С. П. Новиков

Лекция 25 июня 1998 года

Уравнение Шредингера и симплектическая геометрия

Эта лекция посвящена довольно элементарным вещам. Я познакомлю вас с некоторыми полезными понятиями математической физики. Прежде чем говорить о том, о чем я собираюсь говорить (о некоторых экзотических операторах на графах), позвольте мне напомнить вам, что такое уравнение Шредингера. Уравнение

$$-\psi'' + u(x)\psi = \lambda\psi$$

мы будем называть уравнением Шредингера, а величину $u(x)$ будем называть потенциалом. Иногда это уравнение рассматривают формально, но если уравнение Шредингера возникает из квантовой механики, то обычно предполагается, что $\psi \in L_2(\mathbb{R})$, т. е.

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

Пространство $L_2(\mathbb{R})$ гильбертово. Именно для векторов этого пространства рассматривается спектральная задача.

В отличие от традиционных матричных ситуаций, где возникает задача на собственные значения, здесь бывает такое понятие, как «непрерывный спектр».

Будем считать, что при $x \to \infty$ функция $\psi(x)$ достаточно быстро стремится к нулю. Чтобы избежать сложностей с обоснованием сходимости, можно даже считать, что функция $\psi(x)$ финитна, т. е. тождественно равна нулю вне конечной области.

1. Квантовое рассеяние

Нас интересует такое понятие, как квантовое рассеяние. Для финитного потенциала естественно предположить, что существуют такие решения

$\psi_\pm$, что $\psi_\pm(x) \to e^{\pm ikx}$ при $x \to -\infty$ (здесь $k^2 = \lambda$). Это один базис пространства решений. Второй базис мы получим, если рассмотрим такие решения $\varphi_\pm$, что $\varphi_\pm(x) \to e^{\pm ikx}$ при $x \to +\infty$.

Пространство решений дифференциального уравнения второго порядка при любом фиксированном λ является двумерным пространством, поэтому

$$\begin{aligned} a\psi_+ + b\psi_- &= \varphi_+, \\ c\psi_+ + d\psi_- &= \varphi_-. \end{aligned} \tag{1}$$

Возникает матрица $T = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. В некоторых чисто математических книгах эту матрицу неправильно называют матрицей рассеяния. Правильное название —*матрица монодромии.* Матрица монодромии очень часто возникает в разных разделах математики, например, в комплексной теории дифференциальных уравнений. Матрица монодромии —это матрица переноса из $-\infty$ в $+\infty$ вдоль оси x, т. е. матрица переноса слева направо. У этой матрицы есть целый ряд очень интересных свойств. В частности, поставим теперь вопрос о рассеянии. Рассмотрим $\lambda \in \mathbb{R}$. Мы знаем, что самосопряженные матрицы имеют вещественный спектр. Так будет и для операторов, если они самосопряженные в разумном смысле. Более того, легко видеть, что в данном случае интересующий нас спектр будет только для положительных λ. Для $k^2 = \lambda$ это соответствует тому, что $k \in \mathbb{R}$. Область $\lambda \geq 0$ на прямой назовем *зоной рассеяния.*

Теперь, что такое матрица рассеяния. Для $k \in \mathbb{R}$ выполняются следующие свойства: $\bar{\psi}_+ = \psi_-$ и $\bar{\varphi}_+ = \varphi_-$. В таком случае матрица T имеет вид $T = \begin{pmatrix} a & b \\ \bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}$, причем по некоторым причинам, которые нас как раз особенно интересуют, $\det T = |a|^2 - |b|^2 = 1$. Такие матрицы образуют группу $SU(1,1)$. Это —специальные унитарные матрицы, которые сохраняют индефинитное эрмитово скалярное произведение с одним положительным и одним отрицательным квадратом. Я рекомендую в виде полезного алгебраического упражнения доказать, что $SU(1,1) \cong SL_2(\mathbb{R})$. Дело в том, что мы получили комплексную матрицу для чисто вещественного уравнения: мы требуем, чтобы функция $u(x)$ была вещественной (по смыслу u обычно является электрическим потенциалом). Если бы мы при выборе базиса взяли на $\pm\infty$ не $e^{\pm ikx}$, а $\cos kx$ и $\sin kx$, то матрица монодромии была бы вещественной матрицей из группы $SL_2(\mathbb{R})$.

Мы переходили от базиса ψ_+, ψ_- к базису φ_+, φ_-. Если же перейти от базиса φ_-, ψ_- к базису φ_+, ψ_+, то можно доказать, что матрица перехода будет унитарной (хотя и не любая унитарная матрица так получается). Эту матрицу обозначают $S(\lambda)$ и называют *матрицей рассеяния.*

Это —элементарный материал, который физики учат на втором курсе. Математики не всегда его учат вообще. Но для физиков-теоретиков обыкновенные дифференциальные уравнения излагаются именно так.

Переход от матрицы $T(\lambda) \in SU(1,1)$ к матрице $S(\lambda) \in U(2)$ называют *преобразованием Кэли.*

Есть еще одно полезное упражнение, которое можно найти в хорошем учебнике В. И. Арнольда «Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений».

Рассмотрим пару векторов e_1 и e_2 и матрицу $T \in SL_2(\mathbb{R})$, отображающую эту пару векторов в пару e_1' и e_2'. Введем четырехмерное пространство $\mathbb{R}^4$ с базисом e_1, e_2, e_1', e_2' и определим в нем кососимметрическое скалярное произведение так, что $\langle e_1, e_2\rangle = -\langle e_1', e_2'\rangle = 1$, а остальные произведения базисных элементов нулевые (разумеется, $\langle e_2, e_1\rangle = -\langle e_2', e_1'\rangle = -1$). Пространство $\mathbb{R}^4$ с таким кососимметрическим скалярным произведением назовем *пространством симплектической геометрии*, или *пространством симплектической линейной алгебры.* Отметим в нем двумерное подпространство —график отображения T в $\mathbb{R}^4$.

Упражнение. График отображения T является лагранжевым подпространством, т. е. для любого вектора η выполняется равенство $\langle \eta, \xi\rangle = 0$, где $\xi = T\eta$.

Теперь я могу рассказать об аналогах теории рассеяния, возникающих в теории графов. *Граф* Γ —это одномерный симплициальный комплекс; у него есть только ребра и вершины. Мы требуем, чтобы у графа не было двойных ребер, т. е. пересечение любых двух ребер либо пусто, либо состоит из одной вершины. Кроме того, мы требуем, чтобы граф не имел концов. Это означает, что если есть хотя бы одно ребро, пришедшее в вершину, то должно быть еще одно ребро, выходящее из нее. Для вершины P обозначим через n_P число выходящих из этой вершины ребер. Мы будем предполагать, что $n_P < \infty$, а сами графы иногда будут и бесконечными.

Простейший пример бесконечного графа —дискретизированная прямая $\mathbb{R}$ с отмеченными целыми точками.

2. Операторы Шредингера на графах

Есть два оператора Шредингера на графах. Один действует на функциях от вершин, а другой действует на функциях от ребер.

Определение. Оператор Шредингера действует на пространстве функций, зависящих от вершин графа, следующим образом:

$$(L\psi)_P = \sum_{P'} b_{P,P'}\psi_{P'},$$

причем $b_{P,P'} = b_{P',P} \in \mathbb{R}$ и $b_{P,P'} \neq 0$, только если $P = P'$ или $P \cup P' = \partial R$ —граница ребра R.

Число $b_{P,P'}$ называют *потенциалом.* Взаимодействовать могут только соседние вершины. В теории вероятностей и в комбинаторике есть тысячи работ, посвященных изучению оператора Шредингера (или, как его еще называют, оператора второго порядка), действующего на функциях от вершин графа.

Оператор Шредингера, действующий на функциях от ребер, определяется аналогично:

$$(L\psi)_R = \sum_{R'} d_{R,R'}\psi_{R'},$$

Требование аналогичное: $d_{R,R'} \neq 0$ только для ребер, являющихся ближайшими соседями друг друга. Ближайшими соседями мы считаем либо совпадающие ребра, либо ребра, имеющие общую вершину.

Реберные операторы не сводятся к вершинным.

Простейшим примером оператора Шредингера на симплициальных комплексах (и при этом действующих на симплексах любой размерности), являются так называемые операторы Лапласа-Бельтрами, которые интенсивно использовались топологами, начиная со знаменитой работы Зингера с соавторами, посвященной изучению так называемого кручения Райдемайстера-Рея-Зингера. Так что многомерная ситуация изучалась.

Рассмотрим простейшую ситуацию —дискретизированную прямую. Уравнения Шредингера и Штурма-Лиувилля в вычислительной математике дискретизировали с самого момента ее возникновения, и естественно, что дискретное уравнение Шредингера многократно изучалось. Сопоставим ребру R_n и вершине P_n их номер n. В случае дискретизированной прямой реберный и вершинный операторы Шредингера

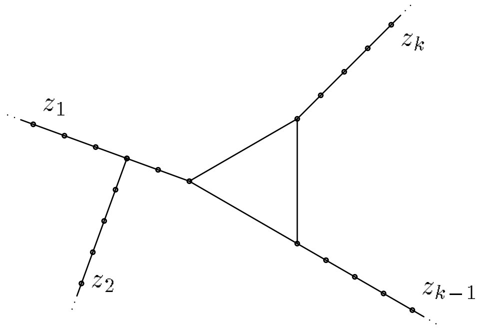

Рис. 1. Граф с k хвостами

не отличаются друг от друга. Уравнение Шредингера на дискретизированной прямой записывается следующим образом:

$$c_{n-1}\psi_{n-1} + c_{n+1}\psi_{n+1} + v_n\psi_n = \lambda_n\psi_n.$$

В теории солитонов это уравнение интенсивно использовалось в так называемой теории дискретных систем. В классической вычислительной математике предполагалось, что $c_n = 1$ для всех n. Это ограничение неудобно. Впоследствии выяснилось, что в теории солитонов и в квантовой физике удобно рассматривать общий класс операторов Шредингера.

На дискретизированной прямой при любом λ тоже имеется двумерное пространство решений. Естественно возникает оператор монодромии. Если коэффициенты стремятся к определенным константам на $\pm\infty$, то возникает матрица рассеяния с теми же свойствами. Это мало чем отличается от непрерывной прямой.

Рассмотрим граф Γ, который имеет k хвостов $z_1, \ldots, z_k$ (рис. 1). Каждый хвост —это дискретизированная полупрямая. Мы потребуем, чтобы вне конечной области $c_n = 1$ и $v_n = 0$, т. е. уравнение Шредингера имеет вид

$$\psi_{n-1} + \psi_{n+1} = \lambda\psi_n. \tag{2}$$

Как устроены решения уравнения (2)? Ответ очень простой: можно взять $\psi_{n,\pm} = a_\pm^n$, где

$$a_\pm = \frac{1}{2}\left(\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4}\right).$$

Зона рассеяния (зона непрерывного спектра): $|a_\pm| = 1$ (или, что то же самое, $-2 \le \lambda \le 2$). Именно для этой зоны мы хотим построить рассеяние.

В каждом хвосте z_j выберем решения $\psi_{+,j}$ и $\psi_{-,j}$. Эти решения могут не продолжаться на весь граф. Решения $\psi_\pm$ —это решения типа экспоненты. Еще можно ввести решения c_j и s_j —аналоги косинуса и синуса. Они получаются так:

$$c_j + a_\pm s_j = \psi_{\pm,j}.$$

Это будет удобный вещественный базис.

Введем пространство асимптотических состояний

$$\mathbb{R}^{2k} = \bigoplus_{j=1}^{k} \mathbb{R}^2_j,$$

где $\mathbb{R}^2_j = \{c_j, s_j\}$ —пространство решений на j-м хвосте.

Рассмотрим следующую величину, которую мы назовем *вронскианом*:

$$W_{\vec{R}}(\varphi,\psi) = b_{P,P'}(\varphi_{P'}\psi_P - \psi_{P'}\varphi_P)$$

для вершинного оператора;

$$W_{\vec{R}}(\varphi,\psi) = \sum_{R'\cap\vec{R}=P} d_{R,R'}(\varphi_{R'}\psi_R - \psi_{R'}\varphi_R)$$

для реберного оператора. Здесь $\vec{R} = PP'$ —ориентированное ребро.

Что является непрерывным аналогом этой величины? Если имеется оператор Шредингера $-\psi'' + u(x)\psi = \lambda\psi$, то для пары решений (φ,ψ) детерминант Вронского $W(\varphi,\psi)$ имеет вид

$$W(\varphi,\psi) = \varphi'\psi - \varphi\psi'.$$

В непрерывном случае основное свойство детерминанта Вронского заключается в том, что $W(\varphi,\psi) = \mathrm{const}$. Для операторов Шредингера на графах есть прямой аналог этой теоремы.

Теорема 1. а) $W_{\vec{R}}(\varphi,\psi)$ *—корректно определенная функция пары решений и ориентированного ребра. Эта функция кососимметрическая: она меняет знак при перестановке решений и меняет знак при изменении ориентации ребра*;

б) $\partial W = 0$, *т.е.* W *—цикл.*

Физическая интерпретация того, что W —цикл,—это первый закон Кирхгофа. Если $\Phi = \varphi + i\psi$ интерпретировать как поле, то $-2iW(\varphi, \psi) = j_\Phi$ —ток, и равенство $\partial W = 0$ выражает первый закон Кирхгофа.

Цикл W открытый: если у графа есть бесконечный хвост, то у этого цикла нет конечного носителя. Утверждение о том, что W —цикл, соответствует утверждению о том, что в непрерывном случае вронскиан является константой. Действительно, для прямой любой открытый цикл —это просто прямая с каким-то коэффициентом.

Мы интерпретируем W как кососимметрическое скалярное произведение на парах решений. Значения этого скалярного произведения векторные. Таким образом, мы считаем W элементом одномерной группы гомологий графа $H_1(\Gamma, \mathbb{R})$.

Чтобы это могло быть полезно, нужно, чтобы при данном λ было более чем одно решение. Действительно, любая кососимметрическая билинейная форма на одномерном пространстве тождественно равна нулю. Пространство решений очень часто имеет размерность больше 1 в том случае, когда граф обладает симметрией. Второй случай, который я хочу объяснить, это когда у графа никакой симметрии нет, но у него есть k бесконечных хвостов. В этом случае пространство решений не менее чем k-мерно.

Я начал этим заниматься, исходя из такого соображения. Классики теории чисел, начиная с Сельберга, и современные геометры, включая Сарнака, рассматривали оператор Лапласа-Бельтрами в разных областях на плоскости Лобачевского. Имеются в виду области, связанные с дискретными группами, у которых фундаментальная область имеет конечную площадь. На плоскости Лобачевского им соответствуют области с конечным числом концов. Еще И. М. Гельфанд в 50-е годы обращал внимание на результаты Сельберга и говорил, что их полезно перевести на язык теории рассеяния. Следуя идее Гельфанда, это делала ленинградская школа Фаддеева. Но это делалось только для случая, когда хвостов не более двух. М. Громов развивал и рекламировал общую похожую идею, довольно очевидную, впрочем. Если вы смотрите на гиперболическую геометрию из бесконечности, то она предстает перед вами как чисто одномерное образование. Чем ближе вершины треугольника к границе, тем меньше его площадь и тем больше он похож на граф. Естественно возникает мысль, что спектральную теорию, в особенности в случае непрерывного спектра операторов Лапласа-Бельтрами, естественно моделировать, используя теорию графов с хвостами.

Пусть имеется граф Γ с k хвостами $z_1, \ldots, z_k$. Я только что ввел пространство асимптотических состояний $\mathbb{R}^{2k} = \bigoplus_{j=1}^{k} \mathbb{R}^2_j$. Это —пространство решений уравнения Шредингера на хвостах в предположении, что коэффициенты оператора стремятся на хвостах к определенным стандартным, которые я только что выписал. А именно,

$$\psi_{\pm,j,n} = c_{j,n} + a_{\pm} s_{j,n}.$$

Здесь j —номер хвоста, n —номер вершины.

С помощью детерминанта Вронского пространство асимптотических состояний можно превратить в симлектическое пространство следующим образом. Мы потребуем, чтобы выполнялось равенство $\langle c_j, s_{j'} \rangle = \delta_{j,j'}$, и введем такое кососимметрическое скалярное произведение. Оно совпадает с вронскианом для двух решений на каждом хвосте.

Теперь обратим внимание на следующее. Пусть есть пара решений φ, ψ уравнения $L\psi = \lambda\psi$. Сопоставим (вещественному) решению ψ его асимптотическое значение, являющееся элементом пространства $\mathbb{R}^{2k}$:

$$\psi \mapsto \psi^{as} \in \mathbb{R}^{2k}.$$

Это делается следующим образом. Если есть решение уравнения Шредингера на графе, то оно чему-то равно на каждом хвосте. Мы берем прямую сумму этих состояний. Я сейчас рассматриваю вещественные решения, но можно и всё комплексифицировать и рассматривать комплексные решения тоже.

Теорема 2. *Пусть $L\psi = \lambda\psi$ и $L\varphi = \lambda\varphi$. Тогда $\langle \varphi^{as}, \psi^{as} \rangle = 0$.*

Эта теорема означает следующее. Если два набора асимптотических значений, заданных произвольно в каждом хвосте, продолжаются до решений уравнения Шредингера на всем графе, то их скалярное произведение всегда обращается в нуль. В действительности это свойство полностью определяет все свойства унитарности процесса рассеяния. Иными словами, как говорят симплектические геометры, множество всех асимптотических значений реально существующих решений, образует лагранжево подпространство размерности k в пространстве размерности $2k$.

Этот факт, по сути дела, является чисто топологическим. Пусть есть граф Γ с k хвостами $z_1, z_2, z_3, \ldots, z_k$. Рассмотрим пару решений $L\psi = \lambda\psi$ и $L\varphi = \lambda\varphi$. Неважно, являются рассматриваемые операторы Шредингера реберными или вершинными: на хвостах различия между ними нет. Составим вронскиан W. Его граница равна нулю.

Упражнение. Из того, что вронскиан W —цикл, следует, что он представляется в виде

$$W = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i z_i + \text{нечто конечное},$$

т. е. если какое-то ребро хвоста вошло в W с каким-то коэффициентом, то и все остальные ребра этого хвоста войдут в W с тем же самым коэффициентом.

Заметим также, что один хвост никогда не продолжается до цикла на всем графе. Могут продолжаться только разности хвостов, причем разными способами. Разности этих продолжений являются какими-то конечными циклами в графе.

Упражнение. $W = \sum\limits_{j=2}^{k} \beta_j (z_1 - z_j) +$ нечто конечное.

Если сопоставить эти два выражения, то можно увидеть следующее: $\sum \alpha_j = 0$. Действительно, $\alpha_1 = \sum_{j=2}^{k} \beta_j$ и $\alpha_j = -\beta_j$ при $j > 1$. Равенство $\sum \alpha_j = 0$ эквивалентно тому, что $\langle \varphi^{as}, \psi^{as} \rangle = 0$. Таким образом, тот факт, что в окрестности бесконечности асимптотические решения образуют лагранжеву плоскость, является фундаментальным. Дальше легко показать, что эта плоскость задается k уравнениями, поэтому ее размерность не меньше k. С другой стороны, лагранжева плоскость не может иметь размерность больше k.

Поэтому оператор, сопоставляющий решениям их асимптотические значения, при любом λ задает k-мерное подпространство. У него может быть ядро: это такие собственные функции, у которых сосредоточены тождественные нули во всех хвостах. Они имеют интересные аналоги в геометрии, связанной со спектром, который изучался, начиная с Сельберга. Для графов общего положения их можно ликвидировать малым возмущением. Но для графов с групповой симметрией их ликвидировать нельзя.

Матрица рассеяния здесь строится таким образом. Выберем базис векторов лагранжевой плоскости в следующем виде:

$$\psi_j = \psi_{+,j} + \sum_q s_{jq}(\lambda) \psi_{-,j}.$$

Тогда $(s_{jq}(\lambda))$ —матрица рассеяния (по определению).

Если в лагранжевом пространстве выбран чисто вещественный базис, то матрица рассеяния S унитарная и симметрическая. Это можно пояснить следующим образом. Возьмем унитарную матрицу A и запишем матрицу S в виде $S = AA^t$. Посмотрим, сколько таких матриц. Если A заменить на AO, где матрица O принадлежит вещественной ортогональной группе, то AA^t заменится на $AOO^tA^t = AA^t$. Тем самым, $S \in U_k/O_k$. Известно, что множество всех лагранжевых плоскостей изоморфно именно U_k/O_k.

Дискретизированная прямая с полным набором коэффициентов впервые появилась при интегрировании так называемой цепочки Тода, и выяснилось, что такой оператор Шредингера обладает гораздо лучшими свойствами, чем те его частные случаи, которые рассматривались в вычислительной математике.