

1. Постановка задачи

1.1. Напоминания

1.1.1. КЛАССИЧЕСКИЕ ГАМИЛЬТОНОВЫ СИСТЕМЫ

Мы рассматриваем квантование классических систем. Состояния системы это точки (x, p) фазового пространства \mathbb{R}^{2n} . Наблюдаемые это функции $f(x, p)$. Для того, чтобы определить динамику точки, вводится функция Гамильтона $H(x, p)$. Динамика системы описывается уравнениями Гамильтона:

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} = \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (1)$$

Альтернативный подход заключается в том, что мы рассматриваем кососимметрическую 2-форму

$$\omega = \sum_{j=1}^n dp_j \wedge dq_j. \quad (2)$$

Тогда всякая функция f порождает так называемое гамильтоново поле v_f , которое определяется из уравнения

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

Таким образом, имеется соответствие $f \mapsto v_f$. Заметим, что

$$v_f = \left(\frac{\partial f}{\partial p}; -\frac{\partial f}{\partial x} \right), \quad (4)$$

поэтому для гамильтоновой системы с гамильтонианом H имеем

$$\dot{y} = v_H(y), \quad y \in \mathbb{R}^{2n}. \quad (5)$$

Скобка Пуассона в этих терминах записывается так:

$$\{f, g\} = \sum (f_{p_j} g_{x_j} - f_{x_j} g_{p_j}) = \omega(v_f, v_g) = \partial_{v_f}(g). \quad (6)$$

Здесь ∂_{v_f} — производная вдоль векторного поля v_f .

1.1.2. КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

При переходе к квантовой системе мы заменяем состояния на функции $\psi(x)$, наблюдаемыми становятся операторы, которые получаются из функций $f(x, p)$ заменой p на $i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Мы будем предполагать, что f является многочленом по обоим переменным (на самом деле сначала можно ограничиться требованием для f быть многочленом только по переменной p , но потом всё равно придётся его усилить):

$$f(x, p) = \sum f_m(x) p^m. \quad (7)$$

Здесь m — мультииндекс: $m = (m_1, \dots, m_n)$, так что запись p^m следует понимать как $p_1^{m_1} \dots p_n^{m_n}$. Далее нам часто будет нужно обозначение $|m| := m_1 + \dots + m_n$. Здесь $f_m(x)$ — многочлены, а

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^m := (-i\hbar)^{|m|} \frac{\partial^{m_1}}{\partial x_1^{m_1}} \dots \frac{\partial^{m_n}}{\partial x_n^{m_n}}. \quad (8)$$

Посмотрим, что будет, если применять такой оператор к функции, зависящей от x . Поскольку оператор дифференцирования по x совершенно не обязан коммутировать с умножением на x , оказывается, что совершенно небезразлично, что делать сначала: умножать на функцию f_m , а потом дифференцировать, или наоборот. Чтобы избежать этой несимметричности, применяется «симметризация», называемая оператором Вейля:

$$fu = \sum \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^m f_m \left(\frac{x+y}{2} \right) u(x) \Big|_{y=x}. \quad (9)$$

Динамика квантовой системы описывается уравнением Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (10)$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона.

Итак, в классической системе у нас было поточечное умножение функций (наблюдаемых), относительно которого множество наблюдаемых, естественно, образовывало коммутативную алгебру. Кроме того, относительно скобки Пуассона это множество образует алгебру Ли.

Что касается квантовых систем, то здесь уже относительно умножения наблюдаемые (операторы) образуют, вообще говоря, некоммутативную алгебру, и, кроме того, относительно квантовой скобки Пуассона

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_{\text{кв.}} := \frac{i}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}] \quad (11)$$

они образуют алгебру Ли. Здесь квадратные скобки обозначаю обычный операторный коммутатор $[A, B] := AB - BA$.

Имеют место равенства, которые мы не будем доказывать, потому что мы уже потратили на это время в предыдущем семестре.

$$\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f} + O(\hbar), \quad (12)$$

$$\{\hat{f}, \hat{g}\}_{\text{кв.}} = \widehat{\{f, g\}} + O(\hbar). \quad (13)$$

Мы видим, что в квазиклассическом пределе, то есть при $\hbar \rightarrow 0$, соотношения фактически превращаются в то, что мы имеем в классическом случае.

1.2. Чего мы хотим добиться

Мы рассматриваем квантовую систему, в которой в качестве оператора Шрёдингера берется вейлевский оператор, построенный по классическому гамильтониану H . Нас интересуют стационарные состояния, то есть состояния, удовлетворяющие уравнению

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (14)$$

Иначе говоря, нас интересует спектр оператора Гамильтона. В общем случае задача не может быть решена даже для простейшего оператора

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x), \quad (15)$$

поэтому нас будут интересовать некоторые общие свойства, которые проявляются в квазиклассическом пределе (то есть при $\hbar \rightarrow 0$). В одномерном случае мы получим формулу, которая асимптотически задает собственные функции оператора Шрёдингера. Оказывается, что в многомерной задаче возникают нетривиальные связи с симплектической геометрией (чего в принципе можно было ожидать, потому что с ней связана исходная гамильтонова система).

2. Одномерный случай

2.1. Вид решений

Поскольку нас интересует поведение собственных чисел оператора Шрёдингера в квазиклассическом пределе, естественно искать собственные числа и собственные функции оператора в виде рядов по степеням параметра \hbar .

Наивный подход — искать собственные функции и собственные числа в виде $E = E_0 + \hbar E_1 + \dots$, $\psi = \psi_0 + \hbar \psi_1 + \dots$ результата не даст. Действительно, подставим эти разложения в равенство

$$-\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V(x)\psi = E\psi. \quad (1)$$

Получим, приравнивая члены одного порядка малости, что $\psi = 0$. Почему этот подход не дает результата тоже ясно: для уравнения

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

решения известны: $\psi = C_1 e^{\frac{ipx}{\hbar}} + C_2 e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$, и предела при $\hbar \rightarrow 0$ у них нет. Другой пример, в котором удастся найти спектр оператора Шрёдингера — квантовый осциллятор. Для оператора $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \frac{1}{2}\omega^2 x^2$ собственные функции имеют вид

$$\psi_i = p_i\left(\frac{x}{\sqrt{\hbar}}\right)e^{-\frac{\omega x^2}{2\hbar}}. \quad (3)$$

Вид собственных функций для свободной частицы и квантового осциллятора подсказывают, в каком виде можно пытаться искать решения. Будем считать, что $\psi(x) = e^{\frac{is(x)}{h}} \varphi(x, h)$. Здесь $\varphi(x, h)$ — гладкая функция, то есть вся сингулярность сосредоточена в экспоненте. Собственные числа оператора будем искать в виде $E = E_0 + hE_1 + \dots$, где E_i могут, вообще говоря, зависеть от h , но всегда ограничены.

2.2. Формула коммутации вейлевского оператора с экспонентой

В дальнейшем нам не раз понадобится выражение для действия вейлевского оператора, построенного по функции H на функции вида

$$u(x) = e^{\frac{is(x)}{h}} v(x). \quad (4)$$

Лемма 2.1 (о действии вейлевского оператора на экспоненте).

$$\hat{H} e^{\frac{is(x)}{h}} v(x) = e^{\frac{is}{h}} \left(H v - i h \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{i h}{2} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial x} \right) v + O(h^2) \right) \quad (5)$$

здесь в качестве аргументов в функцию H и ее производные подставлены x и $\frac{\partial s}{\partial x}$, то есть $H = H(x, \frac{\partial s}{\partial x})$.

2.3. Условия на собственные функции

Итак, мы хотим найти собственные функции оператора \hat{H} в виде

$$\psi(x) = e^{\frac{is}{h}} \varphi(x, h). \quad (6)$$

Подставляем вместо $\hat{H}\psi$ выражение из предыдущей леммы (раскладывая φ в ряд по h), а вместо E ряд по степеням h и приравниваем коэффициенты при h^0 и h . Получаем уравнения

$$H \left(x, \frac{\partial s}{\partial x} \right) \varphi_0 e^{\frac{is}{h}} = E_0 \varphi_0 e^{\frac{is}{h}} \quad (7)$$

$$e^{\frac{is}{h}} \left(H \varphi_1 - i \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} - \frac{i}{2} (H_{pp} S_{xx} + H_{xp}) \varphi_0 \right) = (E_0 \varphi_1 + E_1 \varphi_0) e^{\frac{is}{h}}. \quad (8)$$

Эти уравнения эквивалентны следующей системе:

$$H \left(x, \frac{\partial s}{\partial x} \right) = E_0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} + \frac{1}{2} (H_{pp} S_{xx} + H_{xp}) \varphi_0 = i E_1 \varphi_0 \quad (10)$$

Первое из этих уравнений обычно называют уравнением Гамильтона-Якоби.

Из приведенных выше выкладок вытекает следующее

Утверждение 2.2. Пусть существуют $E_0, E_1, \varphi_0, \varphi_1$ такие, что выполнены равенства (9), (10). Тогда пара $\psi = e^{\frac{is}{h}} \varphi_0, E = E_0 + hE_1$ удовлетворяют уравнению

$$\hat{H}\psi = E\psi + O(h^2). \quad (11)$$

Остановимся подробнее на уравнении (9) на функцию s . Если это уравнение выполнено, то условие $p = \frac{\partial s}{\partial x}$ эквивалентно условию $H(x, p) = E_0$. Рассмотрим кривую Λ , задаваемую вторым условием. Наложим дополнительно два ограничения:

- 1) $\Lambda: H(x, p) = E_0$ не имеет особых точек
- 2) Проекция $\pi_x: \Lambda \rightarrow \mathbb{R}_x$ задает взаимно однозначное отображение.

Второе условие накладывает весьма существенное ограничение. Это условие не выполнено даже для простейшего гамильтониана $H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x^2$. Но сейчас нам будет достаточно, чтобы это условие выполнялось локально, а в дальнейшем мы научимся справляться и с ситуацией, когда проекция на ось x неоднозначна.

Определим $s(x)$ (локально) как интеграл

$$s(x) = \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx|_{\alpha=\pi_x^{-1}}. \quad (12)$$

Преобразуем теперь уравнение (10), разрешая его относительно φ_0 :

$$\frac{\varphi'_0}{\varphi_0} = \frac{-\frac{1}{2}(H_{pp}s_{xx} + H_{xp}) + iE_1}{H_p} \quad (13)$$

Напомним, что в качестве аргумента p в функцию H и ее производные подставляется $\frac{\partial s}{\partial x}$. Знаменатель в этом выражении не обращается в ноль, поскольку $H_p = 0$ означает, что касательная к кривой Λ вертикальна, что противоречит тому, что проекция Λ на ось x однозначна. Последнее уравнение можно проинтегрировать:

$$\varphi_0 = C \exp \int \frac{-\frac{1}{2}(H_{pp}s_{xx} + H_{xp}) + iE_1}{H_p} dx \quad (14)$$

Преобразуем подынтегральное выражение. Известно, что уравнение $H(x, p) = E_0$ задает траекторию гамильтоновой системы

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (15)$$

$$\dot{p} = \frac{\partial H}{\partial x}. \quad (16)$$

На Λ можно ввести координату t — время движения по траектории гамильтоновой системы. Получим на Λ две 1-формы: dt и $dx = \pi^* dx$. Λ одномерна, значит можно рассмотреть отношение форм $\frac{dx}{dt}$. Из уравнений Гамильтона получаем

$$\frac{dx}{dt} = H_p \left(x, \frac{\partial s}{\partial x} \right). \quad (17)$$

Дифференцируя по x получаем

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dx}{dt} \right) = H_{pp}s_{xx} + H_{px}. \quad (18)$$

Подставим полученное соотношение в выражение для φ_0 и получим

$$\varphi_0 = C e^{iE_1 t} \exp \left(-\frac{1}{2} \int \frac{\partial}{\partial x} \frac{dx}{dt} dt \right) = C e^{iE_1 t} \exp \left(-\frac{1}{2} \int \frac{\frac{\partial}{\partial x} \frac{dx}{dt}}{\frac{dx}{dt}} dx \right). \quad (19)$$

Откуда

$$\varphi_0 = e^{iE_1 t} e^{-\frac{1}{2} \ln \left| \frac{dx}{dt} \right|} = C e^{iE_1 t} \left| \frac{dt}{dx} \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (20)$$

2.4. Пример

В этом разделе рассмотрен пример применения развитой нами техники для конкретной задачи. Рассмотрим систему с гамильтонианом $H(x, p) = \frac{1}{2}p^2 + V(x)$. Будем считать, что $V(x) = 0$ на некотором отрезке $[a, b]$. Интересующее нас уравнение Шредингера в этом случае имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V(x)\psi = E\psi. \quad (21)$$

В предыдущем семестре было показано, что для любого значения энергии $E > 0$ решение есть. Интерес представляет вид оператора монодромии.

Оператор монодромии описывает, как меняется ψ -функция частицы при прохождении через потенциальный барьер.

В базисе (e^{ikx}, e^{-ikx}) оператор монодромии имеет вид

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Физический смысл имеют не сами коэффициенты оператора монодромии а величины $t = \frac{1}{\alpha}$ и $r = \frac{\bar{\beta}}{\alpha}$, называемые коэффициентами прохождения (transition) и отражения (reflection).

Рассмотрим кривую $\Lambda: \frac{1}{2}p^2 + V(x) = E$. Пусть $E > \max V(x)$. В этом случае кривая Λ состоит из двух частей, каждая из которых однозначно проектируется на ось x . В этом случае можно воспользоваться изложенной выше конструкцией и получить решение.

Рассмотрим кривую $p = \sqrt{2(E - V(x))}$. Для функции s получаем выражение

$$s(x) = \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx = \int_{x_0}^x \sqrt{2(E - V(x'))} dx'. \quad (23)$$

E_1 в этом случае можно выбрать равным 0. Остается найти $\frac{dt}{dx}$. Имеем

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = p = \sqrt{2(E - V(x))}, \quad (24)$$

откуда

$$\left| \frac{dt}{dx} \right|^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt[4]{2(E - V(x))}}. \quad (25)$$

Функция ψ имеет вид

$$\psi(x) = C \frac{\exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2(E - V(x'))} dx'}{\sqrt[4]{2(E - V(x))}}. \quad (26)$$

Потребуем, чтобы левее точки a решение имело вид e^{ikx} . В этой области $V(x) = 0$, и для константы C получаем равенство

$$C = e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2E} x_0 \sqrt[4]{2E}}. \quad (27)$$

Получаем

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2E} x_0} \frac{\sqrt[4]{2E}}{\sqrt[4]{2(E - V(x))}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2(E - V(x'))} dx' \right) \quad (28)$$

Нас интересует вид функции ψ правее точки b . В этом случае $\frac{\sqrt[4]{2E}}{\sqrt[4]{2(E - V(x))}} = 1$, а интеграл в экспоненте разбивается на три части:

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2E} x_0} \exp \frac{i}{\hbar} \left(\sqrt{2E}(a - x_0) + \int_a^b \sqrt{2(E - V(x'))} dx' + \sqrt{2E}(x - b) \right) \quad (29)$$

Получаем

$$\psi(x) = e^{ikx} \exp \frac{i}{\hbar} \left(\int_a^b \sqrt{2(E - V(x'))} dx' - \sqrt{2E}(b - a) \right) = e^{ikx} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (\sqrt{2(E - V(x))} - \sqrt{2E})}. \quad (30)$$

Замена пределов интегрирования возможна потому, что вне отрезка $[a, b]$ подынтегральное выражение равно 0. Итак, мы получили, что коэффициент отражения равен нулю (слагаемого с e^{-ikx} нет), а коэффициент прохож-

дения равен $e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (\sqrt{2(E - V(x))} - \sqrt{2E})}$. Модуль коэффициента прохождения можно трактовать как вероятность того, что частица преодолет потенциальный барьер. Полученный нами результат означает, что если энергия частицы больше, чем максимум $V(x)$, частица никогда не отражается от потенциального барьера.

2.5. Предканонический оператор

Пусть U — локальная карта на кривой $\Lambda: H(x, p) = E_0$, в которой эта кривая не имеет вертикальных касательных. Зафиксируем точку $\alpha_0 \in U$.

Определение. Оператор $K_U: C_0^\infty(U) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}_x)$, определенный формулой

$$K_U[u] = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx \right) \left| \frac{dt}{dx} \right|^{1/2} u \Big|_{\alpha=\pi_x^{-1}(x)}. \quad (31)$$

называется предканоническим оператором, соответствующим области U .

Можно рассмотреть два гильбертовых пространства:

- 1) $L^2(\Lambda)$, со скалярным произведением $(u, v) = \int_{\Lambda} u(t)\bar{v}(t)dt$ (t -время движения по траектории соответствующей системы)
- 2) $L^2(\mathbb{R}_x)$, со скалярным произведением $(u, v) = \int_{\mathbb{R}} u(x)\bar{v}(x)dx$

Утверждение 2.3. Оператор K унитарен, то есть $(K_U u, K_U v) = (u, v)$.

Заметим, что выражение для собственной функции оператора Шредингера ψ может быть переписано в виде

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{h} \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx\right) \left|\frac{dt}{dx}\right|^{1/2} e^{iE_1 t} = K_U[e^{iE_1 t}]. \quad (32)$$

Нас интересует, что будет если применить оператор Шредингера к функции $K_U[x]$.

Утверждение 2.4.

$$\hat{H}K_U[u] = K_U(H|_{\Lambda}u - ih\frac{du}{dt} + O(h^2))$$

здесь значение H на кривой Λ — константа E_0 , а производную $\frac{du}{dt}$ нужно понимать как производную вдоль траектории соответствующей гамильтоновой системы.

2.6. Переход из координатного представления в импульсное

Остается вопрос, как определить предканонический оператор, если кривая Λ имеет вертикальную касательную. В тех точках, в которых нет однозначной проекции на ось x всегда есть однозначная проекция на ось p . Попробуем использовать это для построения оператора. Для этого нам понадобится процедура, которая называется *переходом в импульсное представление*.

Определение. h -преобразованием Фурье F называется оператор, действующий на функции $u(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ по формуле

$$Fu = \frac{1}{\sqrt{2\pi i h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{ipx}{h}} u(x) dx. \quad (33)$$

Определение. Обратным h -преобразованием Фурье F^{-1} называется оператор, действующий на функции $u(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ по формуле

$$F^{-1}v = \frac{1}{\sqrt{-2\pi i h}} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{ipx}{h}} v(p) dp. \quad (34)$$

Операторы F и F^{-1} обладают следующими свойствами:

- 1) Операторы F и F^{-1} продолжаются до унитарных операторов в L^2 (теорема Планшереля).
- 2) $FF^{-1} = F^{-1}F = id$
- 3) $-ih\frac{\partial}{\partial x}F^{-1} = F^{-1}p$, $xF^{-1} = F^{-1}(ih\frac{\partial}{\partial p})$, $ih\frac{\partial}{\partial p}F = Fx$, $pF = F(-ih\frac{\partial}{\partial x})$.

До сих пор, переходя от классической механики к квантовой мы действовали так: оставляли координату x , а p заменяли на дифференцирование по переменной x . Такой подход называется координатным представлением. h -преобразование Фурье позволяет перейти ко взгляду «наоборот». Будем считать, что функция f является полиномом и по переменной x и по переменной p , то есть справедливы представления

$$f = \sum_0^m f_i(x)p^k, \quad f = \sum_0^n \varphi_j(p)x^i.$$

Определим два оператора: обычный оператор Вейля

$$\hat{f}_x u(x) = \sum_{k=1}^m \left(-ih\frac{\partial}{\partial x}\right)^k f_k\left(\frac{x+y}{2}\right) u(x) \quad (35)$$

и оператор

$$\hat{f}_p v(p) = \sum_{k=1}^m \left(ih\frac{\partial}{\partial p}\right)^k \varphi_k\left(\frac{x+y}{2}\right) \quad (36)$$

Для оператора \hat{f}_p справедливы те же свойства, что и для оператора \hat{f}_x :

- 1) $\widehat{\hat{f}_p \hat{g}_p} = (\widehat{fg})_p + o(h)$,
- 2) $[\hat{f}_p, \hat{g}_p] = -ih\widehat{\{f, g\}}_p + o(h^2)$,

$$3) \hat{x}f_p = \widehat{(xf)}_p + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial f}{\partial p}.$$

Эти свойства доказываются так же, как для оператора Вейля.

Утверждение 2.5. Для любой функции $v(p) \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ имеет место равенство

$$F\hat{f}_x F^{-1}v = \hat{f}_p v. \quad (37)$$

2.7. Предканонический оператор для областей с вертикальной касательной

Наша цель в этом разделе состоит в том, чтобы построить аналог предканонического оператора для тех карт на Λ , в которых касательная вертикальна. Будем искать решение уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (38)$$

в виде $\psi = F^{-1}v$, а функцию v будем искать в виде $v = e^{\frac{i\sigma(p)}{\hbar}}w(p)$. Подставляя функцию ψ в уравнение Шрёдингера получаем аналог уравнений (9) и (10):

$$H\left(-\frac{\partial\sigma}{\partial p}, p\right) = E_0 \quad (39)$$

$$-\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{2}(H_{pp}\sigma_{xx} - H_{xp})w = iE_1 w \quad (40)$$

Пусть кривая Λ задается уравнением $x = x(p)$. Тогда получаем для σ выражение

$$\sigma = -\int_{p_0}^p x(p)dp = -\int_{\alpha_0}^{\alpha} xdp|_{\alpha=\pi_p^{-1}(p)} = -x(\alpha)p(\alpha) + \int_{\alpha_0}^{\alpha} xdp|_{\alpha=\pi_p^{-1}(p)}. \quad (41)$$

В последнем равенстве не хватает еще одного слагаемого: $p(\alpha_0)x(\alpha_0)$, но функция σ определена с точностью до константы. Проводя в точности те же рассуждения, что и для случая, когда Λ проектировалась на ось x получаем для w представление

$$w = C \left| \frac{dt}{dp} \right| e^{iE_1 t}. \quad (42)$$

Получаем утверждение, аналогичное (2.2):

Утверждение 2.6. Пусть в некоторой области U кривой Λ нет точек с горизонтальной касательной. Тогда функция

$$v(p) = C e^{iE_1 t} \left| \frac{dt}{dp} \right|^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left(-x(\alpha)p(\alpha) + \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx \right) \Big|_{\alpha=\pi_p^{-1}(p)} \quad (43)$$

удовлетворяет уравнению

$$\hat{H}_p v = (E_0 + \hbar E_1)v + O(\hbar^2) \quad (44)$$

в области $\pi_p(U)$.

Замечание. Мы не можем определить $\psi = F^{-1}[v]$, потому что для этого нужно определить v на всей прямой, а приведенное утверждение имеет локальный характер.

2.8. Формула стационарной фазы

В следующем параграфе нам потребуется некоторое утверждение из математического анализа, называемое обычно формулой стационарной фазы. Эта формула описывает асимптотику интеграла

$$I(\hbar) = \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{i\Phi}{\hbar}\right) q(p) dp \quad (45)$$

при $\hbar \rightarrow 0$.

Лемма 2.7 (Формула стационарной фазы).

1) Пусть $\Phi'(p) \neq 0$ на $\text{supp } q$. Тогда $I(\hbar) = o(\hbar^N) \quad \forall N$.

2) Пусть у Φ ровно одна критическая точка p_0 на $\text{supp } q$, причем $\Phi''(p_0) \neq 0$. Тогда

$$I(\hbar) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\varphi(p_0) + \frac{i\pi}{4} \text{sgn } \Phi''(p_0)\right) \frac{1}{\sqrt{|\Phi''(p_0)|}} (q(p_0) + O(\hbar)) \quad (46)$$

2.9. Сшивание предканонических операторов. Условие квантования

Наш дальнейший план — научиться так выбирать предканонические операторы в разных областях, чтобы они были согласованы друг с другом. Рассмотрим области U и V такие, что в области U у кривой Λ нет вертикальных касательных, а в области V — горизонтальных. Для функций, носитель которых сосредоточен в пересечении этих областей можно определить два оператора:

$$K_U[\varphi] = \exp\left(\frac{i}{h} \int_{\alpha_1}^{\alpha} p dx\right) \left|\frac{dt}{dx}\right|^{1/2} \varphi \quad (47)$$

$$K_V[\varphi] = F^{-1} \left[\exp\left[\frac{i}{h} \left(-x(\alpha)p(\alpha) - \int_{\alpha_2}^{\alpha} p dx\right)\right] \left|\frac{dt}{dp}\right| \varphi \right] \quad (48)$$

Утверждение 2.8. $K_V = e^{iC} K_U + o(h)$, $C = -\frac{1}{h} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} p dx - \frac{\pi}{2} \mu_{UV}$, где $\mu_{UV} = \begin{cases} -1, & \text{если } \frac{\partial x}{\partial p} < 0 \\ 0 & \text{если } \frac{\partial x}{\partial p} > 0 \end{cases}$.

Для доказательства этого утверждения запишем выражение для K_V и применим формулу стационарной фазы.

$$K_V[\varphi] = \frac{1}{\sqrt{-2\pi i h}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{ipx}{h} - \frac{i}{h} \left(x(\alpha)p(\alpha) + \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx\right)\right) \left|\frac{dt}{dp}\right|^{1/2} \varphi(\alpha) dp. \quad (49)$$

Остается сделать завершающий шаг. Рассмотрим на кривой Λ атлас, состоящий из карт U_1, \dots, U_n . Будем считать, что в каждой карте нет либо вертикальных, либо горизонтальных касательных. Предположим также, что каждая карта пересекается только с предыдущей и следующей. В каждой карте зафиксируем точку α_i . Теперь мы можем определить оператор K_i одной из двух формул:

$$K_i = e^{ic_i} \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{h} \int_{\alpha_i}^{\alpha} p dx\right) \left|\frac{dt}{dx}\right|^{1/2} \varphi \\ F^{-1} \left[e^{\frac{i}{h} \left(-x(\alpha)p(\alpha) - \int_{\alpha_i}^{\alpha} p dx\right)} \left|\frac{dt}{dp}\right| \varphi \right] \end{cases} \quad (50)$$

Константы c_i будем выбирать так, чтобы на пересечении $U_i \cap U_j$ операторы K_i и K_j совпадали. Здесь и далее равенство операторов понимается как равенство с точностью до $O(h^2)$. Обозначим

$$q_{jj+1} = c_j - c_{j+1} = -\frac{1}{h} \int_{\alpha_j}^{\alpha_{j+1}} p dx - \frac{\pi}{2} \mu_{j,j+1}. \quad (51)$$

Для того, чтобы значения c_i можно было выбрать необходимо и достаточно, чтобы выполнялось равенство

$$q_{12} + \dots + q_{n-1n} + q_{n1} = 2\pi k, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (52)$$

Действительно: выбираем произвольным образом c_1 . После этого c_2 восстанавливается однозначно: $c_2 = c_1 + q_{12}$. Так мы доходим до коэффициента c_n . Нужно, чтобы $c_n = c_1 + q_{n1} + 2\pi k$. Это и дает указанное условие. Перепишем его, подставив значения q_{ij} :

$$\frac{1}{2\pi h} \int_{\Lambda} p dx + \frac{1}{4} \mu(\Lambda) = m \in \mathbb{Z}. \quad (53)$$

Здесь $\mu(\Lambda)$ — сумма всех μ_{ij} . Эта величина называется индексом Маслова кривой Λ . В одномерном случае у этой величины есть простой геометрический смысл: это количество оборотов, которые делает касательный вектор кривой вокруг нуля, когда точка проходит всю кривую.

Тут хорошо бы вставить картинки и объяснить, почему это так. Но я совсем не художник.

Для замкнутой кривой $\mu(\Lambda)$ всегда равно 2.

Условие (53) называется условием квантования Бора-Зоммерфельда. На первый взгляд это равенство выглядит странно: величина слева зависит от h , а величина справа — целое число. На самом деле, это равенство

нужно понимать как условие на значение E_0 , определяющее кривую $\Lambda: H(x, p) = E_0$. При данном значении h выбираются такие уровни энергии, при которых равенство выполняется.

Итак, мы построили такие операторы K_i , что $K_i[\varphi] = K_j[\varphi]$, если $\text{supp } \varphi \subset U_i \cap U_j$. Ясно, что если карта V не содержит вертикальных касательных, то для этой карты можно определить оператор K_V так, что $\forall j$ $K_V[\varphi] = K_j[\varphi]$ для функций $\varphi \in C_0^\infty(V \cap U_j)$. Действительно: пусть для функций $\varphi_i \in C_0^\infty(V \cap U_j)$ $K_V = K_{U_i}$. Но тогда для функций с носителем в $U_i \cap U_j$ оператор K совпадает с K_{U_j} . А поскольку K_V отличается от K_{U_j} на константу, это означает, что $K_V[\varphi] = K_{U_j}[\varphi]$ для функций с носителем в $V \cap U_j$.

Теорема 2.9. *Существует единственный оператор $K: C^\infty(\Lambda) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R})$, такой что для любой карты V , не содержащей вертикальных касательных $K = K_V$ на функциях с носителем в V .*

Напомним, что параметр t — время движения вдоль кривой Λ позволяет ввести пространство $L^2(\Lambda)$ — гильбертово пространство со скалярным произведением $(u, v) = \int_\Lambda u \bar{v} dt$. Справедливо следующее

Утверждение 2.10.

$$\|\varphi\| = \|K[\varphi]\| \quad (54)$$

Утверждение 2.11.

$$\hat{H}K[\varphi] = K[E_0\varphi - ih\frac{\partial\varphi}{\partial t} + O(h^2)]. \quad (55)$$

Следствие 2.1. *Пусть E_0 таково, что $\Lambda: H(x, p) = E_0$ удовлетворяет условию квантования (53). Тогда пара (E_0, ψ_0) , где $\psi_0 = K_\Lambda[1]$ удовлетворяет уравнению*

$$\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0 + O(h^2). \quad (56)$$

Следствие 2.2. *Существует λ , принадлежащее спектру \hat{H} такое, что $\lambda - E_0 = O(h^2)$. При этом ψ_0 может не приближать никакую собственную функцию.*

3. Многомерный случай

3.1. Несколько слов о симплектической геометрии

Пусть L — линейное пространство, на котором задана невырожденная кососимметрическая билинейная форма ω . Невырожденность означает, что для любого вектора ξ найдется η такой, что $\omega(\xi, \eta) \neq 0$.

Утверждение 3.1. $\dim L = 2k$

Пусть A — матрица формы ω в некотором базисе. Из кососимметричности получаем $A = -A^T$, откуда $\det A = \det A^T = (-1)^n \det A$. Если форма невырождена, то $\det A$ отличен от 0, а значит размерность пространства L должна быть четной.

Напомним факт из линейной алгебры: в пространстве L существует симплектический базис $e_1, \dots, e_k, f_1, \dots, f_k$ такой что $\omega(e_i, e_j) = \omega(e_i, f_j) = 0$, $\omega(e_i, f_j) = \delta_{ij}$.

Пусть $M \subset L$ — подпространство. Определим косоортогональное дополнение к M :

$$M^\perp = \{\xi: \omega(\xi, \eta) = 0 \forall \eta\}. \quad (1)$$

Легко убедиться в справедливости равенства

$$\dim M + \dim M^\perp = 2n, \quad (2)$$

но в отличие от ортогонального дополнения косоортогональное дополнение к M может пересекаться с пространством M . Например, если $\dim M = 1$, то $M \subset M^\perp$.

Определим для каждого подпространства M подпространство

$$M_0 = M \cap M^\perp \quad (3)$$

. Из определения M^\perp ясно, что $M_0 = \text{Ker } \omega|_M$. Оказывается, что $\dim M$ и $\dim M_0$ все симплектические инварианты подпространства. Именно, справедливо следующее утверждение:

Задача 3.1. *Пусть M и M' подпространства в L такие, что $\dim M = \dim M'$ и $\dim M_0 = \dim M'_0$. Тогда существует преобразование пространства L , сохраняющее форму ω , переводящее M в M' .*

Определение. Подпространство M называется изотропным, если $\omega|_M = 0$.

Замечание. M — изотропно $\Leftrightarrow M \subset M^\perp$.

Замечание. M — изотропно $\Rightarrow \dim M \leq n$.

Определение. Подпространство M называется коизотропным, если $M^\perp \subset M$.

Замечание. M — коизотропно $\Rightarrow \dim M \geq n$.

Определение. Подпространство M называется лагранжевым, если $M^\perp = M$.

Возможно следующее эквивалентное определение: лагранжевым называется изотропное подпространство размерности n .

Рассмотрим теперь многообразие M^n вложенное в \mathbb{R}^{2n} . Будем считать, что в \mathbb{R}^{2n} введены координаты $p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_n$ и введем стандартную симплектическую структуру $\omega = dp \wedge dq$. Касательное пространство к многообразию в точке x $T_x M^n$ является подпространством в $T_x \mathbb{R}^{2n}$. Если в каждой точке $T_x M^n$ — лагранжево подпространство, то M называют лагранжевым подмногообразием. Это определение эквивалентно следующему: n -мерное подмногообразие называется лагранжевым, если ограничение формы ω на это многообразие равно 0.

Опишем еще одну конструкцию. Пусть $\Gamma \subset \mathbb{R}^{2n}$, $\dim \Gamma = 2n - 1$. Ясно, что $T_p \Gamma$ изотропно, то есть $(T_p \Gamma)^\perp \subset T_p \Gamma$ и $\dim T_p \Gamma = 1$. Таким образом на $2n - 1$ -мерном подмногообразии в \mathbb{R}^{2n} инвариантно определено поле направлений.

Определение. Поле направлений $(T_p \Gamma)^\perp$ называется характеристическим полем направлений, а его интегральные кривые — характеристиками.

Напомним определение гамильтонова векторного поля, связанного с функцией H . Поле v определяется условием $\forall \xi \omega(v, \xi) = \xi(H)$. Здесь $\xi(H)$ — производная функции H вдоль поля ξ . В координатах (p, q) это поле записывается в виде $v = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial x} \right)$.

Утверждение 3.2. Пусть Γ задана уравнением $H(x, p) = E_0$. Тогда гамильтоново векторное поле v направлено вдоль характеристического поля направлений.

По определению $\omega(\xi, v) = \xi(H) = 0$, поскольку H постоянно на Γ . Это значит, что v косоортогонален $T_p \Gamma$.

Утверждение 3.3. Пусть Γ определяется равенством $H = E_0$. Лагранжево подмногообразие Λ лежит в $\Gamma \Leftrightarrow \Lambda$ инвариантна относительно характеристик.

Докажем *Ra*. Пусть $\Lambda \subset \Gamma$. Тогда

$$T_p \Lambda \subset T_p \Gamma \Rightarrow (T_p \Gamma)^\perp \subset (T_p \Lambda)^\perp = T_p \Lambda \quad (4)$$

. Обратно, если Λ инвариантна относительно характеристик, то $v \in T_p \Lambda$, а значит $\omega(\xi, v) = 0$ для любого вектора $\xi \in T_p \Lambda$. Но $0 = \omega(\xi, v) = \xi(H)$, а это означает, что $H|_\Lambda = E_0$, то есть $\Lambda \subset \Gamma$.

3.2. Уравнения Гамильтона-Якоби

Перейдем теперь к обсуждению многомерного случая. Пусть задан гамильтониан $H: \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$. Нас снова интересуют решения уравнения

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (5)$$

в квазиклассическом пределе. Снова будем искать решения в виде

$$\psi = e^{\frac{is(x)}{\hbar}} \varphi(x, \hbar) = e^{\frac{is(x)}{\hbar}} (\varphi_0(x) + \hbar \varphi_1(x) + \dots), \quad (6)$$

$$E = E_0 + \hbar E_1 + \dots \quad (7)$$

В многомерном случае справедлив аналог формулы коммутации Вейлевского оператора с экспонентой:

$$\hat{H} e^{\frac{is}{\hbar}} \varphi(x) = e^{\frac{is}{\hbar}} \left(-H(x, p) \varphi - i\hbar \left(\frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{i\hbar}{2} \mathbf{Sp} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \right) \varphi + O(\hbar^2) \right). \quad (8)$$

Подставим выражение (6) в уравнение Шредингера и приравняем коэффициенты при \hbar^0 и \hbar . Получим

$$\hbar^0: H(x, \frac{\partial s}{\partial x}) \varphi_0 = E_0 \varphi_0, \quad (9)$$

$$\hbar^1: H(x, \frac{\partial s}{\partial x}) \varphi_1 - i \left(\frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right) - \frac{i}{2} \mathbf{Sp} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \right) \varphi_0 = E_0 \varphi_1 + E_1 \varphi_0. \quad (10)$$

Первое уравнение представляет собой уравнение на s :

$$H \left(x, \frac{\partial s}{\partial x} \right) = E_0. \quad (11)$$

Если считать, что это равенство выполнено второе равенство преобразуется в

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial \varphi_0}{\partial x}\right) + \frac{1}{2} \text{Sp} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \right) \varphi_0 - i E_1 \varphi_0 = 0. \quad (12)$$

Рассмотрим уравнение $H(x, \frac{\partial s}{\partial x}) = E_0$. Предположим, что можно задать зависимость $p = p(x) = \frac{\partial s}{\partial x}$. Рассмотрим поверхность Λ , задаваемую этим уравнением. Ясно, что $H|_\Lambda = \text{const}$. Несложно заметить, что $\omega|_\Lambda = 0$. Действительно:

$$\omega = \sum_j dp_j \wedge dx_j = d(\sum_j p_j dx_j) = \dots \quad (13)$$

если ограничить форму на подмногообразии $\Lambda: p = \frac{\partial s}{\partial x}$

$$\dots = d(\sum_j \frac{\partial s}{\partial x_j} dx_j) = d^2 s = 0. \quad (14)$$

Форма $\sum_j p_j dx_j$, являющаяся прообразом формы ω нам не раз понадобится в дальнейшем. Обозначим ее θ .

Утверждение 3.4. Пусть Λ — гладкая n -мерная поверхность, такая что

1) $\omega|_\Lambda = 0$,

2) $H|_\Lambda = \text{const}$,

3) $\pi_x: \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ взаимно однозначна (то есть Λ гомеоморфна \mathbb{R}^n).

Тогда Λ можно задать уравнением $p = \frac{\partial s}{\partial x}$, где s удовлетворяет уравнению Гамильтона-Якоби (9).

$$0 = \omega|_\Lambda = d\theta|_\Lambda \quad (15)$$

То есть форма θ замкнута, а значит по лемме Пуанкаре (здесь мы пользуемся тем, что Λ гомеоморфна диску) является точной: $\theta = ds$, откуда $p_j = \frac{\partial s}{\partial x_j}$. Функцию s можно определить как интеграл

$$s = \int_{\alpha_0}^{\alpha} \theta|_\alpha = \pi_x^{-1}(x). \quad (16)$$

Таким образом существует взаимно однозначное соответствие между решениями уравнения Гамильтона-Якоби и Лагранжевыми поверхностями в \mathbb{R}^{2n} .

3.3. Производная Ли и инвариантная форма объема

Пусть на гладком многообразии M^n задано векторное поле v . Рассмотрим семейство диффеоморфизмов $g_t: M \rightarrow M$ — сдвиг на время t вдоль траекторий поля v . Можно рассмотреть обратное отображение форм $(g_t)^*$.

Обратное отображение форм (поднятие форм) — достаточно стандартная конструкция. На всякий случай опишу ее подробнее. Пусть есть отображение $f: M \rightarrow N$. Тогда можно определить отображение f^* , отображающее k -формы на N в k -формы на M . Пусть точка $x \in M$ переходит в $y = f(x) \in N$. тогда $f^* \alpha$ в каждой точке определяется равенством

$$(f^* \alpha)_x(\xi_1, \dots, \xi_k) = \alpha_y(df_x \xi_1, \dots, df_x \xi_k). \quad (17)$$

То есть сначала векторы, на которых нужно найти значение формы отображаются в N с помощью дифференциала f , а потом берется значение формы α на них.

Получаем семейство форм, определенных в одной точке, зависящее от параметра t .

Определение. Производной Ли формы α вдоль векторного поля v называется величина

$$\mathcal{L}_v \alpha = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} g_t^* \alpha. \quad (18)$$

Теперь найдем производную Ли в координатах для одного важного частного случая. Рассмотрим n -форму на многообразии M , которая не обращается в 0 ни в одной точке. Такая форма называется формой объема. Обозначим ее $d\sigma$ (знак d здесь не по существу, $d\sigma$ нужно понимать как единый символ). В координатах (y_1, \dots, y_n) эта форма записывается в виде

$$a(y) dy_1 \wedge \dots \wedge dy_n. \quad (19)$$

Обозначим через $Y(y, t)$ решение дифференциального уравнения

$$\dot{Y} = v(Y) \quad (20)$$

с начальным условием $Y|_{t=0} = y$. Тогда форма $g_t^*(d\sigma)$ запишется в виде

$$g_t^*(d\sigma) = a(Y(y, t)) dY_1(y, t) \wedge \cdots \wedge dY_n(y, t). \quad (21)$$

Определение. Форма $d\sigma$ инвариантна вдоль траекторий v , если $\mathcal{L}_v d\sigma = 0$.

Преобразуя выражение для $g_t^*(d\sigma)$ получаем

$$g_t^*(d\sigma) = a(Y(y, t)) \det \frac{\partial Y}{\partial y} dy_1 \wedge \cdots \wedge dy_n. \quad (22)$$

Найдем теперь $\frac{d}{dt}|_{t=0}$:

$$\frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} g_t^*(d\sigma) = \left(\sum_{j=1}^n \frac{\partial a}{\partial y_j} \dot{Y}_j \frac{\partial Y}{\partial y} + a(Y) \frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \frac{\partial Y}{\partial y} \right) dy_1 \wedge \cdots \wedge dy_n. \quad (23)$$

В первом слагаемом $\det \frac{\partial Y}{\partial y} = 1$ (при $t = 0$). Для того чтобы найти $\frac{d}{dt}\big|_{t=0} \det \frac{\partial Y}{\partial y}$ воспользуемся известным равенством: $\frac{d}{dt} \det A = \text{Sp} \dot{A}$.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial Y_i}{\partial y_j} = \sum_k \frac{\partial v}{\partial y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial y_j}. \quad (24)$$

то есть, если обозначить $A = \frac{\partial Y}{\partial y}$

$$\dot{A} = \frac{\partial v}{\partial y} A. \quad (25)$$

Таким образом производная Ли формы $d\sigma$ вдоль поля v равна

$$\mathcal{L}_v d\sigma = \sum_j \left(v_j \frac{\partial a}{\partial y_j} + a \frac{\partial v_j}{\partial y_j} \right) dy_1 \wedge \cdots \wedge dy_n = \left(\frac{1}{a} \sum \frac{\partial}{\partial y_j} (av_j) \right) a dy_1 \wedge \cdots \wedge dy_n. \quad (26)$$

Выражение в скобках называют дивергенцией поля $d\sigma$: $\mathcal{L}_v \sigma = \text{div}_v \sigma$, $\text{div}_v = \frac{1}{a} \sum \frac{\partial}{\partial y_j} (av_j)$.

Замечание. Можно ввести операцию i_v , переводящую k -формы в $k-1$ -формы:

$$(i_v \alpha)(\xi_1, \dots, \xi_{k-1}) = \alpha(v, \xi_1, \dots, \xi_{k-1}). \quad (27)$$

Тогда можно записать $\mathcal{L}_v d\sigma = d(i_v d\sigma)$.

Задача 3.2. Доказать, что для любой k -формы $\mathcal{L}_v \alpha = i_v d\alpha + di_v \alpha$.

3.4. Решение уравнения переноса

Честно говоря, у меня в конспектах нигде не сказано, что то уравнение, которое мы собираемся сейчас решить называется уравнением переноса. Но в программе такой пункт есть, а мы не так много уравнений решали. Если не это, то какое?..

Пусть Λ — инвариантное лагранжево подмногообразие, $H|_{\Lambda} = E_0$, $d\sigma$ — форма объема, инвариантная относительно v .

Утверждение 3.5. Функция $\left| \frac{d\sigma}{dx} \right|^{1/2} e^{iE_1 t}$ удовлетворяет уравнению

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p}, \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \text{Sp} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \right) \varphi_0 - iE_1 \varphi_0 = 0. \quad (28)$$

Теорема 3.6. Пусть $\Lambda \subset \mathbb{R}^{2n}$ — лагранжево подмногообразие, инвариантное относительно v , $H|_{\Lambda} = E_0$, $d\sigma$ — инвариантная форма объема на Λ , $\pi_x: \Lambda \rightarrow \mathbb{R}_x^n$ — диффеоморфизм. Тогда функция

$$\psi(x) = \left| \frac{d\sigma}{dx} \right|^{1/2} \exp(iE_1 t) \exp\left(\frac{i}{h} \int_{\alpha_0}^{\alpha} \theta \right) \big|_{\alpha=\pi_x^{-1}(x)} \quad (29)$$

является решением уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = E_0 + hE_1 \psi + O(h^2). \quad (30)$$

3.5. p -представление в многомерном случае

Итак, в случае, если поверхность Λ однозначно проектируется на \mathbb{R}_x^n мы научились находить решение уравнения Шредингера. В случае, если однозначной проекции нет нужно, как и в одномерном случае перейти к импульсному представлению. Проблема в том, что вообще говоря однозначной проекции на \mathbb{R}_p^n может тоже не быть. Нужно выбирать часть координат из x и часть из p . Пусть $I \subset \{1, \dots, n\}$. Будем обозначать через $\sigma_I = \{x_I, p_{\bar{I}}\}$ плоскость, натянутую на базисные вектора x с номерами, входящими в набор I , и p с остальными номерами. Ясно, что плоскости такого вида лагранжевы. В каком-то смысле их можно считать “стандартными” лагранжевыми плоскостями.

Лемма 3.7. Пусть λ — лагранжева плоскость. Тогда существует набор индексов I такой, что λ и σ_I пересекаются трансверсально.

Опишем явно такую плоскость. Пусть $\lambda_0 = \sigma_0 \cap \lambda$ — пересечение плоскостей ($p = 0$) и λ . Пусть в набор I входят те i , для которых $x_i \in \lambda_0$. Тогда σ_I — искомая плоскость.

Пусть $\xi \in \lambda \cap \sigma_I$. Из того, что λ и σ_I лагранжевы следует, что

$$\xi \perp \lambda, \xi \perp \sigma_I \quad (31)$$

(знак \perp означает косоортогональность). Отсюда следует, что $\xi \perp \lambda \cap \sigma_0$ и $\xi \perp \sigma_i \cap \sigma_0$. Остается заметить, что $\lambda \cap \sigma_0$ и $\sigma_i \cap \sigma_0$ покрывают всю σ_0 , поэтому $\xi \perp \sigma_0$, значит (так как σ_0 лагранжева) $\xi \in \sigma_0$. Остается заметить, что пересечение $\sigma_I \cap \sigma_0 \cap \lambda = 0$.

Определим преобразование Фурье F_I :

$$F_I v = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{k/2}} \int_{\mathbb{R}^k} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_{\bar{I}}, x_{\bar{I}})} v(x) dx_{\bar{I}}. \quad (32)$$

Здесь k — количество элементов в наборе \bar{I} . Аналогично определяется обратное преобразование Фурье:

$$F_I^{-1} u = \frac{1}{(-2\pi i \hbar)^{k/2}} \int_{\mathbb{R}^k} e^{\frac{i}{\hbar}(p_{\bar{I}}, x_{\bar{I}})} u(x_I, p_{\bar{I}}) dp_{\bar{I}}. \quad (33)$$

Свойства F_I и F_I^{-1} полностью аналогичны свойствам одномерного преобразования Фурье:

- 1) $F_I F_I^{-1} = F_I^{-1} F_I = id$
- 2) F_I и F_I^{-1} продолжаются до унитарных операторов в L_2
- 3)

$$\left(i \hbar \frac{\partial}{\partial p_I} \right)^m F_I = F_I (x_I)^m, \quad (34)$$

$$F_I (-i \hbar \frac{\partial}{\partial x_I})^m = p_I F_I. \quad (35)$$

Перейдем от координат x и p к координатам $y_I = (x_I, p_{\bar{I}})$ и $q_I = (p_I, -x_{\bar{I}})$. Ясно, что в этих координатах форма $\omega = \sum_i dp_i \wedge dx_i$ записывается в виде $\sum_j dy_j \wedge dq_j$. Точно так же, как и в одномерном случае можно вместо Вейлевского оператора $\hat{H} = H(x, -i \hbar \frac{\partial}{\partial x})$ рассмотреть оператор $\hat{H}_I = H(y, -i \hbar \frac{\partial}{\partial y})$. И точно так же, как в одномерном случае справедливо равенство $F_I \hat{H} F_I^{-1} = \hat{H}_I$. Это позволяет искать решения уравнения $\hat{H} \psi = E \psi$ в виде $\psi = F_I^{-1} v$, где v удовлетворяет уравнению

$$\hat{H}_I v = E v \quad (36)$$

. Для этого уравнения мы также можем получить уравнения Гамильтона-Якоби и переноса:

$$H(y, \frac{\partial \sigma}{\partial y}) = E_0 \quad (37)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial q}, \frac{\partial \varphi_0}{\partial y} \right) - \frac{i}{2} \text{Sp} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q^2} \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial y} \varphi_0 \right) - i E_1 \varphi_0 = 0. \quad (38)$$

Аналогично предыдущим выкладкам можно получить следующую теорему:

Теорема 3.8. Пусть $\Lambda \subset \mathbb{R}^{2n}$ — лагранжево подмногообразие, $H|_{\Lambda} = E_0$, $d\sigma$ — инвариантная форма объема на Λ , $d\pi_I: \Lambda \rightarrow \mathbb{R}_y^n$ — невырожден в точке p . Тогда функция

$$v(y) = \left| \frac{d\sigma}{dy} \right|^{1/2} e^{i E_1 t} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\alpha_0}^{\alpha} q dy} \Big|_{\alpha = \pi_y^{-1}(x)} \quad (39)$$

является решением уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = E_0 + hE_1)\psi + O(h^2). \quad (40)$$

в окрестности точки $\pi_I(p)$.

Входящий в выражение для v интеграл $\int_{\alpha_0}^{\alpha} q dy$ можно переписать в виде

$$\int_{\alpha_0}^{\alpha} q dy = \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx - \int_{\alpha_0}^{\alpha} = \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx - (x_{\bar{I}}, p_{\bar{I}}). \quad (41)$$

В последнем равенстве мы отбросили константу $(x_{\bar{I}}(\alpha_0), p_{\bar{I}}(\alpha_0))$. Это несущественно, поскольку функция v определена с точностью до константы, равной по модулю 1.

4. Предканонический оператор

Пусть U_I — такая карта на многообразии Λ , что проекция на плоскость σ_I взаимно однозначна.

Определение. Предканоническим оператором $K_{U_I} : C_0^\infty(U_I) \rightarrow C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ называется оператор, определенный следующей формулой: если $\bar{I} \neq \emptyset$

$$K_{U_I}[\varphi] = F_I^{-1} \left(\left| \frac{d\sigma}{dy} \right|^{1/2} \exp \left(\frac{i}{h} \int_{\alpha_1}^{\alpha} p dx - \frac{i}{h} (p_{\bar{I}}, x_{\bar{I}}) \right) \varphi \right), \quad (1)$$

если же $\bar{I} = \emptyset$

$$K_{U_I}[\varphi] = \left| \frac{d\sigma}{dy} \right|^{1/2} e^{\frac{i}{h} \int_{\alpha_1}^{\alpha} p dx} \varphi. \quad (2)$$

Справедливо следующее утверждение: $\|K_{U_I}[\varphi]\| = \|\varphi\|$, здесь норма для функций на Λ вводится с помощью меры $d\sigma$.

Утверждение 4.1 (Формула коммутации с \hat{H}). $\hat{H}K_{U_I}[\varphi] = K_{U_I}[H\varphi - ih\frac{d}{dt}\varphi + O(h^2)]$.

Для того, чтобы установить соотношения между предканоническими операторами для разных карт нам понадобится многомерный аналог формулы стационарной фазы:

Теорема 4.2 (Формула стационарной фазы). Пусть $I(h) = \int_{\mathbb{R}^k} e^{\frac{i\Phi(z)}{h}} q(z) dz$. Тогда

1) Если $d\Phi|_{\text{supp } q} \neq 0$, то $I(h) = o(h^N) \forall N$.

2) Если Φ имеет на $\text{supp } q$ единственную невырожденную критическую точку, то

$$I(h) = e^{\frac{i}{h}\Phi(z_0)} \sqrt{\frac{(2\pi h)^k}{|\det \Phi''(z_0)|}} e^{\frac{i\pi}{4} \text{sgn } \Phi''(z_0)} (q(z_0) + o(h)). \quad (3)$$

Пусть U_i и U_j — карты, которые находятся в общем положении относительно проекции на плоскость $p = 0$. То есть такие, что $\det d\pi_x \neq 0$ на открытом, всюду плотном множестве (это ситуация общего положения, то есть условие не особенно жесткое) Обозначим через Σ множество особенностей π_x .

Теорема 4.3. Пусть $V_{ij} = U_i \cap U_j$. Тогда для функций с носителем в V_{ij}

$$K_{U_I} = e^{iq_{IJ}} K_{U_J} + O(h). \quad (4)$$

Мы докажем равенство для всех точек из пересечения карт, не лежащих на Σ . По непрерывности из этого следует равенство на всем пересечении.

$$q_{ij} = \frac{1}{h} \int_{\alpha_I}^{\alpha_J} (p, dx) + \frac{\pi}{2} \left(\text{ind} \left(\frac{\partial x_{\bar{I}}}{\partial p_{\bar{I}}} \right) - \text{ind} \left(\frac{\partial x_{\bar{J}}}{\partial p_{\bar{J}}} \right) \right). \quad (5)$$

4.1. Условия квантования и оператор Маслова

Выберем на многообразии атлас U_i . Так же как в одномерном случае мы хотим ввести в каждой карте предканонический оператор и выбрать константы так, чтобы эти операторы совпадали. Возникает вопрос, когда это возможно. Пусть мы зафиксировали оператор в карте U_I и хотим определить оператор в карте U_J . Для этого рассмотрим путь, соединяющие выделенные точки в этих картах и рассмотрим покрытие пути картами $U_I = U_0, \dots, U_k = U_J$. Продолжим оператор вдоль этого пути, выбирая в каждой карте оператор так, чтобы он был согласован с предыдущей картой. Нужно потребовать, чтобы определенное таким образом продолжение не зависело от пути, соединяющего выбранные точки. Это требование эквивалентно тому, что при продолжении оператора вдоль любого замкнутого пути он не меняется. Получаем условие квантования: необходимо, чтобы для любого замкнутого пути γ

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\gamma} (p, dx) + \frac{1}{4}\mu(\gamma) = M \in \mathbb{Z}. \quad (6)$$

Утверждение 4.4. Пусть для любой замкнутой кривой γ на Λ выполнено условие (6). Тогда для любой канонической карты существует число c_I , такое что операторы $K_I = e^{ic_I} K_{U_I}$ совпадают для любой пары пересекающихся карт с точностью $o(\hbar)$.

Утверждение 4.5. Существует единственный оператор $K: C^\infty(\Lambda) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}^n)$ такой, что $\forall \varphi \in C_0^\infty(U_I)$ $K[\varphi] = K_I[\varphi]$.

Строится этот оператор с помощью разбиения единицы:

$$K[\varphi] = \sum_j K_j[\varphi e_j]. \quad (7)$$

Этот оператор зависит только от многообразия Λ и формы объема на нем. Строго говоря он зависит еще от выделенной точки на многообразии, но эта зависимость имеет вид умножения на константу e^{ic} . Определенный таким образом оператор называется оператором Маслова.

Утверждение 4.6. $\|K\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2 + o(\hbar)$

Утверждение 4.7. Если Λ и $d\sigma$ инвариантны относительно гамильтонова векторного поля, то

$$\hat{H}K[\varphi] = K[H\varphi - i\hbar\dot{\varphi} + O(\hbar^2)] \quad (8)$$

4.2. Вполне интегрируемые гамильтоновы системы

Рассмотрим один частный случай, когда можно применить развитую нами технику квантования.

Определение. Гамильтонова система на $2n$ -мерном многообразии называется вполне интегрируемой по Лиувиллю, если существует набор из n функционально независимых интегралов в инволюции $H = F_1, \dots, F_n$.

В этом случае (при некоторых дополнительных ограничениях: нужно требовать полноту гамильтоновых полей функций F_i) применима теорема Лиувилля, которая утверждает, что совместная поверхность уровня интегралов — n -мерный тор, то есть произведение n окружностей. Можно ввести координаты “действие-угол” (I, φ) . Координаты I определяют тор, координаты φ — положение точки на этом торе. На торе есть n независимых циклов γ_i . Значение координат действия определяется как $I_i = \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma_i} p dx$. Запишем условия квантования

(6) для каждого цикла и получим набор условий

$$\frac{1}{\hbar} I_j = M_j - \frac{1}{4}\mu(\gamma_j). \quad (9)$$

То есть задав целочисленный вектор M мы получаем условие на переменные действия, которое выделяет те торы, на которых существует оператор Маслова. Для таких торов решение уравнения Шрёдингера можно записать в виде $\psi = K_\Lambda[1]$.

$$\hat{H}K_\Lambda[1] = K_\Lambda[E_0 - i\hbar\dot{1} + O(\hbar^2)] = E_0\psi \quad (10)$$

4.3. Геометрический смысл индекса Маслова

Рассуждений А.И. я до конца не понял, но основной результат изложу.

Пусть Σ_0 — множество критических точек проекции π_x , в которых ранг $d\pi_x$ падает на единицу. Множество Σ_0 называют циклом особенностей. Для многообразия общего положения любую кривую можно пошевелить так, чтобы она пересекалась только с Σ_0 , а не с $\Sigma \setminus \Sigma_0$. Индекс Маслова кривой — число точек пересечения кривой с циклом особенностей (с учетом ориентации).