резонансное туннелирование

Второй эффект, который мы рассмотрим, называется *резонансным туннелированием*.

Вернемся к общей ситуации. У нас есть потенциал, который характеризуется коэффициентами прохождения и отражения T и R .

В прошлый раз мы отмечали, что $T \neq 0$. А вот R при некоторых значениях энергии E может равняться нулю, причем это может происходить даже тогда, когда E меньше, чем максимум потенциала.

Получается парадоксальная ситуация: в классической системе значения E , меньшие максимума потенциала, означают, что частица повернет обратно. Тут же при некоторых таких E $R = 0$ и частица с вероятностью 1 пролетит через область.

Этот эффект и называется *эффектом резонансного туннелирования*. Можно сконструировать потенциал, для которого будет выполняться.

Рассмотрим начала потенциал, устроенный следующим образом (рис.4.1).

У потенциала $V_0(x)$ один максимум.

Прибавим к нему ровно такой же потенциал, но сдвинутый на некоторое расстояние b , достаточно большое, чтобы они не пересекались между собой (рис.4.2).

Итоговый потенциал будет выглядеть так:

$$V(x) = V_0(x) + V_0(x - b).$$

В такой системе можно добиться того, чтобы $R = 0$.

Посмотрим, как устроен для такой системы оператор мондромии M . Обозначим за M_0 оператор мондромии, который отвечает потенциалу V_0 , а за M_b – оператор мондромии сдвинутой части потенциала.

¹³Вообще говоря, не всегда – зависит от конфигурации потенциалов.

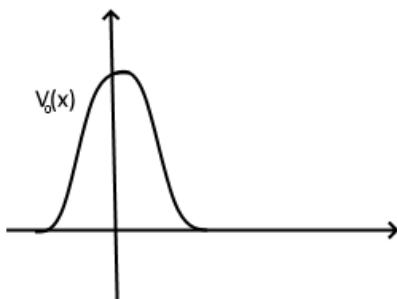


Рис. 4.1. Потенциал $V_0(x)$.

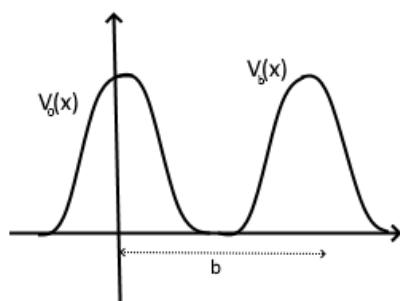


Рис. 4.2. Потенциал $V(x)$.

Тогда

$$M = M_b M_0.$$

Посмотрим, как устроено такое произведение.

$$M_0 = \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ \beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$$

Это означает, что для решения ψ уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V_0(x)\psi = E\psi$$

слева и справа от области с потенциалом выполняется

$$e^{ikx} \leftarrow \psi \rightarrow \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}.$$

Пусть матрица

$$M_b = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \bar{\beta}_1 \\ \beta_1 & \bar{\alpha}_1 \end{pmatrix},$$

то есть для решения решения ψ уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V_0(x-b)\psi = E\psi. \quad (7)$$

выполняется

$$e^{ikx} \leftarrow \psi \rightarrow \alpha_1 e^{ikx} + \beta_1 e^{-ikx}.$$

Запишем (7), сделав замену $y = x - b$:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \psi_{yy} + V_0(y) \psi = E \psi,$$

$$e^{iky} e^{ikb} \leftarrow \psi \rightarrow \alpha_1 e^{iky} e^{ikb} + \beta_1 e^{-iky} e^{-ikb}.$$

Домножим решение на e^{-ikb} :

$$e^{iky} \leftarrow \psi_1 \rightarrow \alpha_1 e^{iky} + \beta_1 e^{-iky} e^{-2ikb}.$$

Сравнивая формулы, получим, что

$$\alpha_1 = \alpha, \quad \beta_1 = \beta e^{2ikb},$$

$$M_b = \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} e^{-2ikb} \\ \beta e^{2ikb} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}.$$

Мы хотим добиться того, чтобы коэффициент отражения $R = 0$.

$$R = \frac{|\hat{\beta}|^2}{|\hat{\alpha}|^2}$$

Достаточно вычислить не все произведение матриц, а только $\hat{\beta}$:

$$\begin{aligned} \hat{\beta} &= \alpha \beta e^{2ikb} + \beta \bar{\alpha} = \beta e^{ikb} (\alpha e^{ikb} + \bar{\alpha} e^{-ikb}) = \\ &= 2\beta e^{ikb} \operatorname{Re}(\alpha e^{ikb}). \end{aligned}$$

Возможно два случая, когда $R = 0$:

1. $\beta = 0$. Это значит, что в ситуации с потенциалом $V_0(x)$ коэффициент отражения тоже равен 0. Это бывает достаточно редко.
2. $\operatorname{Re}(\alpha e^{ikb}) = 0$.¹⁴

В природе такая ситуация встречается редко, но используются на практике, например, для того, чтобы производить отбор частиц с определенной энергией. Такие конфигурации называются *туннельными контактами*.

Квантовый гармонический осциллятор

Рассмотрим систему, которая получается квантованием классического гармонического маятника. Для классического одномерного маятника функция Гамильтона выглядит как

$$H(x, p) = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2.$$

Можно нарисовать траектории, то есть решения уравнения $H = E$:

$$p^2 + \omega^2 x^2 = 2E.$$

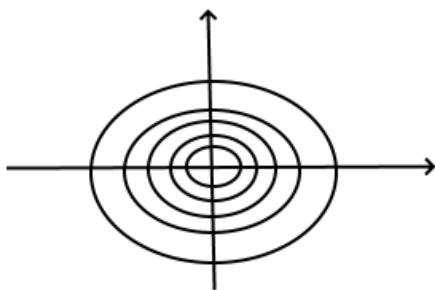


Рис. 4.3. Траектории системы.

Все траектории являются эллипсами (см. рис.).

Можно в явном виде решить уравнения Гамильтона:

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\omega^2 x, \end{cases}$$

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0,$$

откуда

$$\begin{cases} x = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \\ p = -A \sin \omega t + B \cos \omega t. \end{cases}$$

Перейдем теперь к квантовой системе.

Определение 5. Квантовый гармонический осциллятор (одномерный) – это квантовая система с

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\omega^2 x^2}{2}.$$

Для того, чтобы изучать возможные значения энергии, с аналитической точки зрения мы должны изучать уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2} \psi'' + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi = E \psi,$$

а со спектральной точки зрения – должны изучать спектр оператора \hat{H} .

Рассмотрим \hat{H} . Он является дифференциальным оператором второго порядка. Кроме этого, будем рассматривать дифференциальный оператор первого порядка

$$\hat{a} = \omega x + \hbar \frac{d}{dx}$$

¹⁴В качестве упражнения можно убедиться, что уравнение из второго случая имеет решение для прямоугольника, рассмотренного в первой части лекции. Получится, что для одного прямоугольника $R \rightarrow 1$, но в случае, когда их два, частица может проскочить область с вероятностью 1.

и формально сопряженный к нему оператор

$$\hat{a}^* = \omega x - h \frac{d}{dx}.$$

Определение 6. \hat{a} называется *оператором уничтожения*, а \hat{a}^* – *оператором рождения*.

Установим коммутационные соотношения между \hat{H} , \hat{a} и \hat{a}^* .

Утверждение 5. 1. $\hat{a}\hat{a}^* = 2\hat{H} + h\omega$;

$$2. \hat{a}^*\hat{a} = 2\hat{H} - h\omega;$$

$$3. [\hat{a}, \hat{a}^*] = 2h\omega;$$

$$4. [\hat{H}, \hat{a}] = -h\omega\hat{a};$$

$$5. [\hat{H}, \hat{a}^*] = h\omega\hat{a}^*.$$

Доказательство. Представляет собой простую проверку. Для пункта 1:

$$\hat{a}\hat{a}^*u = \left(\omega x + h \frac{d}{dx} \right) (\omega xu - hu') =$$

$$= \omega^2 x^2 u - \omega xhu' + \omega xhu' + h\omega u - h^2 u'' = 2\hat{H}u + h\omega u.$$

Пункт 2 доказывается аналогично.

Для доказательства пункта 3 достаточно из пункта 1 вычесть пункт 2.

Докажем пункт 4. Равенство 1 умножим на \hat{a} справа, а равенство 2 – слева и вычтем второе из первого. Получится, что

$$0 = 2\hat{H}\hat{a} + h\omega\hat{a} - 2\hat{a}\hat{H} + h\omega\hat{a} = 0,$$

$$[\hat{H}, \hat{a}] + h\omega\hat{a} = 0.$$

Пункт 5 доказывается аналогично. Утверждение доказано.

С помощью этих соотношений вычислим в явном виде \hat{H} . Пусть \mathcal{E} – спектр \hat{H} .

Утверждение 6. \mathcal{E} ограничено снизу числом $h\omega/2$;

$$(E_0 = h\omega/2 \in \mathcal{E}) \iff$$

$$\iff (\exists \text{ решение уравнения } \hat{a}\psi_0 = 0, \text{ быстро убывающее на бесконечности})^{15}.$$

Доказательство. Представим \hat{H} в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}h\omega + \frac{1}{2}\hat{a}^*\hat{a}.$$

Предположим, \exists некоторое число $E \in \mathcal{E}$. Пусть ψ – соответствующая собственная функция.

$$E\psi = \hat{H}\psi = \frac{1}{2}h\omega\psi + \frac{1}{2}\hat{a}^*\hat{a}\psi.$$

¹⁵На самом деле быстрее любой степени x .

Через

$$(u, v) = \int_{\mathbb{R}} uv dx$$

обозначим L_2 -скалярное произведение.

$$\begin{aligned} E(\psi, \psi) &= \frac{1}{2}h\omega(\psi, \psi) + \frac{1}{2}(\hat{a}^* \hat{a}\psi, \psi) = \frac{1}{2}h\omega(\psi, \psi) + \frac{1}{2}(\hat{a}\psi, \hat{a}\psi), \\ E\|\psi\|^2 &= \frac{1}{2}h\omega\|\psi\|^2 + \frac{1}{2}\|\hat{a}\psi\|^2, \\ E &= \frac{1}{2}h\omega + \frac{\|\hat{a}\psi\|^2}{2\|\psi\|^2}, \end{aligned}$$

откуда и следует утверждение.

Заметим, что $\hat{a}\psi_0 = 0$ означает, что $h\psi'_0 + \omega x\psi_0 = 0$, т.е.

$$\psi_0 = e^{-\omega x^2/2h},$$

которая отвечает минимальному собственному значению $E_0 = h\omega/2$.

Утверждение 7.

$$\forall m \in \mathbb{Z}_+ E_m = h\omega(m + 1/2) \in \mathcal{E}.$$

Соответствующая E_m собственная функция $\psi_m = (\hat{a}^*)^m \psi_0$.

Доказательство. Докажем сначала следующий факт.

Пусть E – собственное значение \hat{H} с собственной функцией ψ .

Тогда $\hat{a}^* \psi$ – либо 0, либо собственная функция \hat{H} , соответствующая с.з.н. $E + h\omega$.

Доказательство вспомогательного факта следует из пункта 5 утверждения 5:

$$[\hat{H}, \hat{a}^*] = \hat{H}\hat{a}^* - \hat{a}^*\hat{H} = h\omega\hat{a}^*,$$

$$\hat{H}\hat{a}^*\psi - \hat{a}^*\hat{H}\psi = h\omega\hat{a}^*\psi,$$

$$\hat{H}\hat{a}^*\psi = (E + h\omega)\hat{a}^*\psi,$$

что и нужно было получить.

Отсюда сразу следует верхнее утверждение. Пусть

$$\psi_0 = e^{-\omega x^2/2h}, \text{ то } E_0 = h\omega/2,$$

$$\hat{a}^*\psi_0 = \left(\omega x - h \frac{d}{dx} \right) \psi_0 = 2\omega x e^{-\omega x^2/2h},$$

ненулевая функция, которой соответствует $E_1 = h\omega(1 + 1/2)$.

Повторяем эту процедуру:

$$(\hat{a}^*)^2 \psi_0 = \left(\omega x - h \frac{d}{dx} \right) 2\omega x e^{-\omega x^2/2h} = (4\omega^2 x^2 - 2h\omega) e^{-\omega x^2/2h}.$$

Это собственная функция, соответствующая значению $E_2 = h\omega(2 + 1/2)$.

Далее можно индуктивно доказать утверждение.

Легко проверить, что

$$(\hat{a}^*)^m \psi_0 = p_m(x) e^{-\omega x^2/2h},$$

где p_m – многочлен степени m .

Лекция 5

Квантовый гармонический осцилятор (продолжение)

Продолжим обсуждать тему прошлой лекции.

Нам осталось убедиться, что, кроме $E_0 = \hbar\omega/2$ и $E_m = \hbar\omega(m + 1/2)$, в спектре \mathcal{E} нет других точек.

Утверждение 8.

$$\mathcal{E} = \{E_m, m \geq 0\}.$$

Доказательство. Докажем вспомогательное утверждение.

Пусть $E \in \mathcal{E}$, ψ – собственная функция, которая ему соответствует.

Тогда $\hat{a}^* \psi$ – либо 0, либо собственная функция \hat{H} , соответствующая с.з.н. $E - \hbar\omega$.

Для доказательства воспользуемся пунктом 6 утверждения 5:

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hat{H}\hat{a} - \hat{a}\hat{H} = -\hbar\omega\hat{a}.$$

Применим выражение к функции ψ :

$$\hat{H}\hat{a}\psi - E\hat{a}\psi = -\hbar\omega\hat{a}\psi,$$

$$\hat{H}\hat{a}\psi = (E - \hbar\omega)\hat{a}\psi,$$

откуда следует вспомогательное утверждение.

Теперь предположим, что имеется некоторое $E \in \mathcal{E}$ и ему соответствует функция ψ .

Подействуем на функцию оператором уничтожения \hat{a} . Согласно вспомогательному утверждению, $\hat{a}\psi$ – либо 0, либо собственная функция, соответствующая значению $E - \hbar\omega$.

Повторим операцию еще раз. Если $(\hat{a})^2\psi$ – ненулевая, то она является собственной функцией, соответствующей собственному значению $-2\hbar\omega$.

Применяя оператор уничтожения некоторое конечное число раз (т.к. E ограничены снизу $E_0 = \hbar\omega/2$, см. прошлую лекцию), получим

$$\exists m : (\hat{a})^m\psi \neq 0, (\hat{a})^{m+1} = 0.$$

Обозначим $u = (\hat{a})^m\psi$. Единственным решением уравнения $\hat{a}u = 0$ будет

$$u = \psi_0 = e^{-\omega x^2/(2\hbar)},$$

которому соответствует

$$E - mh\omega = \hbar\omega/2.$$

Утверждение доказано.

Несколько слов о доказательстве.

Обсудим, какие качественные выводы можно сделать для формул собственных функций. Для случая классического маятника энергия, как мы помним, может принимать любые неотрицательные значения.

В квантовой системе энергия может принимать только дискретные значения вида E_m . Правда, в квазиклассическом пределе при $h \rightarrow 0$, во-первых, $E_m \rightarrow 0$, а во-вторых, расстояние между $E_m \rightarrow 0$. Таким образом, в квазиклассическом пределе система становится похожа на классическую.

Обсудим собственные функции

$$\psi_m = (\hat{a}^*)^m e^{-\omega x^2/2h}.$$

Каждая из этих функций является многочленом степени m , умноженным на экспоненту.

Рассмотрим, как устроены эти функции в квазиклассическом пределе. Экспоненту можем записать как

$$e^{-\omega(x/\sqrt{h})^2/2} = e^{-\omega\xi^2/2}, \quad \xi = x/h.$$

Оператор рождения представим в виде

$$\hat{a}^* = \sqrt{h} \left(\omega \frac{x}{\sqrt{h}} - \frac{d}{d(x/\sqrt{h})} \right) = \sqrt{h}\omega\xi - \frac{d}{d\xi}.$$

Значит,

$$\psi_m = c_m p_m(\xi) e^{-\omega\xi^2/2} = c_m f_m(\xi),$$

причем $f_m(\xi) = p_m(\xi) e^{-\omega\xi^2/2}$ убывает при $\xi \rightarrow \infty$ быстрее любой степени.

При этом

$$\|\psi_m\|^2 = c_m^2 \int_{-\infty}^{\infty} f_m^2(x/\sqrt{h}) dx = c_m^2 \sqrt{h} \int_{-\infty}^{\infty} f_m^2(\xi) d\xi.$$

Если мы хотим, чтобы $\|\psi_m\|^2 = O(1)$, $h \rightarrow 0$, мы должны выбрать $c_m = h^{1/4}$.

Таким образом, можем представить

$$\psi_m = h^{1/4} f_m(x/\sqrt{h}).$$

С.в. $\psi_0 \rightarrow \infty$, $h \rightarrow 0$, $\psi_0 \rightarrow 0$, $h \rightarrow \pm\infty$.

Попытаемся понять, как выглядят ψ_m , $m \neq 0$.

$$\left(\omega\xi - \frac{d}{d\xi} \right) e^{-\omega\xi^2/2} = 2\omega\xi e^{-\omega\xi^2/2}$$

ψ_0 выглядит, как на (рис.5.1). Остальные собственные функции устроены так же, как (рис.5.2), но каждая следующая имеет на один 0 больше.

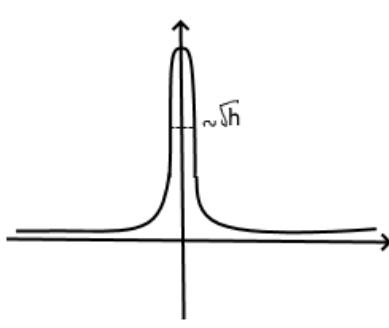


Рис. 5.1. График ψ_0 .

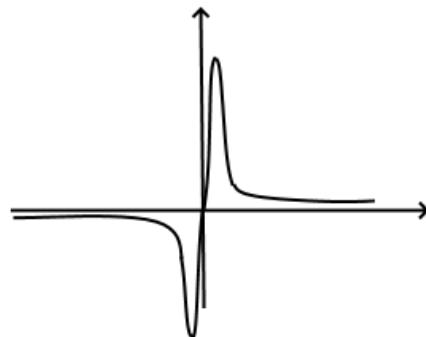


Рис. 5.2. График ψ_1 .

Многомерный квантовый гармонический осциллятор

Как и в одномерном случае, рассмотрим сначала классическую систему с маятником.

У нас есть пространство \mathbb{R}^{2n} . Функция Гамильтона выглядит так:

$$H(x, p) = \frac{1}{2}|p|^2 + \frac{1}{2}(x, \Omega^2 x),$$

где Ω^2 – симметричная положительная матрица.

Запишем уравнение Гамильтона:

$$\begin{cases} \dot{x} = p, \\ \dot{p} = -\Omega^2 x. \end{cases} \quad (8)$$

Пусть e_1, \dots, e_n – базис главных осей Ω^2 . Собственные числа формы обозначим как $\omega_1^2, \dots, \omega_n^2$.

Разложим решение (8) по главным осям:

$$x = \sum_{j=1}^n y_j e_j, \quad p = \sum_{j=1}^n q_j e_j.$$

Тогда само уравнение выглядит так:

$$\begin{cases} \dot{y}_j = q_j, \\ \dot{q}_j = -\omega_j^2 y_j. \end{cases}$$

Его решение выглядит следующим образом:

$$y_j = a_j \cos \omega_j t + b_j \sin \omega_j t,$$

$$q_j = \omega_j (-a_j \sin \omega_j t + b_j \cos \omega_j t).$$

Проекции траекторий, как и в одномерном случае, будут эллипсами. Сами траектории лежат на n -мерном торе – произведении этих окружностей. Как сами траектории ведут себя на этом торе, зависит от соотношения ω_j .

Заметим еще, что положение равновесия у этой системы только одно — $x = 0$.

Теперь рассмотрим соответствующую квантовую систему.

Она задается оператором Гамильтона

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \frac{1}{2}(x, \Omega^2 x),$$

где Δ — оператор Лапласа.

Выясним, как устроен спектр этого оператора. Для этого можно снова перейти в базис главных осей.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \omega_j^2 y_j^2 = \sum_{j=1}^n \hat{H}_j,$$

где $\hat{H}_j = -(h^2/2)(\partial^2/\partial y_j^2) + (1/2)\omega_j^2 y_j^2$. Это операторы одномерного гармонического осцилятора, поэтому спектр каждого \hat{H}_j мы знаем.

Рассмотрим ¹⁶ $L^2(\mathbb{R}^2) = L^2(\mathbb{R}_{y_1}) \otimes \cdots \otimes L^2(\mathbb{R}_{y_n})$:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \hat{H}_1 &\otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1 + 1 \otimes \hat{H}_2 \otimes 1 \cdots \otimes 1 + \\ &+ \cdots + 1 \otimes \cdots \otimes \hat{H}_n. \end{aligned}$$

У каждого \hat{H}_j спектр состоит из чисел $E = \hbar\omega_j(m_j + 1/2)$.

Пусть $m = (m_1, \dots, m_n)$ — целочисленный вектор, то

$$E_m = \sum_{j=1}^n \hbar\omega_j(m_j + 1/2),$$

а собственная функция, отвечающая этому собственному значению, будет тензорным произведением собственных функций операторов \hat{H}_j .

Возьмем оператор рождения

$$\hat{a}_j^* = \left(\omega_j y_j + \hbar \frac{\partial}{\partial y_j} \right).$$

Собственная функция

$$\begin{aligned} \psi_m &= (\hat{a}_1^*)_1^m e^{-\omega_1 y_1^2/2\hbar} \cdots (\hat{a}_n^*)_n^m e^{-\omega_n y_n^2/2\hbar} = \\ &= (\hat{a}_1^*)_1^m \cdots (\hat{a}_n^*)_n^m e^{-1/2\hbar \sum_{j=1}^n \omega_j y_j^2}. \end{aligned}$$

Конечно, можно было и повторить все рассуждения для одномерного случая.

Заметим, что в одномерном случае каждому собственному значению отвешала одна собственная функция. Здесь, вообще говоря, это не так. Возможно, одно и тоже E_m будет получаться с помощью разных комбинаций w_j и m_j .

¹⁶Пространство функций от n переменных разложим в тензорное произведение пространств функций от одной переменной.

Пару слов о структуре собственных функций. Запишем в переменных x

$$\hat{a}_j^* = \omega_j y_j - h \frac{\partial}{\partial y_j} = \omega_j(x, e_j) - h \left(e_j, \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Тогда

$$\psi_m = c_m p_m(x/\sqrt{h}) e^{-(x/\sqrt{h}, \Omega x/\sqrt{h})/2} = c_m f_m \left(\frac{x}{\sqrt{h}} \right),$$

аналогично рассуждениям из прошлой лекции выберем $c_m = h^{-n/4}$. Значит, собственные функции выглядят как

$$\psi_m = h^{-n/4} f_n \left(\frac{x}{\sqrt{h}} \right).$$

Локальная теорема об осциляторном приближении

Рассмотрим теперь оператор, который выглядит так:

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2} \Delta + V(x),$$

где $V(x)$ – гладкая функция, $x \in \mathbb{R}^n$.

Вспомним, что теория малых колебаний основана на следующем соображении. Так как частица совершает малые колебания около минимума потенциальной энергии $V(x)$, можем воспользоваться формулой Тейлора:

$$V(x) \sim V(x_0) + \frac{1}{2} (x - x_0, V''(x - x_0)),$$

где

$$V''_{ij} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}(x_0).$$

Наряду с \hat{H} рассмотрим

$$\hat{H}_0 = -\frac{h^2}{2} \Delta + V(x_0) + \frac{1}{2} (x - x_0, V''(x - x_0)).$$

Предположим, что x_0 – точка невырожденного минимума. Тогда V'' – положительно определенная матрица.

Такое находить мы уже умеем. У этого оператора спектр выглядит следующим образом:

$$E_m = V(x_0) + \sum_{j=1}^n h \omega_j (m_j + 1/2),$$

а собственные функции

$$\psi_m = h^{-n/4} f_m \left(\frac{x - x_0}{\sqrt{h}} \right),$$

где $f_m(\xi)$ – гладкая функция, на бесконечности убывающая быстрее любой степени.

Лемма 1. Пусть $W(x)$ – гладкая функция, растущая при $|x| \rightarrow \infty$ не быстрее многочлена¹⁷ и такая, что $W(x) = O(|x - x_0|^s)$, т.е. имеет 0 порядка s в точке x_0 .

Тогда

$$\|W(x)\psi_m\| = O(h^{s/2}).$$

Доказательство. Запишем

$$\|W(x)\psi_m\|^2 = h^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} W^2(x) f_m^2 \left(\frac{x - x_0}{\sqrt{h}} \right) dx.$$

Во всех точках $|x - x_0| \geq \delta > 0$ функция f_m стремится к нулю при $h \rightarrow 0$ быстрее, чем любая степень h . Поэтому

$$\|W(x)\psi_m\|^2 = h^{-n/2} \int_{|x-x_0|<\delta} W^2(x) f_m^2 \left(\frac{x - x_0}{\sqrt{h}} \right) dx + o(h^N), \quad \forall N.$$

Т.к. $W(x)$ имеет в x_0 ноль порядка s , можем записать

$$W(x) = |x - x_0|^s W_0(x),$$

где $W_0(x) \leq C$ на $|x - x_0| < \delta$.

$$\begin{aligned} \|W\psi_m\|^2 &\leq h^{-n/2} C \int_{|x-x_0|<\delta} |x - x_0|^{2s} f_m^2 \left(\frac{x - x_0}{\sqrt{h}} \right) dx \leq \\ &\leq \left\{ \text{Сделаем замену } x - x_0 = \xi \sqrt{h} \right\} \leq \\ &\leq C h^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} h^s |\xi|^{2s} f_m^2(\xi) h^{n/2} d\xi = \\ &= h^s C \int_{\mathbb{R}^n} |\xi|^{2s} f_m^2(\xi) d\xi = h^s C_1 \end{aligned}$$

Утверждение доказано.

Теорема 1. (Локальная теорема об осцилляторном приближении)

Пусть x_0 – невырожденный минимум функции $V(x)$ и пусть $V(x)$ растет при $|x| \rightarrow \infty$ не быстрее многочлена.

Тогда

$$\hat{H}\psi_m = E_m\psi_m + f, \quad \|f\| = O(h^{3/2}).$$

Доказательство. Разложим $V(x)$ по Тейлору в x_0 :

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} (x - x_0, V''(x - x_0)) + W,$$

где за W обозначили остаток, $W = O(|x - x_0|^3)$.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + W,$$

$$\hat{H}\psi_m = \hat{H}_0\psi_m + W\psi_m = E_m\psi_m + f,$$

где $f = W\psi_m = O(h^{3/2})$.

Теорема доказана.

¹⁷Имеется в виду, что и функция, и все ее производные растут не быстрее многочлена.

Следствие 1. Пусть оператор \hat{H} – самосопряжен. Тогда

$$\forall m \exists \lambda \in \sigma(\hat{H}), \quad \text{м.ч.} |\lambda - E_m| = O(h^{3/2}),$$

где $\sigma(\hat{H})$ – спектр оператора \hat{H} .¹⁸

Доказательство. Утверждение теоремы можно записать так:

$$(\hat{H} - E_m) \psi_m = f.$$

У нас возможно два варианта. Если $E_m \in \sigma(\hat{H})$, все доказано. Если $E_m \notin \sigma(\hat{H})$, то

$$\psi_m = (\hat{H} - E_m)^{-1} f,$$

$$1 = \|\psi_m\| \leq \|(\hat{H} - E_m)^{-1}\| \|f\| \leq \frac{1}{d(E_m)} \|f\|.$$

Здесь мы воспользовались фактом из функционального анализа, говорящий о том, что если у нас есть самосопряженный оператор, то норма его резольвенты равна $1/(расстояние до его спектра)$.

Получим, что

$$d(E_m) \leq \|f\|,$$

где $d(E_m)$ – расстояние до спектра.

Следствие доказано.

Числа, приближенно удовлетворяющие спектральному уравнению, называются *точками псевдоспектра*. Из следствия следует, что приближение работает, когда \hat{H} самосопряженный. В общем случае псевдоспектр может довольно сильно отличаться от спектра.

Глобальная теорема об осциляторном приближении

Напомним, что

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2} + V(x),$$

где $V(x)$ – гладкая функция, имеющая N точек глобального минимума

$$x^{(1)}, \dots, x^{(N)}$$

причем все $x^{(j)}$ невырожденные.

Для каждой $x^{(j)}$ можем построить свой оператор гармонического осцилятора

$$\hat{H}^{(j)} = -\frac{h^2}{2} \Delta + V_0 + \frac{1}{2} (x - x^{(j)}, V_j''(x - x^{(j)})),$$

¹⁸Это означает, что найдется настояще собственное значение оператора \hat{H} , которое мало отличается от приближения E_m .

где V_0 – значение $V(x)$ на всех x^j .

Для каждого такого оператора с.в. имеют вид

$$E_m^{(j)} = V(x_0) + \sum_{k=1}^n h\omega_k^{(j)}(m_k + 1/2).$$

Обозначим \mathcal{E}^s все с.в. E_m , упорядоченные по возрастанию с учетом кратности.

Следующая теорема приводится без доказательства.

Теорема 2. (*Глобальная теорема об осциляторном приближении*)

Пусть $V(x)$ удовлетворяет сформулированным выше условиями и, кроме того, вне некоторого компакта $|V(x) - V_0| \geq \delta > 0$.

Тогда $\forall M \in \mathbb{N}$ при достаточно малых $h \exists M$ с.в. оператора \hat{H} , причем если λ_s – это с.в., упорядоченные по возрастанию, то

$$\lambda_s = \mathcal{E}^{(s)} + O(h^{3/2}).$$

Лекция 6

Первоначальные сведения из теории Морса

Пусть M – гладкое n -мерное многообразие. Главной его особенностью является то, что в окрестности каждой его точки мы можем ввести локальные координаты $x = (x_1, \dots, x_n)$.

Рассмотрим функцию

$$f : M \rightarrow \mathbb{R},$$

причем $f(x_1, \dots, x_n)$ – гладкая.

Определение 7. $P \in M$ – *критическая точка* функции f , если $d_p f = 0$.

Замечание. Имеется в виду

$$d_p f : T_p M \rightarrow \mathbb{R},$$

где $T_p M$ – касательное пространство многообразия M . В координатах это определение означает, что

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(p) = 0, \quad \forall j.$$

Теория Морса изучает связь между поведением функций в критических точках и глобальной геометрией многообразия.

Определение 8. Критическая точка P – *невырожденная*, если $d_P^2 f$ – невырожденная квадратичная форма.

Замечание. Вообще говоря, второй дифференциал f в произвольной точке M не пределен корректно, но в критических точках все в порядке.

В координатах это означает, что

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(P)$$

является невырожденной матрицей.

Определение 9. Пусть P – невырожденная критическая точка. *Индексом* точки P называется число отрицательных собственных значений $d_P^2 f$.

Лемма 2. (Лемма Морса) Пусть P – невырожденная критическая точка функции f . В некоторой окрестности точки P \exists локальные координаты (y_1, \dots, y_n) такие, что

$$f(y) = f(P) + \sum_{j=1}^n \epsilon_j y_j^2, \quad \epsilon_j = \pm 1.$$

19

¹⁹Это утверждение можно рассматривать как некоторое обобщение теоремы о нейтральной функции.

Доказательство. Будем доказывать лемму по индукции. Без потери общности будем считать, что $f(P) = 0$.

Покажем, что $\forall k \leq n \exists$ локальные координаты (y_1, \dots, y_n) такие, что

$$f(y) = \sum_{j=1}^k \epsilon_j y_j^2 + \sum_{j=k+1}^n Q_{ij} y_i y_j, \quad (9)$$

где $Q_{ij}(y)$ – гладкая невырожденная матричная функция.

1. База индукции. Проверим, что (9) верно при $k = 0$.

Будем считать, что для любых координат $x_j(P) = 0$. Рассмотрим

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_0^1 \frac{d}{dx} f(xt) dt = \int_0^1 \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j}(tx) x_j dt = \\ &= \sum_{j=1}^n x_j h_j(x), \end{aligned}$$

где $h_j(x) = \int_0^1 (\partial f / \partial x_j)(tx) dt$.

Функции $h_j(x)$ – гладкие, кроме того, $h_j(0) = 0$.

Значит, можем записать в таком же виде сами h_j :

$$h_j(x) = \sum_{i=1}^n x_i Q_{ij}(x).$$

Значит,

$$f(x) = \sum_{j=1}^n x_i x_j Q_{ij}(x).$$

Осталось показать, что матрица Q_{ij} невырожденная. Для этого посчитаем Q_{ij} в нуле. Для этого достаточно посчитать значения в нуле вторых производных f :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(0) = 2Q_{ij}(0)$$

2. Шаг индукции. Пусть (9) верно для некоторого k . Хотим доказать, что это верно и для $k + 1$.

Заметим, что раз Q_{ij} – симметричная невырожденная матрица, то матрицу $Q_{ij}(0)$ можно привести к диагональному виду. Поэтому будем предполагать, что $Q_{ij}(0)$ – диагональная.

Запишем f в следующем виде:

$$\begin{aligned} f(y) &= \sum_{j=1}^k \epsilon_j y_j^2 + Q_{k+1,k+1}(y) y_{k+1}^2 + 2 \sum_{j=k+2}^n Q_{k+1,j} y_{k+1} y_j + \\ &+ \sum_{i,j=k+2}^n Q_{ij}(y) y_i y_j. \end{aligned}$$

Представим

$$Q_{k+1,k+1} = |Q_{k+1,k+1}| \epsilon_{k+1}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} f(y) = & \sum_{j=1}^k \epsilon_j y_j^2 + \epsilon_{k+1} \left[\left(\sqrt{|Q_{k+1,k+1}|} y_{k+1} \right)^2 + \right. \\ & + 2y_{k+1} \sqrt{|Q_{k+1,k+1}|} \sum_{j=k+2}^n \frac{Q_{k+1,j} \epsilon_{k+1}}{\sqrt{|Q_{k+1,k+1}|}} y_j + \\ & \left. + \left(\sum_{j=k+2}^n \frac{Q_{k+1,j} \epsilon_{k+1}}{\sqrt{|Q_{k+1,k+1}|}} y_j \right)^2 \right] + \sum_{i,j=k+2}^n \tilde{Q}_{ij}(y) y_i y_j. \end{aligned}$$

Теперь сделаем замену координат

$$x_j = y_j, \quad j \neq k+1, \quad z_{k+1} = \sqrt{|Q_{k+1,k+1}|} y_{k+1} + \sum_{j=k+2}^n \frac{Q_{k+1,j} \epsilon_{k+1}}{\sqrt{|Q_{k+1,k+1}|}} y_j.$$

В новых координатах

$$f = \sum_{j=1}^n \epsilon_j z_j^2 + \sum_{i,j=1}^n \tilde{Q}_{ij}(z) z_i z_j.$$

Осталось проверить две вещи. Во-первых, что формулы для z определяют гладкую замену координат, то есть что $z(y)$ – гладкие функции и что якобиан dz/dy не обращается в 0. Во-вторых, что \tilde{Q}_{ij} – невырожденная в окрестности начала координат.

То, что функции z гладкие, очевидно из формул, т.к. $|Q_{k+1,k+1}|$ гладкая функция, которая не обращается в 0 в начале координат.

Вычислим якобиан.

$$\frac{\partial z_i}{\partial y_j}(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \frac{\partial z_{k+1}}{\partial y_1} & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & \vdots & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \dots & \sqrt{Q_{k+1,k+1}(0)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \vdots & \dots & 1 \end{pmatrix}_{k+1}$$

Определитель равен $\sqrt{Q_{k+1,k+1}(0)}$, и, стало быть, $\neq 0$ в точке 0, а значит, и в некоторой ее окрестности.

Вычислим теперь

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j}(0) = \left(\begin{array}{ccc|c} 2\epsilon_1 & \dots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & \dots & 2\epsilon_{k+1} & \hline & 2\tilde{Q}_{ij}(0) \end{array} \right)$$

Определитель этой матрицы тоже не вырожден в 0, а значит, и в некоторой окрестности. Лемма доказана.

Когомологии де Рама

Определение 10. f – функция Морса, если у нее конченое число критических точек, и все эти точки невырожденные.

Пусть m_k – число критических точек функции f индекса k .

Пусть M – гладкое многообразие. Для каждого $k \geq 0$ можем рассматривать на нем *дифференциальные k -формы*.

То есть, если мы зафиксируем $P \in M$ и рассмотрим $T_P M$ – касательное пространство к M в точке P , в нем имеется α – внешняя форма степени k , т.е. $\alpha(\xi_1, \dots, \xi_k)$ – линейная и кососимметричная,

$$\alpha(\xi_1, \dots, \xi_k) = \text{sign } \sigma \alpha(\xi_{\sigma(1)}, \dots, \xi_{\sigma(k)}).$$

Вот если рассмотрим такое поле внешних k -форм, оно и называется *дифференциальной k -формой*.

Рассмотрим локальные координаты $x = (x_1, \dots, x_n)$. Обозначим

$$\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}$$

– базис координатных линий.

В каждой системе локальных координат

$$\alpha = \sum_{i_1 < \dots < i_k} a_{i_1 \dots i_k}(x) dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k},$$

где $a_{i_1 \dots i_k}$ – некоторые коэффициенты, \wedge – внешнее умножение форм, а dx_1, \dots, dx_n – двойственный базис, то есть

$$dx_i \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \right) = \delta_{ij}.$$

Остановимся подробнее на внешнем умножении форм.

Если имеются $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ – 1-формы, то

$$\alpha_1 \wedge \dots \wedge \alpha_k (\xi_1, \dots, \xi_n) = \det(\alpha_i(\xi_j)).$$

Операция внешнего умножения билинейная и косокоммутативная, т.е. если α – k -форма, а β – m -форма, то

$$\alpha \wedge \beta = (-1)^k m \beta \wedge \alpha.$$

Операция внешнего дифференцирования:

$$d\alpha = \sum_{i_1 < \dots < i_k} \sum_{j=1}^n \frac{\partial a_{i_1 \dots i_k}}{\partial x_j} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}.$$

Эта операция обладает следующими тремя свойствами:

1. $d(c\alpha + \tilde{c}\tilde{\alpha}) = cd\alpha + \tilde{c}d\tilde{\alpha}$;
2. Если $\alpha - k$ -форма, $\beta - m$ -форма, то

$$d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^k \alpha \wedge d\beta;$$

3. $d(d\alpha) = 0$.

Рассмотрим теперь $\alpha - k$ -форму.

Определение 11. Форма α – замкнута, если $d\alpha = 0$, и точна, если $\exists \beta : \alpha = d\beta$.

Обозначим $Z_k(M)$ – пространство замкнутых k -форм, $B_k(M)$ – пространство точных. В силу свойства 3 $B_k \subset Z_k$.

Определение 12. $Z_k/B_k = H^k(M)$ – пространство k -мерных когомологий де Рама многообразия M .

Если это пространство конечномерное, $b_k = \dim H^k$ – k -мерное число Бетти.

Пусть Ω – пространство диф. k -форм. С каждым многообразием связано n штук таких пространств²⁰:

$$\Omega_0 \rightarrow \Omega_1 \rightarrow \Omega_2 \rightarrow \dots \rightarrow \Omega_{k-1} \xrightarrow{d_{k-1}} \Omega_k \xrightarrow{d_k} \Omega_{k+1} \rightarrow \dots \rightarrow \Omega_n.$$

Рассмотрим Ω_k . В этом пространстве имеются два подпространства:

$$\ker d_k = Z_k, \quad \text{Im } d_{k-1} = B_k.$$

$$H^k = \ker d_k / \text{Im } d_{k-1}.$$

Геометрический смысл

Рассмотрим $b_0 = \dim H^0$ (это 0-формы – гладкие функции на M).

$$Z_0 = \{f : df = 0\}$$

b_0 – число компонент связности M (k -мерное число Бетти).

$$f(Q) - f(P) = \int_{\gamma} df = 0.$$

Теперь рассмотрим $b_1 = \dim H^1(M)$. Пусть α – 1-формы, $d\alpha = 0$ (замкнута).

Замечание. Замкнутая 1-форма на связном многообразии точна $\iff \forall$ замкнутой кривой $\gamma \int_{\gamma} \alpha = 0$.

Доказательство. \rightarrow Если $\alpha = df$, то

$$\int_{\gamma} \alpha = \int_{\gamma} df = \int_{\partial\gamma} f = 0.$$

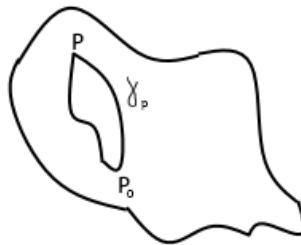


Рис. 6.1. Иллюстрация к доказательству.

\leftarrow (см. рис.6.1)

$$f(P) = \int_{\gamma_P} \alpha.$$

Замечание доказано.

Из него сразу следует

Замечание. Если \forall замкнутой кривой $\gamma \subset M \exists$ двумерная \mathcal{D} , т.ч. $\partial\mathcal{D} = \gamma$, то $H^1(M) = 0$.

$$\int_{\gamma} \alpha = \int_{\partial\mathcal{D}} \alpha = \partial\mathcal{D}d\alpha = 0.$$

Неформально можем заметить, что b_1 – количество независимых друг от друга замкнутых кривых многообразия M такие, что они не ограничивают никакой двумерный кусок. Это конечно требует аккуратной переформулировки. Точно такой же смысл у всех $b_k = \dim H^k$. В дальнейшем нам это не понадобится, но можно заметить, что хотя они и определены аналитически, это глобальные геометрические характеристики M .

Теорема Морса

Теорема 3. Пусть M – гладкое компактное n -мерное ориентируемое многообразие и пусть $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ – функция Морса. Тогда:

1. $m_k \geq b_k$ (слабое неравенство Морса);
2. $\sum_{j=0}^k (-1)^{k-j} m_j \geq \sum_{j=0}^k (-1)^{k-j} b_j$ (сильные неравенства Морса);
3. $\sum_{j=0}^n (-1)^k m_j = \sum_{j=0}^n (-1)^k b_j$ (теорема Морса об индексе).

²⁰Вообще говоря, если имеется такая цепочка пространств и $d_k d_{k-1} = 0$, имеется *цепной комплекс*.

Лекция 7

Евклидова структура в пространстве внешних форм

Пусть L – n -мерное линейное пространство.

k -форма – функция²¹ $\omega(\xi_1, \dots, \xi_n)$, линейная и кососимметричная, т.е.

$$\omega(\xi_{\sigma(1)}, \dots, \xi_{\sigma(n)}) = \text{sign}(\sigma)\omega(\xi_1, \dots, \xi_n).$$

Λ^k – пространство внешних k -форм, $\dim \Lambda^k = C_n^k$.

Пусть $\alpha \in \Lambda^k$, $\beta \in \Lambda^m$.

Внешним умножением называется операция

$$\alpha \wedge \beta(\xi_1, \dots, \xi_n) = \sum_{i_1 < \dots < i_k; j_1 < \dots < j_m} \text{sign}(\sigma)\alpha(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})\beta(\xi_{j_1}, \dots, \xi_{j_m}),$$

где σ – перестановка $(i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_m)$.

Операция внешнего умножения билинейна, ассоциативна, коссомутативна, т.е.

$$\alpha \wedge \beta = (-1)^{km}\beta \wedge \alpha$$

Рассмотрим $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ – 1-формы. Тогда

$$\alpha_1 \wedge \alpha_n(\xi_1, \dots, \xi_n) = \det(\alpha_i(\xi_j))^{22}.$$

Фиксируем в L базис e_1, \dots, e_n . Рассмотрим двойственный ему базис в сопряженном пространстве (то же самое, что пространство 1-форм) e^1, \dots, e^n . Формы вида

$$e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k}, \quad i_1 < \dots < i_k$$

образуют базис в пространстве всех k -форм. То есть

$$\omega = \sum_{i_1 < \dots < i_k} \omega_{i_1, \dots, i_k} e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k},$$

где ω_{i_1, \dots, i_k} – коэффициенты разложения. Пусть теперь L – евклидово пространство. Скалярное произведение стандартно обозначим $(,)$.

$$G : L \rightarrow L^* = \Lambda^{123}$$

Для $\xi \in L$

$$G(\xi)(\eta) = (\xi, \eta)^{24}.$$

Пусть $\alpha, \beta \in \Lambda^1$. Тогда

$$(\alpha, \beta) = (G^{-1}(\alpha), G^{-1}\beta). \tag{10}$$

²¹ $0 \leq k \leq n$

²² Такое произведение иногда называют разложимой формой или внешним многочленом.

²³ В тензорной алгебре эта операция называется операцией опускания индекса

²⁴ Можно проверить, что эта формула определяет изоморфизм линейных пространств, убедившись, что \ker нулевое.

Замечание. 1. Пусть e_1, \dots, e_n – базис в L , $g_{ij} = (e_i, e_j)$, а e^1, \dots, e^n – двойственный базис, то

$$(e^i, e^j) = g^{ij} – \text{обратная к } g_{ij}.$$

2. Пусть e_1, \dots, e_n – ОНБ²⁵, то e^1, \dots, e^n – тоже ОНБ²⁶.

Определим теперь скалярное произведение (обозначим его $(,)_k$) на k -формах.

Пусть

$$\alpha, \beta \in \Lambda^k, \quad \alpha = \alpha_1 \wedge \dots \wedge \alpha_k, \quad \beta = \beta_1 \wedge \dots \wedge \beta_k.$$

Тогда

$$(\alpha, \beta)_k = \det(\alpha_i, \beta_j)_1.$$

Свойства оператора Ходжа

Теперь поговорим об операторе $*$.

Пусть L – евклидово ориентированное пространство. Будем обозначать через Ω форму объема – n -форму, т.ч.

1. $(\Omega, \Omega)_n = 1$;
2. Если ξ_1, \dots, ξ_n – правильно ориентированный базис, то $\Omega(\xi_1, \dots, \xi_n) > 0$.

Эти два условия однозначно определяют свойство объема, т.к.

$$\dim \Lambda^n = C_n^n = 1,$$

и для любого $\omega_0 \in \Lambda^n$, $\omega_0 \neq 0$, то $\Omega = c\omega_0$.

Заметим, что $\dim \lambda^k = \dim \Lambda^{n-k}$.

Рассмотрим $* : \Lambda^k \rightarrow \Lambda^{n-k}$, $\alpha \in \Lambda^k$.

Определение 13. Форма $*\alpha$ – $(n-k)$ -форма, для которой

$$\forall \beta \in \Lambda^{n-k} \quad (*\alpha, \beta)_{n-k} = (\alpha \wedge \beta, \Omega)_n. \quad (11)$$

Оператор $*$ называют *оператором Ходжа*.

Утверждение 9. (*Свойства оператора Ходжа*).

1. Пусть e_1, \dots, e_n – ОН правильно ориентированный базис. Тогда

$$*e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k} = \text{sign } \sigma e^{j_1} \wedge \dots \wedge e^{n-k},$$

$$\varepsilon \partial e (j_1, \dots, j_n) = (1, \dots, n) \setminus (i_1, \dots, i_k), \quad a \sigma = (i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, i_{n-k}).$$

$$2. (*\alpha, *\beta) = (\alpha, \beta).$$

$$3. \text{ Если } \alpha \in \Lambda^k, \text{ то}$$

$$**\alpha = (-1)^{k(n-k)} \alpha.$$

$$4. (*\alpha, \beta)_{n-k} = (-1)^{k(n-k)} (\alpha, *\beta).$$

$$5. \text{ Пусть } \alpha, \beta \in \Lambda^k, \text{ то}$$

$$\alpha \wedge *\beta = (\alpha, \beta)_k \Omega.$$

²⁵Ортонормированный базис.

²⁶При условии, что скалярное произведение определяется формулой (10).

6. Рассмотрим L и $L^* = \Lambda^1$ – ортонормированные, ориентированные. Если $M \subset L^*$ – k -мерное ориентированное под- σ о, то M^\perp – $(n-k)$ -мерное ориентированное. Выберем в M ортонормированный правильно ориентированный базис $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ (α_i – 1-формы). Возьмем

$$\alpha = \alpha_1 \wedge \dots \wedge \alpha_k^{27}.$$

Аналогично в M^\perp построим $(n-k)$ -форму β .

Тогда

$$\beta = * \alpha.$$

Доказательство. 1. Заметим, что $e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k}$ – тоже ОНБ, так как

$$(e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k}, e^{j_1} \wedge \dots \wedge e^{j_k}) = \det(e^{i_s}, e^{j_m}),$$

– либо 0, либо 1.

Заметим, что т.к. у нас правильно ориентированный базис,

$$\Omega = e^1 \wedge \dots \wedge e^n.$$

Т.к. формула (11) линейна по β , рассмотрим $\beta = e^{m_1} \wedge \dots \wedge e^{m_{n-k}}$. Запишем левую часть определения (11):

$$(*\alpha, \beta) = \text{sign } \sigma(e^{j_1} \wedge \dots \wedge e^{j_{n-k}}, e^{m_1} \wedge \dots \wedge e^{m_{n-k}}) = \text{sign } \sigma \delta_{jm}.$$

Теперь запишем правую часть:

$$\begin{aligned} (\alpha \wedge \beta, \Omega) &= (e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k} \wedge e^{m_1} \wedge \dots \wedge e^{m_{n-k}}, e^1 \wedge \dots \wedge e^n) = \\ &= \begin{cases} 0, & j \neq m, \\ \text{sign } \sigma, & j = m. \end{cases} \end{aligned}$$

2. Вытекает из первого свойства (т.к. ОНБ под действием $*$ переходит в другой ОНБ).

3. Так как доказываемое утверждение линейно по α , в качестве α достаточно взять форму ОНБ из пункта 1. Вычислим

$$**e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k} = \text{sign } \sigma \text{ sign } \rho e^{i_1} \wedge \dots \wedge e^{i_k}.$$

Т.к. $\rho = (j_1, \dots, j_{n-k}, i_1, \dots, i_k)$, $\text{sign } \sigma \text{ sign } \rho = (-1)^{k(n-k)}$.

4. Воспользуемся пунктом 2 и 3.

$$(*\alpha, \beta)_{n-k} = (**\alpha, *\beta)_k = (-1)^{k(n-k)} (\alpha, *\beta)_k$$

5. Т.к. $\alpha \wedge *\beta$ – n -форма, $\alpha \wedge *\beta = c\Omega$.

$$(\alpha \wedge *\beta, \Omega) = c(\Omega, \Omega) = c$$

²⁷Это внешнее произведение зависит только от M , но не от базиса. Если возьмем другой ОНБ ориентированный базис, произведение умножится на определитель матрицы перехода, который равен 1.

Заметим теперь, что $\alpha \wedge * \beta$ совпадает с правой частью (11), где вместо β взят $* \beta$. Тогда

$$(\alpha \wedge * \beta, \Omega) = (*\alpha, * \beta) = (\alpha, \beta).$$

6. Выберем в M ОНБ e_1, \dots, e_k , в M^\perp ОНБ e_{k+1}, \dots, e_n . Вместе эти векторы образуют правильно ориентированный ОНБ базис во всем пространстве Λ^1 . Запишем

$$\alpha = e_1 \wedge \dots \wedge e^k, \quad \beta = e_{k+1} \wedge \dots \wedge e^n$$

и воспользуемся пунктом 1.

Утверждение доказано.

Оператор Лапласа–Бельтрами

Пусть M^n – гладкое компактное n -мерное многообразие.

Обозначим Ω^k – пространство диф. k -форм.

Пусть теперь M – риманово²⁸ и ориентированное.

Обозначим еще Ω – диф. n -форма – форма объема.

Определение 14. Пусть $\alpha, \beta \in \Omega^k$. Скалярное произведение определяется как

$$(\alpha, \beta) = \int_M (\alpha, \beta)_M \Omega.$$

Вспомним, что у нас определена операция внешнего дифференцирования:

$$d : \Omega^k \rightarrow \Omega^{k+1}.$$

Рассмотрим

$$d^* : \Omega^k \rightarrow \Omega^{k-1},$$

d^* – k -форма,

$$d^* \alpha = (-1)^{n+nk+1} * d * \alpha.$$

Утверждение 10. d^* сопряжен с d :

$$(d\alpha, \beta) = (\alpha, d^* \beta).$$

Доказательство. Считаем, что α – k -форма, β – $(k+1)$ -форма. Значит, $*\beta*$ – $(n-k-1)$ -форма.

(Так как операция удовлетворяет правилу Лейбница + пояснения):

$$d(\alpha \wedge * \beta) = d\alpha \wedge * \beta + (-1)^k \alpha \wedge d * \beta.$$

$$0 = \int_M d(\alpha \wedge * \beta) = \int_M d\alpha \wedge * \beta + (-1)^k \int_M \alpha \wedge d * \beta.$$

²⁸ Для каждой точки $P \in M$ имеется скалярное произведение в касательной плоскости $T_P M$. В произвольной системе локальных координат x_1, \dots, x_k это скалярное произведение задается матрицей $g_{ij}(x)$.

Воспользуемся свойствами оператора $*$.

$$\begin{aligned} 0 &= \int_M (\alpha, \beta)_P \Omega + (-1)^k \int_M \alpha * *d * \beta (-1)^{k(n-k)} \\ 0 &= (d\alpha, \beta) + (-1)^{k+k(n-k)} (\alpha, *d * \beta) = \\ &= (a\alpha, \beta) + (-1)^{k+k(n-k)+n+n(k+1)+1} (\alpha, d * \beta). \end{aligned}$$

Утверждение доказано.

Пусть M – гладкое компактное n -мерное ориентированное многообразие.

Определение 15. Оператор Лапласа-Бельтрами – оператор $\mathcal{D} : \Omega^k \rightarrow \Omega^k$ такой, что

$$\mathcal{D}\alpha = (dd^* + d^*d)\alpha.$$

Лекция 8

Свойства оператора Лапласа–Бельтрами

Теорема 4. (*Свойства оператора \mathcal{D}*)

1. $(\mathcal{D}\alpha, \beta) = (\alpha, \mathcal{D}\beta)$;
2. $(\mathcal{D}\alpha, \alpha) \geq 0$;
3. $\mathcal{D}\alpha = 0 \iff \begin{cases} d\alpha = 0, \\ d^*\alpha = 0; \end{cases}$;
4. $\ker \mathcal{D} \cong H^k(M)$;
5. $\mathcal{D}^* = * \mathcal{D}$;
6. Если x – евклидовые координаты, то есть метрический тензор (?) $g_{ij}(x) = \delta_{ij}$,
то

$$\mathcal{D}a(x) dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} = -\Delta a dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k},$$

$$\partial a \Delta a = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_k^2}.$$

Доказательство. 1. Запишем скалярное произведение

$$((dd^* + d^*d)\alpha, \beta) = (d^*\alpha, d^*\beta) + (d\alpha, d\beta).$$

2.

$$(\mathcal{D}\alpha, \alpha) = (d^*\alpha, d^*\alpha) + (d\alpha, d\alpha) \geq 0.$$

3. \leftarrow очевидно.

\rightarrow Пусть $\mathcal{D}\alpha = 0$.

$$0 = (\mathcal{D}\alpha, \alpha) = (d^*\alpha, d^*\alpha) + (d\alpha, d\alpha) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} d\alpha = 0, \\ d^*\alpha = 0. \end{cases}$$

4. Т.к. по свойству 1 \mathcal{D} – самосопряженный оператор,

$$\Omega^k = \ker \mathcal{D} \oplus \text{Im } \mathcal{D}^{29}$$

Обозначим $\ker \mathcal{D} = H_0(M)$.

Тогда произвольная k -форма

$$\omega = \omega_0 + d\alpha, \quad \text{где } \omega_0 = 0.$$

Вспомним, что $H^k = Z^k / B_k$. Построим отображение

$$\Phi : Z_k \rightarrow H_0, \quad \Phi(\omega) = \omega_0.$$

²⁹Этот факт хорошо известен для операторов в конечномерных пространствах. Вообще говоря, для бесконечномерных пространств это неверно. Чтобы это было верно, во-первых, вместо Ω_k взять его пополнение, а во-вторых, если доказать, что у неограниченного оператора \mathcal{D} резольвента (?) компактная. Тогда формула будет верна для пополнения Ω_k , т.е. гильбертова пространства. Чтобы перейти обратно к гладкому пространству, нужно доказать еще одно свойство \mathcal{D} – его эллиптичность.

Нам нужно доказать, что H_0 – образ (очевидно, т.к. $\mathcal{D}\alpha = 0$), а B_k – ядро отображения Φ .

Убедимся, что B_k – ядро отображения Φ . Пусть ω – замкнутая форма, то есть $d\omega = 0$. Тогда

$$0 = d(dd^*\alpha + d^*d\alpha) = d(d^*d\alpha).$$

В этом случае

$$\omega = \omega_0 + d\beta, \quad \text{где } \beta = d^*d\alpha.$$

Выясним, как выглядит ядро Φ .

$$\omega \in \ker \Phi \Rightarrow \omega_0 = 0 \Rightarrow \omega \in Z_k,$$

т.е. ω – точная форма. Обратно, пусть $\omega \in Z_k$, тогда

$$\omega = d\gamma, \quad \text{где } d\gamma = \omega_0 + d\beta,$$

тогда $\omega_0 = d(\gamma - \beta)$ – точная, причем $\omega_0 = d\phi$ и $d^*\omega_0 = 0$. Значит,

$$d^*d\phi = 0,$$

$$(\phi, d^*d\phi) = 0,$$

$$(d\phi, d\phi) = 0 \Rightarrow d\phi = 0 = \omega_0.$$

Определение 16. k -форма ω – гармоническая, если $\mathcal{D}\omega = 0$.

5. Запишем

$$\begin{aligned} * \mathcal{D}\alpha &= * (d^*d + dd^*)\alpha = \\ &= (* * d * d(-1)^{n+n(k+1)+1} + * d * d * (-1)^{n+nk+1})\alpha = \\ &= ((-1)^{k(n-k)+n+nk+1+1} d * d + (-1)^{n+nk+1} * d * d *)\alpha = \\ &= ((-1)^{k+1} d * d + (-1)^{n+nk+1} * d * d *)\alpha; \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{D} * \alpha &= (d^*d\alpha + dd^* * \alpha)\alpha = * d * d * \alpha(-1)^{n+n(n-k+1)+1} + \\ &\quad + d * d * * \alpha(-1)^{n+n(n-k)+1} = \\ &= * d * d * \alpha(-1)^{n+n(n-k+1)+1} + d * d\alpha(-1)^{k(n-k)+n+n(n-k)+1}. \end{aligned}$$

Сокращая по модулю степени у (-1) , убедимся, что слагаемые совпадают.

6. Занумеруем координаты так, чтобы индексы i_1, \dots, i_k совпадали с первыми индексами $1, \dots, k$.

$$\mathcal{D}a(x)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k = dd^*a(x)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k + d^*da(x)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k.$$

Вычислим по отдельности

$$*a(x)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k = d * d * (-1)^{n+nk+1}a(x)dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k =$$

$$\begin{aligned}
 &= (-1)^{n+nk+1} d * da(x) dx_{k+1} \wedge \cdots \wedge dx_n = (-1)^{n+nk+1} d * \sum_{j=1}^k \frac{\partial a}{\partial x_j} dx_j \wedge dx_{k+1} \wedge \cdots \wedge dx_n = \\
 &= (-1)^{n+nk+1} d \sum_{j=1}^k \frac{\partial a}{\partial x_j} dx_j \wedge dx_1 \wedge \cdots \wedge \hat{x}_j \wedge \cdots \wedge dx_k (-1)^{n+j-1+nk} = \\
 &= d \sum_{j=1}^k \frac{\partial a}{\partial x_j} dx_j \wedge dx_1 \wedge \cdots \wedge \hat{x}_j \wedge \cdots \wedge dx_k (-1)^j = \\
 &= - \sum_{j=1}^k \frac{\partial^2 a}{\partial x_j^2} dx_j \wedge dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k + \sum_{j=1}^k \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial x_j} dx_1 \wedge \cdots \wedge \hat{x}_j \wedge \cdots \wedge dx_k \wedge dx_i (-1)^{j+k-1}.
 \end{aligned}$$

Теперь

$$\begin{aligned}
 d^* da(x) dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k &= d^* \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial a}{\partial x_i} (-1)^k dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k \wedge dx_i = \\
 &= *d * (-1)^{n+n(k+1)+1} \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial a}{\partial x_i} (-1)^k dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k \wedge dx_i = \\
 &= (-1)^{nk} * d \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial a}{\partial x_i} dx_{k+1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx}_i \wedge \cdots \wedge dx_n (-1)^i = \\
 &= (-1)^{nk} * \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_i^2} dx_{k+1} \wedge \cdots \wedge dx_n (-1)^{k+1} + \\
 &+ s(-1)^{nk} \sum_{j=1}^k \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_j \partial x_i} dx_j \wedge dx_{k+1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx}_i \wedge \cdots \wedge dx_n (-1)^i = \\
 &= (-1)^{k(n-k)} (-1)^{+nk} (-1)^{k+1} \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_i^2} dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k + \\
 &+ (-1)^{nk} \sum_{j=1}^k \sum_{i=k+1}^n (-1)^i \frac{\partial^2 a}{\partial x_j \partial x_i} dx_1 \wedge \cdots \wedge \hat{dx}_j \wedge \cdots \wedge dx_k \wedge dx_i (-1)^{j-ik(n-k)} = \\
 &= - \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_i^2} dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k + \sum_{j=1}^k \sum_{i=k+1}^n \frac{\partial^2 a}{\partial x_j \partial x_i} dx_1 \wedge \cdots \wedge \hat{dx}_j \wedge \cdots \wedge dx_k \wedge dx_i (-1)^{j+k}.
 \end{aligned}$$

Теперь складываем

$$\mathcal{D}a(x) dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_n = -\Delta a dx_1 \wedge \cdots \wedge dx_k.$$

Теорема доказана.

Оператор Виттена

Вспомним, о чём шла речь. Пусть M — гладкое компактное ориентированное n -мерное многообразие. $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ — гладкая функция.

Рассмотрим

$$d_f = e^{-f/h} de^{f/h},$$
$$d_f^* = e^{f/h} d^* e^{-f/h}.$$

Обсудим свойства этих операторов. Во-первых,

$$d_f : \Omega^k \rightarrow \Omega^{k+1},$$
$$d_f^* : \Omega^k \rightarrow \Omega^{k-1},$$

и эти операторы сопряжены относительно скалярного произведения. Кроме того,

$$d_f d_f = 0, \quad d_f^* d_f^* = 0.$$

Рассмотрим

$$\ker d_f : \omega : e^{-f/h} de^{f/h} \omega = 0,$$
$$d(e^{f/h} \omega) = 0,$$

то

$$\ker d_f = e^{-f/h} Z_k.$$

Рассмотрим теперь

$$\text{Im } d_f : \omega = d_f \alpha = e^{-f/h} d(e^{f/h} \alpha),$$

то

$$\text{Im } d_f = e^{-f/h} B_k.$$

Из этого (?) следует, что

$$\ker d_f / \text{Im } d_f = \ker d / \text{Im } d = H^k(M).$$

Таким образом, мы как бы "подправили" операторы d и d^* нужным нам образом. Теперь "подправим" оператор \mathcal{D} .

Определение 17. Оператор Виттена

$$\hat{H} = \frac{h^2}{2} (d_f d_f^* + d_f^* d_f).$$

Обсудим свойства этого оператора.

Утверждение 11. (Свойства оператора Виттена)

1. $(\hat{H}\alpha, \beta) = (\alpha, \hat{H}\beta);$
2. $(\hat{H}\alpha, \alpha) \geq 0;$
3. $\hat{H}\alpha = 0 \iff \begin{cases} d_f \alpha = 0, \\ d_f^* \alpha = 0; \end{cases}$
4. $\ker \hat{H} \cong H^k(M).$

Доказательство. Доказательство пунктов 1-3 осуществляется совершенно аналогично предыдущему утверждению. Проведя аналогичные же действия для доказательства пункта 4, получим, что $\ker \hat{H}$ изоморфно $\ker d_f / \text{Im } d_f$.

Лекция 9

Представление оператора Виттена

Утверждение 12.

$$\hat{H} = \frac{h^2}{2}\mathcal{D} + \frac{1}{2}(df, df)_P + hR,$$

где R – тензорное поле.

Доказательство. Распишем

$$d_f \alpha = e^{-f/h} d(e^{h/f} \alpha) = \frac{1}{h} df \wedge \alpha + d\alpha.$$

Обозначим

$$k_f \alpha = df \wedge \alpha,$$

тогда

$$\begin{aligned} d_f &= \frac{1}{h} k_f + d, \\ d_f^* &= \frac{1}{h} k_f^* + d^*. \end{aligned}$$

Теперь распишем

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{h^2}{2} \left(\left(d + \frac{1}{h} k_f \right) \left(d^* + \frac{1}{h} k_f^* \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(d^* + \frac{1}{h} k_f^* \right) \left(d + \frac{1}{h} k_f \right) \right) = \\ &= \frac{h^2}{2}\mathcal{D} + \frac{1}{2} (k_f k_f^* + k_f^* k_f) + \frac{h}{2} (dk_f^* + k_f d^* + d * k_f + k_f^* d). \end{aligned}$$

Обозначим $k_i \alpha = dx_i \wedge \alpha$. Тогда

$$k_f = \sum_{i=1}^n \frac{\partial d}{\partial x_i} k_i,$$

$$k_f^* = \sum_{i=1}^n k_i^* \frac{\partial d}{\partial x_i}.$$

Подставим в верхнее и получим

$$\frac{1}{2} (k_f k_f^* + k_f^* k_f) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial d}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} (k_i k_j^* + k_j^* k_i).$$

Выясним, как действует k_j^* на форму $\alpha = dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}$.

Убедимся, что верно

$$k_j^* \alpha = \sum_{s=1}^k (-1)^{s-1} g^{j i_s} dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}.$$

Для этого докажем, что

$$(k_j^* \alpha, \beta) = (\alpha, k_j \beta),$$

где возьмем $\alpha = dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}$, $\beta = dx_{m_1} \wedge \cdots \wedge dx_{m_{k-1}}$.

Запишем

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^k (-1)^{s-1} g^{j i_s} \left(dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}, dx_{m_1} \wedge \cdots \wedge dx_{m_{k-1}} \right) = \\ = (dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}, dx_j \wedge dx_{m_1} \wedge \cdots \wedge dx_{m_{k-1}}). \end{aligned}$$

Заметим, что

$$(dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}, dx_j \wedge dx_{m_1} \wedge \cdots \wedge dx_{m_{k-1}}) = \det(g^{i_l, (j, m_p)}),$$

где $d^{ij} = (dx_i, dx_j)$, а индексы вверху – это просто условное обозначение для номе-ров, которые там могут быть.

Слева же записано разложение этой же матрицы $(g^{i_l, (j, m_p)})$ по строке/столбцу.

Убедились в справедливости выражения для k_j^* .

Вернемся к основному доказательству. Посчитаем

$$\begin{aligned} (k_i k_j^* + k_j^* k_i) dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} = \\ = \sum_{s=1}^k (-1)^{s-1} g^{j i_s} dx_i \wedge dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} + \\ g^{ji} dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} + \sum_{s=1}^k g^{j i_s} dx_i \wedge dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} (-1)^s = \\ g^{ji} dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$(k_i k_j^* + k_j^* k_i) = g^{ij}.$$

Значит,

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial d}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} (k_i k_j^* + k_j^* k_i) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n g^{ij} \frac{\partial d}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} = (d_f, d_f)_P.$$

Теперь проверим, что

$$R = \frac{1}{2} (dk_f^* + k_f d^* + d * k_f + k_f^* d).$$

Убедимся, что это оператор нулевого порядка. Введем оператор дифференцирования по локальной координате:

$$\partial_j a(x) dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} = \frac{\partial a}{\partial x_j} dx_j \wedge dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}$$

Вспомним, что

$$d(a(x) dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}) =$$

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial a}{\partial x_j} dx_j \wedge dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k},$$

тогда

$$d = \sum_{j=1}^n k_j \partial_j, \quad d^* = \sum_{j=1}^n \partial_j^* k_j^*.$$

Подставим:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (dk_f^* + k_f d^* + d * k_f + k_f^* d) = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} k_i \partial_j^* k_j^* + \frac{\partial f}{\partial x_i} k_i^* k_j \partial_j + \partial_j^* k_j^* \frac{\partial f}{\partial x_i} k_i + k_j \partial_j \frac{\partial f}{\partial x_i} k_i^* \right). \end{aligned}$$

Убедимся, что все слагаемые сократятся. Вспомним, что если

$$\alpha = a(x) dx_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k},$$

$$\beta = b(x) dx_{j_1} \wedge \cdots \wedge dx_{j_k},$$

то

$$(\alpha, \beta) = \int_M (\alpha, \beta)_P \Omega = \int_{\mathbb{R}^n} a(x) b(x) \det(g^{i_p, j_q}) \sqrt{g} dx.$$

Обозначим коэффициент

$$\det(g^{i_p, j_q}) \sqrt{g} = F(x).$$

Теперь вычислим

$$\begin{aligned} (\partial_j \alpha, \beta) &= \int_{\mathbb{R}^n} b(x) \frac{\partial a}{\partial x_j} F(x) dx = \\ &= - \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial b}{\partial x_j} a F dx - \int_{\mathbb{R}^n} ab \frac{\partial F}{\partial x_j} dx = \\ &= -(\alpha, \partial_j \beta) - (\alpha, A\beta), \end{aligned}$$

где A – алгебраический оператор. Таким образом, $\partial_j^* = \partial_j +$ оператор нулевого порядка.

Из-за первого порядка форм можем поменять k и ∂ в выражении.

$$R = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} (-k_i k_j^* + k_i^* k_j - k_j * j_i) \partial_j = 0.$$

Итак, утверждение доказано.

Нам понадобится явная форма для R в частном случае. Предположим, что в некоторой карте M метрика евклидова. Введем в этой карте

(x_1, \dots, x_n) – евклидовые координаты,

то $g_{ij} = \delta_{ij}$.

В таком случае

$$R = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \left(-\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} k_i^* k_j + \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} k_j k_i^* \right) =$$

$$= \{\text{переобозначим коэффициенты}\} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (k_j k_i^* + k_j^* k_i).$$

Локальная теорема об осцилляторном приближении

M – гладкое компактное ориентированное n -мерное многообразие;

$$f : M \rightarrow \mathbb{R}$$

– функция Морса;

Соорудим на M риманову метрику.

В окр. каждой кр.т. имеются локальные координаты (x_1, \dots, x_n) , т.ч. в окрестности точки

$$f = f(P_s) + \sum_{i=1}^n \epsilon_i x_i^2.$$

Введем метрику для каждой окрестности. Есть U_s – карта, введем метрику как

$$\hat{g}_{ij}(x) = \delta_{ij}.$$

Теперь продолжим на все многообразие.

Пусть помимо U_s , связанных с кр.т., есть еще карты V_p , в которых нет кр.т. Введем разбиение 1, которое связано с таким атласом:

$$\sum_s e_s + \sum_p e_p = 1.$$

На M введем какую-то риманову метрику \tilde{g}_{ij} . И построим интересующую нас риманову метрику как

$$g_{ij} = \sum_s e_s \hat{g}_{ij} + \sum_p e_p \tilde{g}_{ij}.$$

Пусть U – окрестность кр.т. P . В окрестности U

$$f = f(P) + \sum_{j=1}^n \epsilon_j x_j^2,$$

метрика $g_{ij} = \delta_{ij}$.

Возьмем $\alpha = a(x) dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}$. Заметим, что

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = 2\epsilon_j x_j, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = 2\epsilon_j \delta_{ij}.$$

В U оператор Виттена

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2} \Delta + \frac{1}{2} (4|x|^2) + h \sum_{j=1}^n \epsilon_j (k_j k_j^* - k_j^* k_j). \quad (12)$$

Обсудим возможность применения осциляторного приближения к оператору (12). Для каждой кр.т. можем рассмотреть оператор $-h^2/2\Delta + 1/2(4|x|^2)$. Собственные функции этого оператора имеют вид

$$h^{-n/4}f_n(x/\sqrt{h}), \quad f(y) \rightarrow 0, \quad |y| \rightarrow \infty,$$

а собственные значения

$$E_m = \sum_{j=1}^n h\omega_0(m_j + 1/2),$$

где $m = (m_1, \dots, m_n)$.

Рассмотрим формы, для которых

$$R(P)\alpha = \mu\alpha.$$

Соорудим форму

$$\omega = h^{-n/4}f_m\left(\frac{x}{\sqrt{h}}\right)e(x)\alpha,$$

где

$$e(x) = \begin{cases} 1, & |x| \leq \delta_1, \\ 0, & |x| \geq \delta_2. \end{cases}$$

Утверждение 13. (Локальная теорема об осциляторном приближении)

$$\hat{H}\omega = (\mathcal{E}_m + h\mu)\omega + o(h).$$

Доказательство. Рассмотрим в малой окрестности кр.т.

$$\begin{aligned} \hat{H}\omega &= \left(-\frac{h^2}{2}\Delta + \frac{1}{2}(4|x|^2) + hR\right)h^{-n/2}f_m\left(\frac{x}{\sqrt{h}}\right)\alpha = \\ &= E_mh^{-n/2}f_m\left(\frac{x}{\sqrt{h}}\right)\alpha + h(R(0) + R(x) - R(0))\omega = \\ &= E_m\omega + h\mu\omega + h(R(x) - R(0))h^{-n/4}f_m\left(\frac{x}{\sqrt{h}}\right)\alpha. \end{aligned}$$

Вспомним, что если некоторая ф-я $q = |x|^s\tilde{q}(x)$, то

$$qh^{-n/2}f_m(x/\sqrt{h}) = O(h^{s/2}).$$

В нашем случае это $R(x) - R(0)$.

Таким образом,

$$\hat{H}\omega = (E_m + h\mu)\omega + O(h^{3/2}).$$

Утверждение доказано.

Глобальная теорема об осциляторном приближении

В окрестности каждой кр.т. запишем с.зн.

$$E_m^{(s)} = \sum_{j=1}^n h \omega_0^{(s)} (m_j^{(s)} + 1/2),$$

где s – номер критической точки. Упорядочим их по возрастанию с учетом кратности и обозначим $\mathcal{E}^{(j)}$.

Теорема 5. (*Глобальная теорема об осциляторном приближении*)

Пусть λ_j – с.зн. \hat{H} , упорядоченные по возрастанию с учетом кратности.
Тогда

$$\forall M \in \mathcal{N} \lambda_j = \mathcal{E}^{(j)} + o(h), \quad j = 1, \dots, M.$$

Лекция 10

Доказательство слабого неравенства Морса

M - гладкое компактное ориентированное n -мерное многообразие;

$f : M \rightarrow \mathbb{R}$ – функция Морса;

g_{ij} – метрика.

Построили оператор \hat{H} , причем

$$\ker \hat{H} \text{ на } \Omega^k \cong H^k(M).$$

Доказали локальную теорему об осциляторном приближении. Она говорит о том, что в окрестность \forall кр.т. P есть

$$\hat{H}_0 = \frac{h^2}{2} \mathcal{D} + \frac{1}{2} (df, df) + hR(P).$$

Соответствующая запись в координатах

$$\hat{H}_0 = \frac{h^2}{2} \Delta + \frac{1}{2} (4|x|^2) + hR(P),$$

а $\omega_0^2 = 4$ – собственные числа матрицы $(4|x|^2)$. Собственные значения оператора имеют вид

$$\sum_{j=1}^n h\omega_j(m_j + 1/2) + h\mu = \sum_{j=1}^n h\omega_j(1 + 2m_j) + h\mu.$$

Обозначим их через $\mathcal{E}^{(j)}$.

Для $\forall M \in \mathbb{N}$

$$\lambda_j - \mathcal{E}^{(j)} = o(h).$$

Нам осталось посчитать μ – с.зн. оператор $R(P)$. В евклидовых координатах

$$R = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (k_i k_j^* - k_j^* k_i).$$

Вспомним, что

$$f = f(P) + \sum_{j=1}^n \epsilon_j x_j^2.$$

Матрица вторых производных диагональная с элементами $2\epsilon_j$. Значит,

$$R = \sum_{j=1}^n \epsilon_j (k_i k_j^* - k_j^* k_i).$$

Перенумеруем слагаемые так, чтобы

$$\epsilon_j = \begin{cases} -1, & j = 1, \dots, m, \\ 1, & j = m + 1, \dots, n. \end{cases}$$

Нам нужно посчитать с.зн. $R(0)$.

Посмотрим, как R действует на базисную форму

$$\alpha = x_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}.$$

Вспомним, что

$$k_j \alpha = dx_j \wedge \alpha,$$

$$k_j^* \alpha = \sum_{s=1}^k (-1)^{s-1} g^{j i_s} x_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}.$$

Т.к. метрика евклидова,

$$k_j^* \alpha = \begin{cases} 0, & j \notin I = (i_1, \dots, i_k), \\ (-1)^{s-1} g^{j i_s} x_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k}, & j = i_s. \end{cases}$$

Вычислим

$$(k_i k_j^* - k_j^* k_i) \alpha = \begin{cases} -\alpha, & j \notin (i_1, \dots, i_k), \\ \alpha, & j \notin (i_1, \dots, i_k). \end{cases}$$

Вторая строчка следует из того, что при $j = i_s$

$$\begin{aligned} k_j k_j^* \alpha &= dx_{i_s} \wedge x_{i_1} \wedge \cdots \wedge \hat{dx_{i_s}} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} (-1)^{s-1} = \\ &= x_{i_1} \wedge \cdots \wedge dx_{i_k} \end{aligned}$$

Значит, R диагональный (любая базисная форма умножается на 1 или -1).
Обозначим, помимо $I, J = (1, \dots, m)$.

$$R\alpha = \mu\alpha,$$

$$\mu = -\#I \cap J - \#\bar{I} \cap \bar{J} + \#I \cap \bar{J} + \#\bar{I} \cap J.$$

Вернемся к

$$\mathcal{E} = \sum_{j=1}^n h(1 + 2m_j) + h\mu.$$

Эти с.ч. будут минимальны, когда 1) все $m_j = 0$, 2) $I = J$. В этом случае

$$\mathcal{E} = hn - hn = 0.$$

Таких с.ч. столько, сколько критических точек индекса k .

Так, мы доказали *слабое неравенство Морса* о том, что

$$m_k \geq b_k.$$

Доказательство теоремы Морса об индексах

Само неравенство, напомним, выглядит как

$$\sum_{j=0}^k (-1)^{k=j} m_j \geq \sum_{j=0}^k (-1)^{k-j} b_j,$$

а теорема Морса об индексе

$$\sum_{k=0}^n (-1)^k m_k = \sum_{k=0}^n (-1)^k b_k.$$

Нам понадобится дополнительное соображение. Обозначим

$$\Omega = \bigoplus_{k=0}^n \Omega^k.$$

Рассмотрим оператор

$$T : \Omega \rightarrow \Omega, \quad T = \frac{h}{\sqrt{2}} (d_f + d_f^*).$$

Если возведем в квадрат,

$$T^2 = \frac{h^2}{2} (d_f + d_f^*)(d_f + d_f^*) = \frac{h^2}{2} (d_f d_f^* + d_f^* d_f) = \hat{H}.$$

Отсюда следует, что

$$[T, \hat{H}] = 0.$$

Обозначим

$$\Omega^+ = \bigoplus_{k=\text{четные}}^n \Omega^k,$$

$$\Omega^- = \bigoplus_{k=\text{нечетные}}^n \Omega^k.$$

Из определения T очевидно, что

$$T : \Omega^+ \rightarrow \Omega^-, \quad T : \Omega^- \rightarrow \Omega^+.$$

В пространстве k -форм у \hat{H}

b_k нулевых с.з.,

$m_k - \text{число с.з.} = o(h)$,

$m_k - b_k - \text{число с.з. (малых)} > 0, o(h)$.

Обозначим M_k – собственное подпространство, отвечающее малым числам ³⁰.

$$T : M_k \rightarrow M_{k-1} \oplus M_{k+1}.$$

Обозначим

$$M^+ = \bigoplus_{k=\text{четные}}^n M^k,$$

$$M^- = \bigoplus_{k=\text{нечетные}}^n M^k.$$

³⁰Заметим, что на них \hat{H} не имеет ядра.

Тогда

$$T : M^+ \rightarrow M^-, \quad T : M^- \rightarrow M^+.$$

Отсюда следует, что эти два пространства изоморфны,

$$\dim M^+ = \dim M^-.$$

$$\dim M^+ = m_0 - b_0 + m_2 - b_2 + \dots,$$

$$\dim M^+ = m_1 - b_1 + m_3 - b_3 + \dots.$$

Отсюда и следует теорема Морса об индексе.

Доказательство сильного неравенства Морса

Осталось доказать сильное неравенство Морса.

Пусть k – четное. Рассмотрим

$$M_k^+ = M_0 \oplus M_1 \oplus \dots \oplus M_k,$$

$$M_k^- = M_1 \oplus M_3 \oplus \dots \oplus M_{k+1}.$$

Очевидно, что

$$T : M_k^+ \rightarrow M_k^-.$$

Так как на этих подпространствах у T нет ядра,

$$\begin{aligned} m_0 - b_0 + m_2 - b_2 + \dots + m_k - b_k &\leq \\ &\leq m_1 - b_1 + m_3 - b_3 + \dots + m_{k+1} - b_{k+1}. \end{aligned}$$

$$m_{k+1} - m_k + \dots + m_1 - m_0 \geq b_{k+1} - b_k + \dots + b_1 - b_0,$$

а это строгое неравенство Морса для $k+1$, то есть для нечетных номеров. Доказательство для четных номеров аналогично. Теоремы доказаны.

Заключение

Вспомним, на чем основано осциляторное приближение. Есть оператор Шрёдингера

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x),$$

а x_0 – точка минимума $V(x)$.

Тогда каждой такой x_0 можем поставить в соответствие некоторую серию с.з. оператора \hat{H} .

$$E_m = \sum_{j=1}^n \hbar\omega_j(m_j + 1/2).$$

Что такое точка минимума с точки зрения классической динамики? Классическая ф-я Гамильтона

$$H(x, p) = \frac{1}{2}|p|^2 + V(x).$$

Система Гамильтона

$$\begin{cases} \ddot{x} = p, \\ \ddot{p} = -\frac{\partial V}{\partial x}. \end{cases}$$

(x_0, p) – точка равновесия этой системы.

Теорема об осциляторном приближении – это что каждому x_0 можем сопоставить собственные числа \hat{H} , т.е. E_m .

В квантовой физике имеется техника, довольно далеко обобщающая эти простые соображения об осциляторном приближении.

Рассмотрим вместо положения равновесия

γ – периодическую траекторию системы Гамильтона.

Это замкнутая кривая в фазовом пространстве.

Можно модифицировать теорему об осциляторном приближении так, чтобы сопоставлять наборы собственных чисел \hat{H} траектории γ . Они будут сосредотачиваться вдоль проекции этой кривой на x .



МЕХАНИКО-
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ