Лекция 14

Резольвента

Ниже мы введем понятия дискретного и непрерывного спектра и спектрального разложения оператора. Затем мы покажем, как можно использовать технику построения функций Грина для решения простейших спектральных задач.

14.1 Дискретный и непрерывный спектр

В конечномерном линейном пространстве и количество собственных значений и собственных векторов конечно.

Пример 14.1. В пространстве $\mathbb{C}^N$ задача на собственные значения для эрмитовой матрицы $\hat{A}$ $\hat{A}\psi_n = \lambda_n\psi_n$, где $\psi_n \in \mathbb{C}^N$ — вектор-столбец, а $\lambda_n \in \mathbb{R}$ — число, имеет N решений. Все они являются корнями характеристического уравнения $\det(\hat{A} - \lambda E) = 0$ степени N. Некоторые из собственных значений могут совпадать, тогда каждый корень надо считать столько раз, какова его кратность.

В бесконечномерном гильбертовом пространстве имеется уже счетное число собственных значений и собственных функций.

Пример 14.2. Пусть дифференциальный оператор

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}$$

действует на пространстве функций, которые обращаются в нуль на концах отрезка $[0, l]$: $\psi(0) = \psi(l) = 0$. Нормированные собственные функции и собственные значения тогда равны

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \pi n \frac{x}{l}, \quad \lambda_n = \frac{\pi^2 n^2}{l^2}, \quad n = 1, 2, \ldots.$$

Несколько функций показаны на рисунке 14.1. Такой спектр называют *дискретным* (или точечным) и обозначается σ_p.

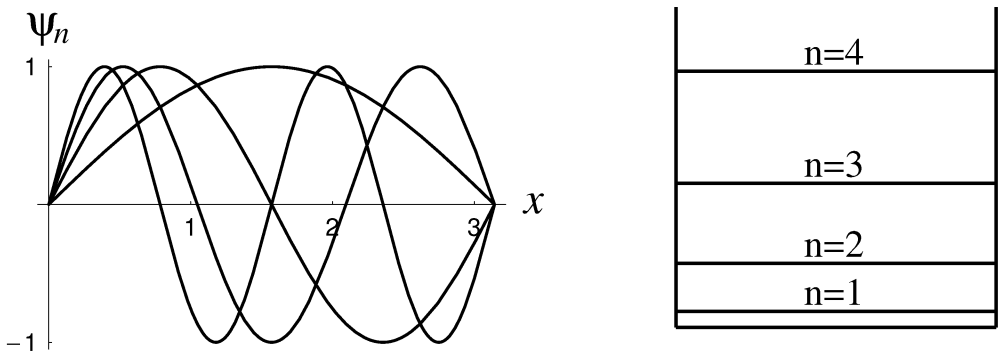


Рис. 14.1: Собственные функции ψ_n оператора $\hat{A}$ из примера 14.2, удовлетворяющие нулевым граничным условиям на концах отрезка $[0, \pi]$: $n = 1, 2, 3, 4$. Номер моды равен количеству нулей на $[0, \pi)$. Справа показаны собственные значения — уровни энергии в прямоугольной яме с бесконечными стенками.

Если область определения оператора некомпактна, то наряду с функциями дискретного спектра, появляются функции непрерывного спектра.

Пример 14.3. Попробуем найти собственные функции оператора

$$\hat{A} = -\mathrm{i}\frac{d}{dx},$$

принадлежащие $L^2(-\infty, \infty)$. Это значит, что функции должны достаточно быстро убывать на бесконечности, чтобы интеграл от квадрата модуля функции сходился. Можно проверить, что $\psi_k = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ удовлетворяет уравнению для собственных функций с собственным значением $k \in \mathbb{R}$. Однако такая функция не лежит в L^2, интеграл от квадрата ее модуля расходится.

Среди функций пространства L^2 решений нашей спектральной задачи нет, но решения имеются среди функций, близких к ψ_k. Если умножить на весовую функцию $w(k) \in L^2$ и проинтегрировать:

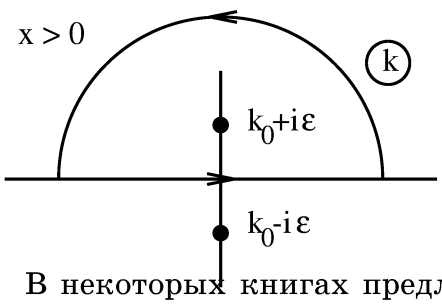
$$\Psi(x) = \int_{\sigma_c} w(k)\psi_k(x)\, dk,$$

где $\sigma_c = \mathbb{R}$, то интеграл уже лежит в нужном пространстве $\Psi \in L^2$.

Если выбрать весовую функцию (волновой пакет ширины $\Delta k = \epsilon$), локализованную вблизи некоторого $k = k_0$, то функция Ψ близка к функции ψ_k в сколь угодно большой области пространства $\Delta x \sim 1/\epsilon \to \infty, \epsilon \to 0$, но уже интегрируема вместе с квадратом. Такие собственные значения мы назовем *непрерывным спектром*, а множество таких значений будем обозначать σ_c. В данном примере $\sigma_c = \mathbb{R}$. Сами функции будем называть собственными функциями непрерывного спектра. Выберем, например,

$$w(k) = \frac{\epsilon/\pi}{(k - k_0)^2 + \epsilon^2}.$$

При малых положительных ϵ весовая функция переходит в $w(k) \to \delta(k-k_0)$. Пакет при $\epsilon \neq 0$ становится интегрируемым вместе с квадратом:



$$\Psi(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon/\pi}{(k-k_0)^2+\epsilon^2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} dk = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x - \epsilon|x|} \in L^2.$$

Интеграл вычисляется с помощью вычетов, причем правило замыкания контура зависит от знака x, поэтому в ответ входит $|x|$.

В некоторых книгах предлагается представлять себе непрерывный спектр оператора, как предел дискретного спектра из примера 14.2, когда размер ящика неограниченно возрастает $l \to \infty$. Расстояние между соседними собственными значениями $\lambda_{n+1} - \lambda_n = \pi^2(2n+1)/l^2$ при фиксированном n стремится к нулю и говорят, что собственные числа сливаются в непрерывный спектр. Такое вычисление надо делать аккуратно и следить за порядком предельных переходов.

Поскольку функции непрерывного спектра не лежат в L^2, их нормируют иначе

$$(\psi_k, \psi_{k'}) = \delta(k-k'),$$

это называется нормировкой *на δ-функцию*.

Вместе с функциями дискретного спектра функции непрерывного спектра эрмитова оператора образуют полную систему. Интегральное ядро можно разложить по этой системе.

$$\langle x|\hat{A}|x'\rangle = A(x,x') = \sum_n \lambda_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') + \sum_j \int_{\sigma_c} \lambda \psi_\lambda^{(j)}(x)\psi_\lambda^{(j)*}(x')\, d\lambda, \qquad \textbf{(14.1)}$$

где первая сумма дает известное нам разложение оператора по проекторам на базисные векторы дискретного спектра σ_p, а вторая представляет собой интеграл по непрерывному спектру σ_c. Сумма по j учитывает вырождение. Если собственному числу λ принадлежит несколько функций $\psi_\lambda^{(j)}(x)$, то надо просуммировать по всем j. В первой сумме вырождение учитывается автоматически: если есть несколько слагаемых с одинаковыми λ_n, то все они входят в разложение. Формула (14.1) называется *спектральным разложением* оператора.

14.2 Резольвента дифференциального оператора

Определение 14.1. *Резольвентой* называется интегральное ядро оператора

$$\hat{R}_z = (z-\hat{A})^{-1}, \quad R_z(x,x') = \langle x|\hat{R}_z|x'\rangle,$$

где z — комплексный параметр.

Перечислим простейшие свойства резольвенты.

1. Резольвента есть функция Грина для задачи

$$\left(z - \hat{A}\right) u(x) = f(x).$$

Задача разрешима, если z не принадлежит спектру оператора $\hat{A}$. Такие значение $z \notin \sigma(\hat{A})$ называются *резольвентным множеством* оператора.

2. Собственные функции резольвенты те же самые, что и у оператора $\hat{A}$. Это свойство получается простым вычислением:

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi \Rightarrow \left(z - \hat{A}\right)\psi = (z - \lambda)\,\psi \Rightarrow$$
$$\hat{R}_z\left(z - \hat{A}\right)\psi = \psi = (z - \lambda)\,\hat{R}_z\psi \Rightarrow \hat{R}_z\psi = \frac{\psi}{z - \lambda}.$$

Отсюда видно, что если λ собственные значения оператора $\hat{A}$, то собственные значения оператора $\hat{R}$ равны $1/(z - \lambda)$.

3. Спектральное разложение **(14.1)** резольвенты имеет вид

$$R_z(x, x') = \sum_{\sigma_p} \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{z - \lambda_n} + \int_{\sigma_c} \frac{d\lambda}{z - \lambda} \sum_j \psi_\lambda^{(j)}(x)\psi_\lambda^{(j)*}(x'). \qquad \textbf{(14.2)}$$

Данное свойство следует из предыдущего.

Из разложения **(14.2)** видно, что у резольвенты есть два типа особенностей: *полюсы* отдельных слагаемых суммы и *разрезы* в подынтегральном выражении. Полюсы отвечают дискретному спектру, а разрезы — непрерывному. Выведем формулы для вычета в полюсе и скачка резольвенты на разрезе.

Вычет в полюсе $z = \lambda_n$ вычисляется интегрированием **(14.2)** по z вдоль окружности малого радиуса, такого, чтобы внутрь попал только один полюс, и делением на $2\pi\mathrm{i}$:

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \oint R_z\, dz = \operatorname*{Res}_{z=\lambda_n} R_z(x, x') = \sum_j \psi_n^{(j)}(x)\psi_n^{(j)*}(x'), \qquad \textbf{(14.3)}$$

где суммирование ведется до кратности вырождения λ_n, то есть по всем функциям, принадлежащим данному собственному значению.

Чтобы найти скачок на разрезе, сначала вычислим скачок подынтегральной функции, т.е. разность ее значений на нижнем и верхнем берегах разреза

$$\lim_{\epsilon\to+0}\left(\frac{1}{\zeta - \mathrm{i}\epsilon} - \frac{1}{\zeta + \mathrm{i}\epsilon}\right) = \lim_{\epsilon\to+0}\frac{2\mathrm{i}\epsilon}{\zeta^2 + \epsilon^2} = 2\pi\mathrm{i}\delta(\zeta).$$

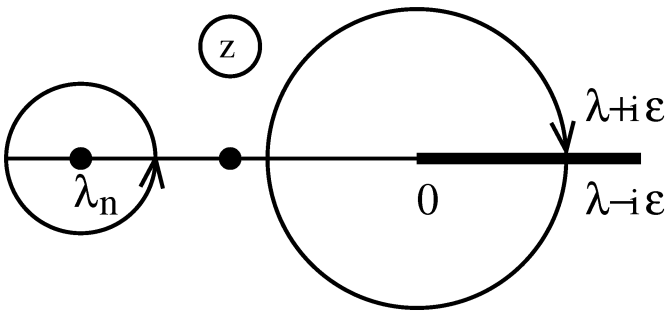


Рис. 14.2: Контур, по которому обходится полюс при вычислении вычета, и контур, по которому обходится разрез при расчете скачка ($\varepsilon \to +0$) .

Интеграл от дельта-функции берется, откуда при $\zeta = z - \lambda$ мы найдем скачок интеграла из формулы (14.2).

$$\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \left(R|_{z=\lambda-\mathrm{i}0} - R|_{z=\lambda+\mathrm{i}0} \right) = \sum_j \psi_\lambda^{(j)}(x) \psi_\lambda^{(j)*}(x'). \tag{14.4}$$

Обе формулы (14.3) и (14.4) получились похожими. Можно представлять себе скачок на разрезе как предел суммы вычетов. При неограниченном увеличении размера ящика полюсы сливаются в разрез. У эрмитова оператора все полюсы и разрезы расположены на вещественной оси.

Мы убедились, что в аналитических свойствах резольвенты содержится полная информация как о спектре (положение полюсов и разрезов), так и о собственных функциях дискретного и непрерывного спектра (вычеты в полюсах и скачки на разрезах). К сожалению, явно найти резольвенту удается только в небольшом количестве специальных симметричных случаев. Два из них мы рассмотрим в следующем разделе.

14.3 Построение резольвенты

Разберем два примера.

n=1

Пусть оператор одномерный

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2},$$

а $x \in \hat{R}$. Тогда по первому свойству резольвента удовлетворяет уравнению

$$\left(z + \frac{d^2}{dx^2} \right) R_z(x, x') = \delta(x - x').$$

Пользуясь трансляционной инвариантностью, положим $x' = 0$, и будем искать решение вида

$$R_z(x) = \begin{cases} B_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}x} + B_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sqrt{z}x}, & x < 0; \\ C_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}x} + C_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sqrt{z}x}, & x > 0. \end{cases}$$

Выберем арифметическую ветвь квадратного корня, на которой $\sqrt{1} = +1$.

Условия непрерывности функции и скачка производной дают пару уравнений на коэффициенты

$$B_1 + B_2 = C_1 + C_2, \quad (C_1 - C_2)\mathrm{i}\sqrt{z} - (B_1 - B_2)\mathrm{i}\sqrt{z} = 1.$$

Два других условия получим из граничных условий на бесконечности. Обозначим $z = k^2 + \mathrm{i}\epsilon$, $\sqrt{z} = k + \mathrm{i}\delta$, мы видим, что по определению арифметической ветви квадратного корня $\epsilon > 0 \Rightarrow \delta > 0$. Поэтому, чтобы функция $R_z(x)$ убывала при $x \to \pm\infty$, надо выбрать $B_1 = C_2 = 0$. Отсюда находим

$$C_1 = B_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}\sqrt{z}},$$

тогда искомая резольвента равна

$$R_z(x, x') = \frac{1}{2\mathrm{i}\sqrt{z}} \exp\left(\mathrm{i}\sqrt{z}|x - x'|\right). \tag{14.5}$$

Резольвента получилась аналитической функцией в плоскости z, разрезанной вдоль действительной положительной полуоси $\mathbb{R}_+$. Таким образом, у исходного оператора непрерывный спектр расположен на множестве $\sigma_c = \mathbb{R}_+$. Скачок резольвенты при переходе с нижнего берега разреза на верхний в точке $z = k^2$ можно найти, представив $z = k^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ и меняя аргумент α от 2π до 0, т.е. двигаясь вдоль окружности рис. 14.2 радиуса $R = k^2$ по часовой стрелке. Если $\alpha = 2\pi$, то $\sqrt{z} = -k$, а если $\alpha = 0$, то $\sqrt{z} = +k$, откуда

$$R_{k^2-\mathrm{i}0} - R_{k^2+\mathrm{i}0} = -\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|x-x'|}}{2\mathrm{i}k} - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x-x'|}}{2\mathrm{i}k} = -\frac{\cos k(x - x')}{\mathrm{i}k} = \frac{\mathrm{i}}{k}(\cos kx \cos kx' + \sin kx \sin kx').$$

Теперь разделим на $2\pi\mathrm{i}$ и найдем две нормированные собственные функции

$$\psi_{k^2}^{(1)} = \frac{\cos kx}{\sqrt{2\pi k}}, \quad \psi_{k^2}^{(2)} = \frac{\sin kx}{\sqrt{2\pi k}}.$$

Собственное значение $\lambda = k^2$ непрерывного спектра оказалось двукратно вырожденным, как и следовало ожидать.

Упражнение 14.1. Убедитесь, что получившиеся собственные функции непрерывного спектра нормированы на δ-функцию. Проверьте полноту системы собственных функций.

n=3

Пусть оператор трехмерный

$$\hat{A} = -\triangle,$$

но нас интересует только изотропное решение (s-волна). Уравнение для резольвенты следует из первого свойства

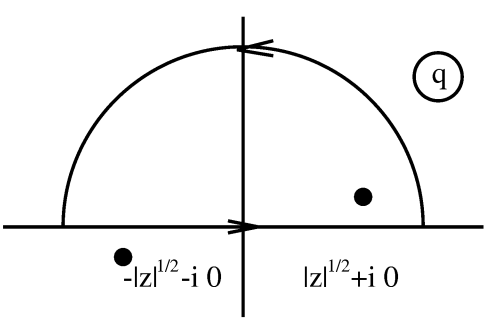
$$(z + \triangle)R_z = \delta(\mathbf{r}),$$

где мы уже положили $\mathbf{r}' = 0$. Преобразование Фурье позволяет сразу найти решение в $\mathbf{q}$-представлении (мы обозначили волновой вектор буквой $\mathbf{q}$)

$$R_{z\,\mathbf{q}} = \frac{1}{z - q^2}.$$

Выполняя обратное преобразование, мы можем сразу вычислить интегралы по углам и перейти к бесконечным пределам, как при вычислении запаздывающей функции Грина волнового уравнения,

$$R_z(\mathbf{r}) = \int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\mathbf{r}}}{z - q^2}\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^2}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr}}{\mathrm{i}r}\frac{q\,dq}{z - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^2\mathrm{i}r}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{q\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}\,dq}{z - q^2}.$$



Чтобы полюсы подынтегрального выражения $q_{1,2} = \pm\sqrt{z}$ не попали на контур интегрирования, нам надо считать, что z имеет малую положительную мнимую часть $z = |z| + \mathrm{i}0$. Тогда правило замыкания контура определяется положительностью r, а резольвента получается в точности, как функция Грина G^+ уравнения Гельмгольца в виде расходящейся волны (12.4):

$$R_z(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Если выбрать z положительным вещественным и прибавить малую отрицательную мнимую часть $z = |z| - \mathrm{i}0$, то правый полюс окажется в нижней полуплоскости и не внесет вклада в интеграл, а вычет в левом полюсе даст сходящуюся волну G^-. Когда $z = |z|$ положительное вещественное число, оба полюса в q-плоскости лежат на контуре интегрирования и резольвента не определена. Значит разрез в z-плоскости надо провести по положительной действительной оси. Как и в предыдущем примере, резольвентное множество — комплексная плоскость, с разрезом вдоль $\mathbb{R}_+$, а непрерывный спектр совпадает с разрезом $\sigma_c = \mathbb{R}_+$.

Чтобы найти изотропную часть, остается проинтегрировать по углам и разделить на 4π

$$g(r,r') = \langle R_z \rangle_o = \int R_z(\mathbf{r},\mathbf{r}')\frac{do}{4\pi} = \frac{1}{2}\int\limits_0^\pi \frac{\sin\theta\, d\theta\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\theta}}}{\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\theta}}.$$

Получившийся интеграл вычисляется заменами $t = r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\theta = \xi^2$:

$$g = \frac{1}{2}\int\limits_{(r-r')^2}^{(r+r')^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{zt}}}{\sqrt{t}}\frac{dt}{2rr'} = \frac{1}{2rr'}\int\limits_{|r-r'|}^{r+r'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}\xi}\, d\xi$$

и равен

$$g = \frac{1}{rr'\sqrt{z}}\begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}r}\sin\sqrt{z}r', & r < r'; \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}r'}\sin\sqrt{z}r, & r > r.' \end{cases}$$

Теперь можно найти скачок на разрезе при переходе с нижнего берега $z = k^2 - \mathrm{i}\varepsilon$ на верхний $z = k^2 + \mathrm{i}\varepsilon$ ($\varepsilon \to +0$):

$$g|_{k^2-\mathrm{i}0} - g|_{k^2+\mathrm{i}0} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{z}r_<}}{rr'\sqrt{z}}\sin\sqrt{z}r_>\Bigg|_{k^2+\mathrm{i}0}^{k^2-\mathrm{i}0} = 2\mathrm{i}\frac{\sin kr\sin kr'}{krr'},$$

откуда можно найти нормированную собственную функцию

$$\psi_{k^2}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi k}}\frac{\sin kr}{r}.$$

Как и следовало ожидать, собственные функции непрерывного спектра выражаются через функции Бесселя с полуцелым индексом, простейшая из которых $J_{1/2}$ и получилась при $l = 0$.

Упражнение 14.2. Проверьте ортогональность собственных функций.