Современная математика. Фундаментальные направления. Том 68, № 4 (2022). С. 704–715
Contemporary Mathematics. Fundamental Directions. ISSN 2413-3639 (print), 2949-0618 (online)

DOI 10.22363/2413-3639-2022-68-4-704-715
УДК 517.958

КОМПЛЕКСНЫЙ РОСТОК МАСЛОВА И КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ СЖАТЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЗАДАЧЕ КОШИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ДЕЛЬТА-ПОТЕНЦИАЛОМ

А. И. Шафаревич, О. А. Щегорцова

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия

Описана квазиклассическая асимптотика решения задачи Коши для уравнения Шредингера с дельта-потенциалом, локализованным на поверхности коразмерности 1. Оператор Шредингера с дельта-потенциалом определяется при помощи теории расширений и задается краевыми условиями на этой поверхности. Начальные данные выбираются в виде узкого пика, представляющего собой гауссов пакет, локализованный в малой окрестности точки. Для построения асимптотики используется метод комплексного ростка Маслова. Описывается отражение комплексного ростка от носителя дельта-потенциала.

Ключевые слова: уравнение Шредингера с дельта-потенциалом, квазиклассическая асимптотика решения, метод комплексного ростка Маслова

Для цитирования: *А. И. Шафаревич, О. А. Щегорцова.* Комплексный росток Маслова и квазиклассические сжатые состояния в задаче Коши для уравнения Шредингера с дельта-потенциалом// Соврем. мат. Фундам. направл. 2022. Т. **68**, № 4. С. 704–715. `http://doi.org/10.22363/2413-3639-2022-68-4-704-715`

1. Введение и постановка задачи

Операторы Шредингера с дельта-потенциалами широко применяются в различных физических и математических задачах; в частности, для описания сильно локализованных полей, порожденных точечными дефектами в материалах. Одной из первых работ, где такие потенциалы применялись к изучению движения электрона в кристаллической решетке, является работа [10], в которой потенциал представляет собой периодическую цепочку дельта-функций. Строгое математическое определение операторов с дельта-потенциалом было дано Ф. А. Березиным и Л. Д. Фаддеевым в работе [1], где было предложено использовать подход, основанный на теории расширений. Теории операторов с точечными потенциалами посвящен ряд монографий; см., например, [8, 9] и цитированную там литературу.

Теория комплексного ростка Маслова (см. [2, 3]) позволяет описывать квазиклассические асимптотические решения уравнений с гладкими коэффициентами, локализованные в малой окрестности подмногообразия положительной коразмерности. В простейших ситуациях такие решения описываются функциями $e^{iS(x,t)/h}\varphi(x,t,h)$, где h — квазиклассический малый параметр, фаза S комплексна и $\Im S \geqslant 0$ (указанное многообразие задается уравнением $\Im S = 0$). В общем случае для описания решения используются геометрические объекты — комплексные векторные расслоения над изотопными поверхностями. Если коэффициенты уравнения содержат

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-71-00050).

особенности, теория Маслова впрямую неприменима; в частности, соответствующие геометрические объекты должны перестраиваться в точках носителя особенностей коэффициентов. Ниже описана такая перестройка в случае задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера с потенциалом, содержащим особенность типа δ-функции, локализованной на поверхности коразмерности 1. В начальный момент времени волновая функция задается в виде узкого пика, представляющего собой гауссов пакет, локализованный в малой окрестности точки. Близкие задачи, связанные с квазиклассическими асимптотиками с вещественными фазами, изучались в работах [5–7, 11]; в частности, в этих работах описаны перестройки лагранжевых поверхностей, определяющих решение, в точках носителя дельта-потенциала. Отметим, что лагранжевы поверхности преобразуются самым естественным образом — «по законам геометрической оптики»; в то же время, перестройка комплексного ростка, описанная в настоящей работе, нетривиальна и оказывается связана с геометрией поверхности-носителя.

Пусть $x \in \mathbb{R}^n$, а δ_M — δ-функция, определенная на поверхности M. Будем считать, что $M \in \mathbb{R}^n$ — гладкое $(n-1)$-мерное ориентированное подмногообразие.

Рассмотрим задачу Коши для уравнения Шредингера:

$$\begin{cases} ih\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = -\dfrac{h^2}{2}\Delta\psi + V(x)\psi + \dfrac{q(y)}{h}\delta_M\psi, \\ \psi(x,0) = \widetilde{A}e^{i\frac{S_0(x)}{h}}. \end{cases} \tag{1.1}$$

Здесь $V(x)$ — гладкая вещественная функция в $\mathbb{R}^n$ (для определенности будем считать, что эта функция равна константе вне некоторого компакта — это предположение никак не влияет на конструкцию асимптотики), а $q(y)$ — гладкая вещественная функция, заданная на поверхности M; $y = (y_1, y_2, \dots, y_{n-1})$ — локальные координаты на M; $h > 0$ — малый квазиклассический параметр. Начальные условия заданы в виде гауссова пучка: амплитуда имеет вид $\widetilde{A} = h^{-\frac{n}{4}}A$, $A \in \mathbb{R}$, начальная фаза $S_0(x)$ — гладкая комплекснозначная функция, заданная формулой

$$S_0(x) = s_0 + < p_0, x - x_0 > + \frac{1}{2} < x - x_0, Q_0(x - x_0) >, \tag{1.2}$$

где $s_0 \in \mathbb{R}$, $p_0 \in \mathbb{R}^n$, Q_0 — симметричная матрица размера $n \times n$ с элементами из $\mathbb{C}$, причем $\Im Q_0 > 0$. Угловыми скобками здесь и всюду далее обозначена стандартная билинейная форма (сумма произведений соответствующих координат) над полем комплексных чисел. Нормировочный множитель $h^{-n/4}$ введен для того, чтобы гарантировать оценку начальной функции $\|\psi(x,0)\|_{L_2} = O(1)$.

Оператор

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

введем как самосопряженное расширение оператора с гладким потенциалом $\hat{H}_0 = -\dfrac{h^2}{2}\Delta + V(x)$, ограниченного на функции, равные нулю на M. Зададим область определения такого оператора краевыми условиями

$$\begin{cases} \psi(r(y)-0,t) = \psi(r(y)+0,t), \\ h\Big(\dfrac{\partial\psi}{\partial\nu}(r(y)-0,t) - \frac{\partial\psi}{\partial\nu}(r(y)+0,t)\Big) = q(y)\psi(r(y),t). \end{cases} \tag{1.3}$$

Здесь $x = r(y)M$ — параметрические уравнения, задающие поверхность M, $\psi(r(y) \pm 0, t)$ — пределы функции ψ с положительной и отрицательной сторон от этой поверхности, $\nu = \nu(y)$ — ориентирующая единичная нормаль к M.

Замечание 1.1. Всюду далее мы считаем, что точка x_0 не лежит на поверхности M; чтобы начальная функция $\psi(x,0)$ удовлетворяла краевым условиям, ее надо домножить на гладкую финитную функцию, равную единице в некоторой не зависящей от h окрестности точки x_0 и такой, что ее носитель не пересекается с M. Такое домножение приведет к изменению начальной функции и всего асимптотического решения на величину $O(h^\infty)$; в дальнейшем мы считаем, что эта процедура выполнена, причем для упрощения формул не будем явно выписывать указанную срезающую функцию.

Ниже описана асимптотика при $h \to +0$ решения задачи Коши (1.1). Начальный гауссов пучок распространяется в пространстве и взаимодействует с дельта-потенциалом. После взаимодействия он разбивается на две части, одна из которых проходит дальше, а другая отражается; мы описываем эволюцию прошедшей и отраженной частей гауссова пучка, а также правила склейки этих частей в точках поверхности M.

Замечание 1.2. В каждый момент времени асимптотическое решение представляет собой функцию, локализованную в малой окрестности одной или двух точек в $\mathbb{R}^n$ и экспоненциально малое вне любой не зависящей от h окрестности этих точек. В частности, на любом конечном отрезке времени решение экспоненциально мало вне некоторого шара. Будем считать, что поверхность M делит этот шар на две части — положительную и отрицательную (относительно нормали ν); в действительности на асимптотику, описанную ниже, влияет лишь сколь угодно малая окрестность одной точки M (точки пересечения этой поверхности с траекторией классической системы Гамильтона, выпущенной из точки x_0 с начальным импульсом p_0).

Работа имеет следующую структуру. В разделе 2 мы напоминаем конструкцию асимптотики решения задачи с гладким потенциалом. В разделе 3 получено решение задачи с потенциалом, содержащим дельта-функцию.

2. Задача Коши с гладким потенциалом

Напомним структуру асимптотического решения уравнения Шредингера с гладким потенциалом (т. е. в этом разделе мы считаем, что $q \equiv 0$). В этом случае задача Коши имеет вид

$$\begin{cases} ih\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = -\dfrac{h^2}{2}\Delta\psi + V(x)\psi, \\ \psi(x,0) = \widetilde{A}e^{\frac{i}{h}S_0(x)}, \end{cases} \tag{2.1}$$

и все функции определены так же, как и для (1.1).

Покажем, что решение задачи (2.1) разлагается в асимптотический ряд

$$\psi(x,t,h) \sim h^{-n/4}e^{i\frac{S(x,t)}{h}}\sum_{k=0}^{\infty}\varphi_k\Big(\frac{x-X(t)}{h^{1/2}},t\Big)h^{k/2},$$

$$S(x,t) = \sigma(t) + < P(t), x - X(t) > + < x - X(t), Q(t)(x - X(t)) >,$$

где $h^{-n/4}$ — нормировочный множитель. Для этого введем новую переменную $z = \dfrac{x - X(t)}{h^{1/2}}$. Уравнение Шредингера имеет вид

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t} - ih^{1/2} < \dot{X}, \frac{\partial\psi}{\partial z} >= -\frac{h}{2}\Delta_z\psi + V(z,t)\psi,$$

где $V(z,t) = V(h^{1/2}z + X(t))$. Вместо потенциала $V(z,t)$ рассмотрим его разложение в ряд Тейлора в окрестности точки $z = 0$:

$$V(z,t) \sim V(X(t)) + \sum_{k>0}\frac{1}{k!}\sum_{|s|=k}\frac{\partial^k V}{\partial z^s}\Big|_{z=0}z^s.$$

Заметим, что k-ые производные по z выражаются через производные x как

$$\frac{\partial^k V(z,t)}{\partial z^m}\Big|_{z=0} = h^{k/2}\frac{\partial^k V(x)}{\partial x^m}\Big|_{x=X(t)}$$

(m — мультииндекс, $|m| = k$). В новых координатах функция $\psi(x,t,h)$, определенная выше, принимает вид

$$\psi(z,t,h) \sim h^{-n/4}e^{iS(z,t)/h}\sum_{k=0}^{N}\varphi_k(z,t)h^{k/2},$$

$$S(z,t) = \sigma(t) + h^{1/2} < P(t), z > + \frac{h}{2} < z, Q(t)z > .$$

Подставив $\psi(z,t,h)$ в уравнение Шредингера (2.1), получим

$$\begin{aligned}
&h^{-n/4}\Big(\dot\sigma - <\dot X, P> + \frac{1}{2} <P,P> + V(X)\Big)\sum_k \varphi_k h^{k/2} + \\
&+ h^{-n/4}h^{1/2}\Big(<\dot P, z> - <\dot X, Qz> + <P, Qz> + <\nabla_x V(X), z> \Big)\sum_k \varphi_k h^{k/2} + \\
&+ ih^{-n/4}h^{1/2}\sum_k <\dot X - P, \frac{\partial\varphi_k}{\partial z}> h^{k/2} + \\
&+ h^{-n/4}\frac{h}{2}\Big(<z,\dot Q z> + <Qz,Qz> + <z, V_{xx}(X))z> \Big)\sum_k \varphi_k h^{k/2} - \\
&- ih^{-n/4}h\sum_k \Big(\frac{\partial\varphi_k}{\partial t} + <Qz, \frac{\partial\varphi_k}{\partial z}> + \frac{1}{2}\operatorname{tr} Q\varphi_k - \frac{i}{2}\Delta\varphi_k\Big)h^{k/2} + \\
&+ h^{-n/4}\sum_{k\geqslant 3}\frac{1}{k!}\sum_{|m|=k} h^{k/2}\frac{\partial^k V}{\partial x^m}(X) z^m \sum_j \varphi_j h^{j/2} = 0.
\end{aligned}$$

Последнее слагаемое можно переписать в форме

$$h^{-n/4}h\sum_{k\geqslant 1} h^{\frac{k}{2}}\sum_{s=0}^{k}\frac{\varphi_s}{(k-s+2)!}\sum_{\substack{|m|=k-s+2\\ |m|>2}}\frac{\partial^{|m|}V}{\partial x^m}(X)z^m + U_{N+1}, \quad \|U_{N+1}\|_{L_2} = O(h^{\frac{N+3}{2}}).$$

Собирая коэффициенты при различных степенях $h^{k/2}$ и опуская нормировочный коэффициент $h^{-n/4}$, получим уравнения на функции $\sigma(t)$, $X(t)$, $P(t)$, $Q(t)$, $\varphi_k(z,t)$.

Выписав слагаемые при h^0, получим, что функция $\sigma(t)$ должна удовлетворять уравнению:

$$\begin{cases}\dot\sigma(t) = <\dot X(t), P(t)> - H(X(t),P(t)),\\ \sigma(0) = S_0(x_0) = s_0,\end{cases} \tag{2.2}$$

где $H(x,p) = p^2/2 + V(x)$.

Рассмотрим задачу Коши для гамильтоновой системы

$$\dot x = H_p, \quad \dot p = -H_x, \quad x(0) = x_0, \quad p(0) = p_0;$$

пусть $\{x = X(t), p = P(t)\}$ — решение этой задачи (траектория в фазовом пространстве $\mathbb{R}^{2n}_{(x,p)}$). Тогда $\sigma(t)$ определяется формулой

$$\sigma(t) = S_0(x_0) + \int\limits_0^t \Big(\frac{p^2}{2} - V(x)\Big)\Big|_{x=X(\tau),p=P(\tau)} d\tau.$$

Рассматривая слагаемые при h^1, получим уравнения на функции $Q(t)$ и $\varphi_0(z,t)$. Функция $Q(t)$ представляет собой симметричную комплекснозначную матрицу размера $n\times n$ и удовлетворяет уравнению

$$<z,\dot Q z> + <Qz,Qz> + <z, V_{xx}(X(t))z> = 0,$$

или в матричном виде

$$\dot Q + Q^2 + H_{xx}(X(t),P(t)) = 0, \quad Q(0) = Q_0. \tag{2.3}$$

Известно, что решение такого уравнения имеет вид $Q(t) = B(t)(C(t))^{-1}$, где $B(t)$ и $C(t)$ — решения системы в вариациях в матричной форме

$$\dot C = H_{pp}B + H_{px}C = B, \qquad \dot B = -H_{xx}C - H_{xp}B = -V_{xx}(X)C, \quad C(0) = E, \qquad B(0) = Q_0.$$

Рассмотрим оставшиеся слагаемые при h^1 и h^k, $k > 1$. Старшая часть амплитуды φ_0 и поправки к ней φ_k $(k > 0)$ должны удовлетворять уравнениям переноса

$$\dot{\varphi}_k + < Q(t)z, \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} > + \frac{1}{2}\operatorname{tr} Q(t)\varphi_k - \frac{i}{2}\Delta_z \varphi_k = \Phi_{k-1},$$

$$\Phi_{-1} = 0, \quad \Phi_k(z,t) = -i\sum_{j=0}^{N} \frac{\varphi_j}{(k-j+2)!} \sum_{\substack{|m|=k-j+2 \\ |m|>2}} \frac{\partial^{|m|} V}{\partial x^m}(X) z^m, \quad k \geqslant 0$$

и начальным условиям $\varphi_0(z,0) = A$, $\varphi_k(z,0) = 0$. Решения этих уравнений — многочлены по переменным z. Таким образом, получаем следующее предложение.

Предложение 2.1 (ср. с [3, лемма 3.12]). *На любом конечном (не зависящем от h) промежутке времени $t \in [0,T]$ функция*

$$\psi_N(x,t,h) = h^{-n/4} e^{i\frac{S(x,t)}{h}} \sum_{k=0}^{N} \varphi_k\Big(\frac{x - X(t)}{h^{1/2}}, t\Big) h^{k/2}$$

удовлетворяет уравнению (2.1) *с точностью до функции ω, где $\|\omega\|_{L_2} = O(h^{\frac{N+1}{2}})$, и точно удовлетворяет начальному условию.*

Учитывая самосопряженность оператора Шредингера, получаем следствие.

Следствие 2.1. *Точное решение ψ задачи* (2.1) *при $t \in [0,T]$ имеет вид $\psi = \psi_N + O(h^{\frac{N-1}{2}})$.*

3. Потенциал с особенностью типа δ-функции

Перейдем к описанию асимптотики при наличии дельта-потенциала. Влияние особенности заключается в том, что при взаимодействии с дельта-потенциалом гауссов пучок разбивается на две части, одна из которых отражается от поверхности-носителя дельта-функции, а другая проходит дальше. Решение задачи строится в виде суммы трех функций, отвечающих падающей, отраженной и прошедшей волнам. Падающий и отраженный пучки определяются с отрицательной стороны от поверхности M, тогда как прошедшая — с положительной. Для этих функций используются обозначения $\{+, -, \hat{}\}$.

Сформулируем результат. Рассмотрим траекторию $\{X^+(t), P^+(t)\}$ гамильтоновой системы с гамильтонианом $H(x,p) = p^2/2 + V(x)$, заданную условиями

$$X^+(0) = x_0, \quad P^+(0) = p_0. \tag{3.1}$$

Пусть точка x_0 лежит с отрицательной стороны от поверхности M и за промежуток времени $t \in [0,T]$ проекция $X^+(t)$ траектории на пространство $\mathbb{R}^n_x$ пересекает M в единственной точке $x = r(y_0) = X^+(t_0)$, причем вектор $\dot{X}^+(t_0)$ не касается M. Обозначим через $\{X^-(t), P^-(t)\}$ «отраженную» траекторию той же системы — она задается условиями

$$X^-(t_0) = X^+(t_0), \quad P^-_n(t_0) = -P^+_n(t_0), \quad P^-_\tau(t_0) = P^+_\tau(t_0), \tag{3.2}$$

где $P^+_n(t_0)$ и $P^+_\tau(t_0)$ — нормальная и касательная к поверхности M компоненты вектора $P^+(t_0)$ в точке $x = r(y_0)$.

Рассмотрим систему в вариациях

$$\dot{C} = B, \quad \dot{B} = -V_{xx}(X^+(t))C \tag{3.3}$$

и определим матричные функции $B^+(t)$ и $C^+(t)$ размера $n \times n$, составленные из вектор-столбцов решений этой системы (3.3), и заданные начальными условиями

$$C^+(0) = E, \quad B^+(0) = Q_0.$$

Пусть $Q^+(t) = B^+(C^+)^{-1}$; определим симметричную матрицу $Q^-(t_0)$ равенствами

$$\begin{cases} < r_i, Q^-(t_0) r_j > = < r_i, Q^+(t_0) r_i > + < r_{ij}, p^+ - p^- >, \\ < p^-, Q^-(t_0) p^- > = < p^+, Q^+(t_0) p^+ > + < \dfrac{\partial V}{\partial x}(r(y_0)), p^+ - p^- >, \\ < p^-, Q^-(t_0) r_i > = < p^+, Q^+(t_0) r_i > . \end{cases} \tag{3.4}$$

Здесь $r_i = \dfrac{\partial r}{\partial y^i}(y_0)$, $r_{ij} = \dfrac{\partial^2 r}{\partial y^i \partial y^j}(y_0)$, $p^+ = P^+(t_0)$ и $p^- = P^-(t_0)$.

Замечание 3.1. Из приведенных равенств следует, что ограничение формы $Q^-(t_0)$ на касательную плоскость к M получается из ограничения формы $Q^+(t_0)$ сдвигом на вторую фундаментальную форму b поверхности M:

$$Q^-(t_0)|_{T_{r(y_0)}M} = Q^-(t_0)|_{T_{r(y_0)}M} + 2P_n^+(t_0)b(r(y_0)).$$

Определим матричные функции $B^-(t)$ и $C^-(t)$ как решения системы в вариациях

$$\dot{C} = B, \quad \dot{B} = -V_{xx}(X^-(t))C, \tag{3.5}$$

определенные условиями

$$B^-(t_0) = Q^-(t_0), \qquad C^-(t_0) = E. \tag{3.6}$$

Введем функции $\sigma^+(t_0)$, $\sigma^-(t_0)$, $\hat{\sigma}(t)$:

$$\begin{gathered}\hat{\sigma}(t) = \sigma^+(t) = S_0(x_0) + \int\limits_0^t \Big(\frac{p^2}{2} - V(x)\Big)\Big|_{x=X^+(\tau),p=P^+(\tau)} d\tau, \\ \sigma^-(t) = \sigma^+(t_0) + \int\limits_{t_0}^t \Big(\frac{p^2}{2} - V(x)\Big)\Big|_{x=X^-(\tau),p=P^-(\tau)} d\tau.\end{gathered} \tag{3.7}$$

Определим функции S^+, S^- и $\hat{S}$ (фазы падающей, отраженной и прошедшей волн) следующим образом:

$$\begin{gathered}S^+(x,t) = \hat{S}(x,t) = \sigma^+(t) + < P^+(t), x - X^+(t) > + \frac{1}{2} < x - X^+(t), Q^+(t)(x - X^+(t)) >, \\ S^-(x,t) = \sigma^-(t) + < P^-(t), x - X^-(t) > + \frac{1}{2} < x - X^-(t), Q^-(t)(x - X^-(t)) >,\end{gathered} \tag{3.8}$$

где $Q^+(t) = B^+(t)(C^+(t))^{-1}$ и $Q^-(t) = B^-(t)(C^-(t))^{-1}$.

Введем новые переменные

$$z^+ = \frac{x - X^+(t)}{h^{1/2}}, \qquad z^- = \frac{x - X^-(t)}{h^{1/2}}$$

и рассмотрим функции $\varphi_k^+(z^+,t)$, $\varphi_k^-(z^-,t)$, $\hat{\varphi}_k^-(z^+,t)$ (старшие части амплитуд падающего, отраженного и прошедшего пучков ($k=0$) и поправки к ним ($k>0$)), удовлетворяющие уравнениям переноса

$$\begin{gathered}\dot{\varphi}_k + < Q(t)z, \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} > + \operatorname{tr} Q(t)\varphi_k - \frac{i}{2}\Delta_z \varphi_k = \Phi_{k-1}, \\ \Phi_{-1} = 0, \quad \Phi_k(z,t) = -i\sum_{j=0}^{k} \frac{\varphi_j}{(k+3-j)!} \sum_{|m|=k+3-j} \frac{\partial^{|m|} V}{\partial x^m}(X(t))z^m, \quad k = \overline{0,N}.\end{gathered} \tag{3.9}$$

Здесь для краткости опущены индексы, различающие три пучка. Для падающего пучка в начальный момент времени $t = 0$ амплитуда совпадает с начальным условием: $\varphi_0^+(z^+,0) = A$, $\varphi_k^+(z^+,0) = 0$. Для отраженного и прошедшего пучков амплитуды определим с помощью условий в точке t_0. Для этого введем n-мерный вектор $\xi = (y - y_0, t - t_0)h^{-1/2}$, тогда $z^\pm|_M \sim z_1^\pm(\xi) + \sum\limits_{i=2}^{\infty} z_k^\pm(\xi)h^{\frac{k-1}{2}}$ (асимптотический ряд), где $z_k^\pm$ — однородные многочлены от ξ степени k. Потребуем от $\varphi_k^+(z^+,t)$, $\varphi_k^-(z^-,t)$, $\hat{\varphi}_k^-(z^+,t)$ выполнения следующих условий

$$\varphi_k^-(z_1^-,t_0) = \frac{-q(y_0)\varphi_k^+(z_1^+,t_0) + u_k(\xi)}{2iP_n^+(t_0) + q(y_0)}, \quad \hat{\varphi}_k(z_1^+,t_0) = \frac{2iP_n^+(t_0)\varphi_k^+(z_1^+,t_0) + v_k(\xi)}{2iP_n^+(t_0) + q(y_0)}. \tag{3.10}$$

Здесь $u_k(\xi)$ и $v_k(\xi)$ — многочлены от ξ, которые выражаются через амплитуды φ с предыдущими номерами $(0,\dots,k-1)$, причем $u_0 = v_0 = 0$; они описаны ниже при доказательстве теоремы.

Решения $\varphi_k(z,t)$ задач Коши (3.9)–(3.10) представляют собой многочлены от переменным z степени $3k$.

Определим функцию

$$\Psi(x,t,h)=\begin{cases} h^{-n/4}e^{iS^+(x,t)/h}\sum\limits_{k=0}^{N}\varphi_k^+(\frac{x-X^+(t)}{h^{1/2}},t)h^{k/2}+h^{-n/4}e^{iS^-(x,t)/h}\sum\limits_{k=0}^{N}\varphi_k^-(\frac{x-X^-(t)}{h^{1/2}},t)h^{k/2} \\ \quad\text{с отрицательной стороны поверхности } M, \\ h^{-n/4}e^{i\hat S(x,t)/h}\sum\limits_{k=1}^{N}\hat\varphi_k\Big(\dfrac{x-X^+(t)}{h^{1/2}},t\Big)h^{k/2}+\omega \\ \quad\text{с положительной стороны поверхности } M, \end{cases} \tag{3.11}$$

где функция ω определена ниже (см. доказательство теоремы), причем $||\omega||_{L^2}=O(h^{\frac{N}{2}})$.

Теорема 3.1. *Решение задачи Коши* (1.1) *при* $t\in[t_0,T]$ *представимо в виде* $\psi=\Psi+\varkappa$, *где* $\|\varkappa\|_{L_2}=O(h^{\frac{N}{2}-1})$.

Доказательство. Обозначим через $\hat L$ нестационарный оператор Шредингера с гладким потенциалом:

$$\hat L=-ih\frac{\partial}{\partial t}-\frac{h^2}{2}\Delta+V(x). \tag{3.12}$$

1. Докажем, что при $\omega=0$ построенная функция $\Psi(x,t,h)$ вне поверхности M удовлетворяет уравнению $\hat L\Psi=O(h^{\frac{N+3}{2}})$ (здесь и далее все оценки понимаются в норме пространства L_2). Сделаем замену переменных $z^j=(x-X^j(t))h^{-1/2}$ (здесь и далее индексом $j\in\{1,2,3\}$ переобозначены символы $\{+,-,\hat{}\}$), в новых переменных оператор $\hat L$ принимает вид $\hat L=-ih\dfrac{\partial}{\partial t}+ih^{1/2}<\dot X,\dfrac{\partial}{\partial z}>-\dfrac{h}{2}\Delta_z+V(X+h^{1/2}z)$. Рассмотрим действие оператора $\hat L$ на функцию $\Psi(z,t,h)$. Получим

$$\begin{aligned}\hat L\Psi=h^{-n/4}\sum_{j=1}^{3}e^{iS^j/h}\Big[&\Big(\dot\sigma^j-<\dot X^j,P^j>+\frac12<P^j,P^j>+V(X^j)\Big)\sum_{k=0}^{N}\varphi_k^jh^{k/2}+\\ &+h^{-n/4}h^{1/2}\Big(<\dot P^j,z^j>-<\dot X^j,Qz^j>+<P^j,Q^jz^j>+<\nabla_xV(X^j),z^j>\Big)\sum_{k=0}^{N}\varphi_k^jh^{k/2}+\\ &+ih^{-n/4}h^{1/2}\sum_{k=0}^{N}<\dot X^j-P^j,\frac{\partial\varphi_k^j}{\partial z}>h^{k/2}+\\ &+h^{-n/4}\frac{h}{2}\Big(<z,\dot Q^jz>+<Q^jz,Q^jz>+<z,\Delta_xV(X)z>\Big)\sum_{k=0}^{N}\varphi_k^jh^{k/2}-\\ &-ih^{-n/4}h\sum_{k=0}^{N}\Big(\frac{\partial\varphi_k^j}{\partial t}+<Q^jz,\frac{\partial\varphi_k^j}{\partial z}>+\operatorname{tr}Q^j\varphi_k^j-\frac{i}{2}\Delta\varphi_k^j\Big)h^{k/2}+\\ &+h^{-n/4}\sum_{k\geqslant3}\frac{1}{k!}\sum_{|m|=k}h^{k/2}\frac{\partial^kV}{\partial x^m}(X^j)z^m\sum_{l=0}^{N}\varphi_l^jh^{l/2}\Big],\\ S^{\pm}(z,t)=\sigma^j(t)+h^{1/2}&<P^j(t),z>+\frac{h}{2}<z,Q^jz>.\end{aligned}$$

Здесь и далее индексы при переменных z^j опущены для упрощения записи.

Поскольку (X^j,P^j) — траектории системы Гамильтона, (B^j,C^j) — решения системы в вариациях, а σ^j определены формулами (3.7), то соответствующие слагаемые обращаются в нуль и

$$\hat L\Psi=h^{-n/4}\sum_{j=1}^{3}e^{iS^j/h}\Big[-ih\sum_{k=0}^{N}\Big(\frac{\partial\varphi_k^j}{\partial t}+<Qz,\frac{\partial\varphi_k^j}{\partial z}>+\operatorname{tr}Q^j\varphi_k^j-\frac{i}{2}\Delta\varphi_k^j\Big)h^{k/2}+$$

$$+ h^{-n/4} \sum_{k\geqslant 3} \frac{1}{k!} \sum_{|m|=k} h^{k/2} \frac{\partial^k V}{\partial x^m}(X^j) z^m \sum_{l=0}^{N} \varphi_l^j h^{l/2} \Big].$$

В силу того, что φ_k^j — решения соответствующих уравнений переноса, получим

$$\hat{L}\Psi = h^{-n/4} h \sum_{k=N+1}^{\infty} h^{\frac{k}{2}} \sum_{j=0}^{k} \frac{\varphi_j^i}{(k-j+2)!} \sum_{|m|=k-j+2} \frac{\partial^{|m|} V}{\partial x^m}(X(t)) z^m,$$

$$\|\hat{L}\Psi\|_{L_2} = O(h^{\frac{N+3}{2}}).$$

2. Докажем, что функцию ω можно выбрать так, что Ψ попадет в область определения оператора Шредингера с дельта-потенциалом. Для этого должны выполняться краевые условия (1.3). Решение Ψ представимо в виде линейной комбинации падающей, прошедшей и отраженной волн. Рассмотрим каждую из них в точках поверхности M, заданной уравнением $x = r(y)$. Определим вектор $\xi = (y - y_0, t - t_0)h^{-1/2}$, тогда $z|_M = z_1(\xi) + \sum\limits_{k=2}^{\infty} z_k(\xi) h^{\frac{k-1}{2}}$, где z_k — однородные многочлены от ξ степени k. В точках поверхности, заданных координатами (y, t), сделаем замену $(y, t) = (y_0, t_0) + h^{1/2}\xi$. После этого фазы S^+ и S^- можно переписать в виде

$$S^{\pm}(z_1(\xi), t) = \sum_{m=0}^{\infty} S_m^{\pm}(\xi) h^{m/2} = \sigma^{\pm}(t_0) + \Big(\dot{\sigma}^{\pm}(t_0)\xi^n + <P^{\pm}, z_1(\xi)> \Big) h^{1/2} +$$
$$+ \left(\frac{1}{2}\ddot{\sigma}^{\pm}(\xi^n)^2 + <\dot{P}^{\pm}(t_0), z_1(\xi)> \xi^n + <P^{\pm}(t_0), z_2(\xi)> + \frac{1}{2} <Q^{\pm}(t_0) z_1(\xi), z_1(\xi)> \right) h +$$
$$+ \sum_{m=3}^{\infty} S_m^{\pm}(\xi) h^{m/2},$$

где $S_m^{\pm}$ — однородные многочлены от ξ степени m. Тогда

$$\frac{i}{h} S^{\pm} = \frac{i}{h}\Big(S_0 + S_1 h^{1/2} + S_2 h\Big) + \sum_{m=3}^{\infty} S_m h^{\frac{m-2}{2}}.$$

Из построения $\sigma^{\pm}$ известно, что $\dot{\sigma}^{\pm} = \dfrac{1}{2} < P^{\pm}, P^{\pm} > -V(X^{\pm})$ и $\ddot{\sigma}^{\pm} = 2 < P^{\pm}, \dot{P}^{\pm} >$. Заметим, что $z_1(\xi) = \sum\limits_{i=0}^{n-1} \dfrac{\partial r}{\partial y^i}\xi^i - P(t_0)\xi^n$ и $z_2(\xi) = \sum\limits_{i=0}^{n-1}\sum\limits_{j=0}^{n-1} \dfrac{\partial^2 r}{\partial y^i \partial y^j}\xi^i\xi^j - \dot{P}(t_0)(\xi^n)^2$. Учитывая условия (3.2), (3.4), получим, что фазы падающей и отраженной волн на поверхности M совпадают вплоть до квадратичных по ξ слагаемых: $S_0^+ = S_0^-$, $S_1^+ = S_1^-$ и $S_2^+ = S_2^-$.

Разложим амплитуды по ξ, получим

$$\varphi_k^{\pm}(z(\xi), t) = \varphi_k^{\pm}(z_1(\xi), t_0) + \sum_{s\geqslant 1} \varphi_k^{\pm s}(\xi) h^{s/2}, \quad \hat{\varphi}_k(z(\xi), t) = \hat{\varphi}_k(z_1(\xi), t_0) + \sum_{s\geqslant 1} \hat{\varphi}_k^s(\xi) h^{s/2},$$

где $\varphi_k^{\pm s}(\xi)$, $\hat{\varphi}_k^s(\xi)$ — многочлены от ξ.

Напишем разложения по ξ для функций, входящих в краевые условия (1.3):

$$\Psi^+|_M = h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}S^+(z(\xi),t)} \sum_{k=0}^{N} \varphi_k^+(z(\xi), t) h^{k/2} =$$
$$= h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)} \sum_{k=0}^{N} \big(\varphi_k^+(z_1(\xi), t_0) + \chi_k^+(\xi)\big) h^{k/2} + \phi^+,$$

$$h\frac{\partial \Psi^+}{\partial \nu}\Big|_M = h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)} \sum_{k=0}^{N} \big(i < P^+(t_0), \nu(y_0) > \varphi_k^+(z_1(\xi), t_0) + \mu_k^+(\xi)\big) h^{k/2} + \phi_\nu^+,$$

$$q(y)\Psi|_M = h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)}(q(y_0)\sum_{k=0}^{N}\varphi_k^+(z_1,t_0) + \gamma_k^+(\xi))h^{k/2} + \phi_q^+.$$

Здесь $\chi_k^+(\xi)$, $\mu_k^+(\xi)$, $\gamma_k^+(\xi)$ — многочлены от ξ, выражающиеся через линейные комбинации функций $\varphi_0^+,\ldots,\varphi_{k-1}^+$ при $k=\overline{1,N}$; $\chi_0^+\equiv\mu_0^+\equiv\gamma_0^+\equiv 0$ при $k=\overline{1,N}$; ϕ^+, ϕ_m^+ и ϕ_q^+ — функции порядка $O(h^{\frac{N+1}{2}})$. Аналогично устроены разложения для отраженной и прошедшей волн. Подставляя полученные разложения в краевые условия (1.3), получим из первого условия

$$h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)}\sum_{k=0}^{N}\left(\varphi_k^+(z_1(\xi),t_0)+\varphi_k^-(z_1(\xi),t_0)\right)h^{k/2} =$$

$$= h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)}\sum_{k=0}^{N}\left(\hat\varphi_k(z_1(\xi),t_0)+\hat\chi_k(\xi)-\chi_k^+(\xi)-\chi_k^-(\xi)\right)h^{k/2} + \phi.$$

Второе краевое условие перепишем в виде

$$ih^{-n/4}P_n^+(t_0) e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)}\sum_{k=0}^{N}(\varphi_k^+(z_1(\xi),t_0)-\varphi_k^-(z_1(\xi),t_0)-\hat\varphi_k(z_1(\xi),t_0))h^{k/2} =$$

$$= h^{-n/4} e^{\frac{i}{h}(S_0^+ + S_1^+(\xi)h^{1/2} + S_2^+(\xi)h)}\sum_{k=0}^{N}(q(y_0)\varphi_k(z_1,t_0)+\gamma_k(\xi)+\hat\mu_k(\xi)-\mu_k^+(\xi)-\mu_k^-(\xi))h^{k/2} + \phi_\nu.$$

Здесь $\phi=\hat\phi-\phi^+-\phi^-$, $\phi_\nu=\hat\phi_q-\phi_q^+-\phi_q^-+\hat\phi_m-\phi_\nu^+-\phi_\nu^-$, $\gamma_k=\hat\gamma_k-\gamma_k^+-\gamma_k^-$.

Введем обозначения $\chi_k=\hat\chi_k-\chi_k^+-\chi_k^-$, $\mu_k=\hat\mu_k-\mu_k^+-\mu_k^-$. Определим функции

$$\begin{aligned} u_k(\xi) &= -\left(\mu_k(\xi)+\gamma_k(\xi)-iP_n^+(t_0)\chi_k(\xi)\right), \\ v_k(\xi) &= -\left(\mu_k(\xi)+\gamma_k(\xi)+iP_n^+(t_0)\chi_k(\xi)\right). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Принимая во внимания условия на амплитуды (3.10), получим, что функция $\Psi^0=\Psi|_{\omega=0}$ удовлетворяет условиям

$$\begin{cases} \Psi^0(r(y)-0,t)-\Psi^0(r(y)+0,t)=\phi, \\ h\Big(\dfrac{\partial\Psi^0}{\partial\nu}(r(y)-0,t)-\dfrac{\partial\Psi^0}{\partial\nu}(r(y)+0,t)\Big)-q(y)\Psi^0(r(y),t)=\phi_\nu. \end{cases} \tag{3.14}$$

Отметим свойства функций ϕ, ϕ_m: каждая из этих функций представляется в виде

$$h^{\frac{N+1}{2}-\frac{n}{4}}\mathrm{e}^{\frac{i}{h}s}g(\xi,y,t,h),$$

где s — квадратичная по ξ часть функции $S^+|_M$, $g(\xi,y,t,h)$ — гладкая функция своих аргументов, растущая при $|\xi|\to\infty$ не быстрее многочлена. Нормы функций ϕ и ϕ_ν удовлетворяют оценкам

$$\|\phi\|_{L^2(M\times[0,T])}=O(h^{\frac{N+1}{2}}),\qquad \Big\|h\frac{\partial}{\partial y_j}\phi\Big\|=O(h^{\frac{N+1}{2}}),\qquad \Big\|h\frac{\partial}{\partial t}\phi\Big\|=O(h^{\frac{N+1}{2}});$$

кроме того, эти функции локализованы в малой окрестности точки $r(y_0)$ (в частности, экспоненциально малы на конечном, не зависящем от h, расстоянии от этой точки). Введем в окрестности точки $r(y_0)$ координаты (y,ρ), где ρ — ориентированное расстояние до M по нормали. Определим функцию ω с положительной стороны от M в этой окрестности по формуле

$$\omega=\mathrm{e}^{-\frac{\rho^2}{h}}(\phi+\frac{\rho}{h}(\phi_\nu-q\phi))$$

и продолжим ее во все пространство при помощи гладкой не зависящей от h функции, равной нулю вне некоторой большей окрестности. Легко видеть, что при этом функция Ψ точно удовлетворяет краевым условиям (1.3), т. е. лежит в области определения оператора Шредингера с дельта-потенциалом. Кроме того, поскольку

$$\|\omega\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}=O(h^{\frac{N}{2}}),\qquad \Big\|h\frac{\partial}{\partial x_j}\omega\Big\|=O(h^{\frac{N}{2}}),\qquad \Big\|h\frac{\partial}{\partial t}\omega\Big\|=O(h^{\frac{N}{2}}),$$

вне поверхности M выполнено $\hat L\Psi=O(h^{\frac{N}{2}})$.

3. Построенная функция Ψ удовлетворяет уравнению

$$ih\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi + f,$$

где $\hat{H}$ — оператор Шредингера с дельта-потенциалом и $\|f\|_{L_2} = O(h^{\frac{N}{2}})$. Теперь утверждение теоремы следует из самосопряженности $\hat{H}$. □

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Березин Ф. А., Фаддеев Л. Д.* Замечание об уравнении Шредингера с сингулярным потенциалом// Докл. АН СССР. — 1961. — *137*, № 5. — С. 1011–1014.
2. *Маслов В. П.* Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. — М.: Наука, 1977.
3. *Маслов В. П.* Асимптотические методы и теория возмущений. — М.: Наука, 1988.
4. *Маслов В. П., Федорюк М. В.* Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
5. *Ратью Т., Филатова Т. А., Шафаревич А. И.* Некомпактные лагранжевы многообразия, соответствующие спектральным сериям оператора Шредингера с дельта-потенциалом на поверхности вращения// Докл. РАН. — 2012. — *446*, № 6. — С. 618–620.
6. *Филатова Т. А., Шафаревич А. И.* Квазиклассические спектральные серии оператора Шредингера с дельта-потенциалом на прямой и на сфере// Теор. мат. физ. — 2010. — *164*, № 2. — С. 279–298.
7. *Шафаревич А. И., Щегорцова О. А.* Квазиклассическая асимптотика решения задачи Коши для уравнения Шредингера с дельта-потенциалом, локализованным на поверхности коразмерности 1// Тр. МИАН. — 2020. — *310*. — С. 322–331.
8. *Albeverio S., Gesztesy F., Høegh-Krohn R., Holden H.* Solvable models in quantum mechanics. — Providence: AMS Chelsea Publ., 2005.
9. *Albeverio S., Kurasov P.* Singular perturbations of differential operators. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000.
10. *Kronig R. de L., Penney W. G.* Quantum mechanics of electrons in crystal lattices// Proc. R. Soc. London Ser. A. — 1931. — *130*. — С. 499–513.
11. *Ratiu T. S., Suleimanova A. A., Shafarevich A. I.* Spectral series of the Schrödinger operator with delta-potential on a three-dimensional spherically symmetric manifold// Russ. J. Math. Phys. — 2013. — *20*, № 3. — С. 326–335.

А. И. Шафаревич
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: `shafarev@yahoo.com`

О. А. Щегорцова
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: `olga.shchegortsova@gmail.com`

DOI 10.22363/2413-3639-2022-68-4-704-715
UDC 517.958

Maslov complex germ and semiclassical contracted states in the Cauchy problem for the Schrödinger equation with delta potential

A. I. Shafarevich and O. A. Shchegortsova

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

We describe the semiclassical asymptotic behavior of the solution of the Cauchy problem for the Schrödinger equation with a delta potential localized on a surface of codimension 1. The Schrödinger operator with a delta potential is defined using the theory of extensions and is given by the boundary conditions on this surface. The initial data are selected as a narrow peak, which is a Gaussian packet localized in a small neighborhood of the point. To construct the asymptotics, we use the Maslov complex germ method. We describe the reflection of the complex germ from the carrier of the delta potential.

Keywords: Schrödinger equation with a delta potential, semiclassical asymptotics of solution, Maslov complex germ method

For citation: A. I. Shafarevich, O. A. Shchegortsova, "Maslov complex germ and semiclassical contracted states in the Cauchy problem for the Schrödinger equation with delta potential," *Sovrem. Mat. Fundam. Napravl.*, 2022, vol. **68**, No. 4, 704–715. http://doi.org/10.22363/2413-3639-2022-68-4-704-715

REFERENCES

1. F. A. Berezin and L. D. Faddeev, "Zamechanie ob uravnenii Shredingera s singulyarnym potentsialom" [A note on the Schrödinger equation with a singular potential], *Dokl. AN SSSR* [Rep. Acad. Sci. USSR], 1961, **137**, No. 5, 1011–1014 (in Russian).
2. V. P. Maslov, *Kompleksnyy metod VKB v nelineynykh uravneniyakh* [Complex Wentzel–Kramers–Brillouin Method in Nonlinear Equations], Nauka, Moscow, 1977 (in Russian).
3. V. P. Maslov, *Asimptoticheskie metody i teoriya vozmushcheniy* [Asymptotic Methods and Perturbation Theory], Nauka, Moscow, 1988 (in Russian).
4. V. P. Maslov and M. V. Fedoryuk, *Kvaziklassicheskoe priblizhenie dlya uravneniy kvantovoy mekhaniki* [Semiclassical Approximation for Equations of Quantum Mechanics], Nauka, Moscow, 1976 (in Russian).
5. T. Ratiu, T. A. Filatova, and A. I. Shafarevich, "Nekompaktnye lagranzhevy mnogoobraziya, sootvetstvuyushchie spektral'nym seriyam operatora Shredingera s del'ta-potentsialom na poverkhnosti vrashcheniya" [Noncompact Lagrangian manifolds corresponding to the spectral series of the Schrödinger operator with delta potential on the rotation surface], *Dokl. RAN* [Rep. Russ. Acad. Sci.], 2012, **446**, No. 6, 618–620 (in Russian).
6. T. A. Filatova and A. I. Shafarevich, "Kvaziklassicheskie spektral'nye serii operatora Shredingera s del'ta-potentsialom na pryamoy i na sfere" [Semiclassical spectral series of the Schrödinger operator with a delta potential on a line and on a sphere], *Teor. mat. fiz.* [Theor. Math. Phys.], 2010, **164**, No. 2, 279–298 (in Russian).
7. A. I. Shafarevich and O. A. Shchegortsova, "Kvaziklassicheskaya asimptotika resheniya zadachi Koshi dlya uravneniya Shredingera s del'ta-potentsialom, lokalizovannym na poverkhnosti korazmernosti 1" [Semiclassical asymptotics of the solution of the Cauchy problem for the Schrödinger equation with a delta potential localized on a surface of codimension 1], *Tr. MIAN* [Proc. Math. Inst. Russ. Acad. Sci.], 2020, **310**, 322–331 (in Russian).

8. S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, and H. Holden, *Solvable models in quantum mechanics*, AMS Chelsea Publ., Providence, 2005.
9. S. Albeverio and P. Kurasov, *Singular perturbations of differential operators*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
10. R. de L. Kronig and W. G. Penney, “Quantum mechanics of electrons in crystal lattices,” *Proc. R. Soc. London Ser. A*, 1931, **130**, 499–513.
11. T. S. Ratiu, A. A. Suleimanova, and A. I. Shafarevich, “Spectral series of the Schrödinger operator with delta-potential on a three-dimensional spherically symmetric manifold,” *Russ. J. Math. Phys.*, 2013, **20**, No. 3, 326–335.

A. I. Shafarevich
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
E-mail: shafarev@yahoo.com

O. A. Shchegortsova
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
E-mail: olga.shchegortsova@gmail.com