METHODS OF
MODERN MATHEMATICAL PHYSICS

IV: ANALYSIS OF OPERATORS

MICHAEL REED

Department of Mathematics
Duke University

BARRY SIMON

Departments of Mathematics
and Physics
Princeton University

ACADEMIC PRESS NEW YORK SAN FRANCISCO LONDON

A Subsidiary of Harcourt Brace Jovanovich, Publishers

1978

М. Рид, Б. Саймон

МЕТОДЫ СОВРЕМЕННОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4

Анализ операторов

Перевод с английского
А. К. ПОГРЕБКОВА и В. Н. СУШКО

под редакцией
М. К. ПОЛИВАНОВА и В. Н. СУШКО

Издательство 'Мир'
Москва 1982

ОГЛАВЛЕНИЕ

ББК 22.31
Р49
УДК 517.43: 519.55

Рид М., Саймон Б.

Р49 Методы современной математической физики: Т. 4. Анализ операторов. Пер. с англ. — М.: Мир, 1982. 428 с., ил.

Четвертый том известной монографии (т. 1 — М.: Мир, 1977, т. 2 — 1978, т. 3—1982), посвященный важному для теоретической физики спектральному анализу операторов. Изложение отличается от традиционных руководств физической направленностью в отборе материала и примеров при сохранении математической строгости.

Для всех, кто занимается функциональным анализом и его приложениями в физике.

Р $\frac{20203-011}{041(01)-82}$ 11—82, ч. 1. 1702050000 ББК 22.31
517.2 530.1

Редакция литературы по математическим наукам

Дэвиду,
Ривке и Бенни

ПРЕДИСЛОВИЕ

... составлять много книг—конца не будет, и много читать—утомительно для тела.

ЕККЛЕЗИАСТ (ПРОПОВЕДНИК) 12, 12

Теперь, после публикации томов 3 и 4, мы закончили изложение того материала, который, по нашим замыслам во время публикации первого тома, составлял «том 2». Сначала мы обещали издателю, что все тома будут закончены в течение девяти месяцев после представления первого. Увы! Теперь мы приводим содержание следующих томов (см. ниже), но опасаемся делать какие-либо предсказания.

Т. Като и Р. Лавин прочитали соответственно гл. XII и XIII и сообщили нам свои критические замечания. В этом нам сильно повезло. Кроме того, мы получили ценные замечания от Д. Аврона, П. Дейфта, А. Эпштейна, Ж. Жинибра, И. Хербста и Е. Трубовица. Мы благодарим их, а также всех других, чьи замечания помогли улучшить эту книгу.

Мы хотим также поблагодарить:

Д. Аврона, Г. Баттла, К. Бернинга, П. Дейфта, Г. Хагедорна, Е. Харрела II, Л. Смита и А. Сокола за чтение корректур;

Г. Андерсон, Ф. Армстронг и Б. Фаррел за перепечатку рукописи;

Национальный научный фонд, Исследовательский совет Университета Дьюка и Фонд Альфреда П. Слоуна за финансовую поддержку;

издательство «Академик пресс», без заботы и помощи которого эти тома не увидели бы света;

Марту и Джеки за ободрение и понимание.

ВВЕДЕНИЕ

Il libro della natura è scritto in lingua matematica.

GALILEO GALILEI

Книга природы написана языком математики.

ГАЛИЛЕО ГАЛИЛЕЙ

Первым шагом в математическом прояснении любой физической теории должно быть доказательство существования решений ее основных динамических и кинематических уравнений. После того как это сделано, надо определить общие качественные черты этих решений, а также подробно изучить конкретные частные системы, интересные для физики.

Рассмотрев общий вопрос о существовании решений динамических задач в гл. X, мы в этом томе и примыкающем к нему т. 3, посвященном теории рассеяния, предлагаем методы изучения общих качественных характеристик этих решений. Мы занимаемся в основном гамильтонианами нерелятивистской квантовой механики, хотя рассматриваем также и другие системы. Главной темой т. 3 является динамика при больших временах, в особенности «асимптотически свободные» решения. В этом томе в основном рассматриваются пять родов спектров, определенных в § VII.2 и VII.3: существенный спектр σ_{ess}; дискретный спектр σ_{disc}; абсолютно непрерывный спектр σ_{ac}; чисто точечный спектр σ_{pp} и сингулярный спектр σ_{sing}. Оказывается, исследование абсолютно непрерывного спектра и задача доказательства того, что сингулярный спектр пуст, тесно связаны с теорией рассеяния. Поэтому разделение материала между томами 3 и 4 несколько искусственно.

В этих томах конкретные системы обычно привлекаются для иллюстрации применения общих математических методов, но детальный анализ отдельных систем не заходит слишком далеко. Специалисты по математической физике, к сожалению, пренебрегают подробным изучением конкретных систем. Но в области конкретных систем есть много интересных нерешенных задач даже в случае чисто кулоновой модели в атомной физике. Так, например, еще не доказано, что H^{--} не имеет связанных состояний, хотя аналогичная классическая система с одним положительным и тремя отрицательными зарядами обладает тем свойством, что ее энергия понижается при удалении одного из электронов на бесконечность. Более того, до сих пор строго не доказано, что энергия, нужная для удаления из атома первого электрона, меньше, чем энергия, нужная для удаления второго, несмотря на то, что это «физически очевидно». Мы надеемся, что, собрав в томах 2, 3 и 4 общие математические методы, мы сделали анализ отдельных систем более простым и привлекательным.

Обычно физики считают, что нерелятивистская квантовая механика — это область, в которой качественная структура, особенно на том уровне, на каком она трактуется здесь, понята до конца. По этой причине заметная часть физиков-теоретиков будет относиться к этим томам как к упражнениям в чистой математике. Нам же, напротив, этот материал кажется неотъемлемой частью современной квантовой теории. Для примера укажем проблему доказательства отсутствия сингулярного спектра и доказательства асимптотической полноты для чисто кулоновой модели в атомной физике. Первая решена положительно Балслевом и Комбом в 1970 г., вторая остается открытой. Многие физики стали бы решать эти задачи по методу Голдбергера: «Проведем доказательство от противного. Допустим, что условие асимптотической полноты не справедливо. Да, но это же абсурд! Что и требовалось доказать». Или более точно: если бы не было асимптотической полноты, то разве мы не обнаружили бы какие-то странные явления в атомной и молекулярной физике?

Так как физика — это первично экспериментальная наука, то не следует с порога отвергать такое рассуждение, да признаемся, что и нам самим представляется в высшей степени невероятным, чтобы для атомных систем не выполнялось условие асимптотической полноты. Но все-таки, по нашему мнению, теоретическая физика должна быть наукой, а не искусством, и, наконец, нельзя до конца понять физический факт, пока его не удается вывести из основных принципов. Кроме того, решение таких математических задач может привести к новым методам, представляющим интерес для вычислений (например, рассмотренная Л. Д. Фаддеевым полнота трехчастичных систем и применение его идей в ядерной физике), а также внести важные элементы ясности (например, физическая искусственность «адиабатического включения» взаимодействия в нестрогой теории рассеяния и проясняющие работы Кука, Яуха и Като).

То, что мы писали в предисловиях к прежним томам о замечаниях и задачах, справедливо и здесь, но с одним добавлением: бо́льшая часть материала в этом томе почерпнута из текущей научной литературы, так что многие «задачи» вполне серьезны. Некоторые из задач «со звездочкой» фактически суммируют содержание серьезных научных статей!

СОДЕРЖАНИЕ ДРУГИХ ТОМОВ

XII. ВОЗМУЩЕНИЕ ТОЧЕЧНЫХ СПЕКТРОВ

В тридцатые годы под расслабляющим влиянием квантовомеханической теории возмущений математический уровень физика-теоретика свелся к рудиментарному владению латинским и греческим алфавитами.

РЕС ЙОСТ

В этой главе мы изучаем следующую общую ситуацию. Оператор H_0 имеет собственное значение E_0, которое мы обычно будем считать лежащим в дискретном спектре. Допустим, что H_0 слегка возмущен, т. е. рассмотрим $H_0+\beta V$, где V — некоторый другой оператор, а β мало по абсолютной величине. Какие собственные значения оператора $H_0+\beta V$ лежат вблизи E_0 и как они соотносятся с V? Каковы их свойства как функций от β? Это обычная ситуация в квантовой механике, где есть *формальные* ряды для возмущенных собственных значений. Эти **ряды Релея — Шредингера** не специфичны для квантовомеханических операторов, но существуют для многих возмущений вида $H_0+\beta V$. Центральное ядро этой главы составляет второй раздел, где обсуждается очень красивая теория регулярных возмущений Като — Реллиха; эта теория дает простые критерии того, что упомянутые формальные ряды имеют ненулевой радиус сходимости. Дальше мы обсудим, что означают ряды теории возмущений, когда они не сходятся или не соотносятся непосредственно с собственными значениями.

XII.1. Конечномерная теория возмущений

Рассмотрим сначала конечномерные матрицы. Это не только позволит нам получить явные формулы для этого простейшего случая, но со временем мы рассмотрим вырожденную теорию возмущений, сводя ее в существенном к конечномерной задаче. Кроме того, уже в конечномерном случае появляется одна серьезная трудность, именно: доказательство аналитичности по β при наличии вырожденного собственного значения. Напомним, что E_0 называется **вырожденным собственным значением**, когда характеристическое уравнение $\det(H_0-\lambda)=0$ для H_0 имеет кратный корень в точке $\lambda = E_0$. В дополнении к этому разделу мы приведем обзор теории матриц с вырожденными собственными значениями и, в частности, обсудим жорданову нормальную форму.

Рассмотрим сначала элементарный пример

$$T(\beta) = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ \beta & -1 \end{pmatrix}.$$

По нашему определению операторнозначных аналитических функций в § VI.3, $T(\beta)$ есть матричнозначная аналитическая функция. Чтобы найти ее собственные значения, нужно только решить вековое, или **характеристическое, уравнение** $\det(T(\beta) - \lambda) = 0$. Собственные значения суть

$$\lambda_{\pm}(\beta) = \pm\sqrt{\beta^2+1}.$$

Эта задача имеет несколько характерных черт.

(i) Даже при том, что $T(\beta)$ есть целая функция от β, собственные значения не обладают этим свойством, но как функции от β имеют особенности.

(ii) Эти особенности не лежат на вещественной оси β, где $T(\beta)$ самосопряжен, но появляются при невещественных β, а именно при $\beta = \pm i$. Таким образом, хотя при «физических» значениях β особенностей нет, однако **ряд теории возмущений**, т. е. ряд Тейлора для $\lambda_{\pm}(\beta)$ в окрестности $\beta = 0$, имеет конечный радиус сходимости из-за комплексных особенностей.

(iii) В особых точках β происходит «пересечение уровней», т. е. в $\beta = \pm i$ меньше различных собственных значений, а именно одно, чем в остальных точках, где их два.

(iv) При особых значениях β матрица $T(\beta)$ *не* диагонализуема. В явном виде:

$$T(i)\begin{pmatrix} 2 \\ 2i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad T(i)\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2i \end{pmatrix},$$

так что матрица $T(i)$ в базисе $\langle 2, 2i\rangle$, $\langle 1, -i\rangle$ есть

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Хотя эта «жорданова аномалия» типична, мы оставим ее обсуждение до Замечаний; см. также задачу 23.

(v) Аналитическое продолжение собственного значения есть собственное значение.

Далее до конца этого раздела мы будем считать, что $T(\beta)$ есть матричнозначная аналитическая функция в связной области R комплексной плоскости. Заметим, что мы не требуем, чтобы $T(\beta)$ была линейна по β. Позднее нам удастся свести бесконечномерную линейную задачу теории возмущений к конечномерной, но уже *не линейной* по β. Таким образом, эта бо́льшая общность окажется принципиально необходимой.

Чтобы найти собственные значения $T(\beta)$, нужно решить вековое уравнение

$$\det(T(\beta)-\lambda)=(-1)^n[\lambda^n+a_1(\beta)\lambda^{n-1}+\ldots+a_n(\beta)]=0.$$

Основная теорема о подобных функциях следующая.

Теорема XII.1. Пусть $F(\beta,\lambda)=\lambda^n+a_1(\beta)\lambda^{n-1}+\ldots+a_n(\beta)$ — полином степени n по λ с единичным коэффициентом при старшей степени и всеми остальными коэффициентами, аналитически зависящими от β. Допустим, что $\lambda=\lambda_0$ есть простой корень $F(\beta_0,\lambda)$. Тогда при β, близком к β_0, вблизи λ_0 существует в точности один корень $\lambda(\beta)$ полинома $F(\beta,\lambda)$ и $\lambda(\beta)$ аналитически зависит от β вблизи $\beta=\beta_0$.

Доказательство. Это частный случай теоремы о неявной функции. Поскольку $F(\beta,\lambda)$ аналитичен вблизи β_0 и λ_0, можно написать $F(\beta,\lambda)=\sum\limits_{m=0}^{n}(\lambda-\lambda_0)^m f_m(\beta)$, причем $f_0(\beta_0)\equiv F(\beta_0,\lambda_0)=0$ и $f_1(\beta_0)\equiv\frac{\partial F}{\partial\lambda}(\beta_0,\lambda_0)\neq 0$, так как λ_0 — простой корень. Стало быть, для того чтобы найти решения уравнения $F(\beta,\lambda)=0$, мы должны лишь решить эквивалентное уравнение

$$\lambda=\lambda_0-\frac{f_0(\beta)}{f_1(\beta)}-\sum_{m=2}^{n}(\lambda-\lambda_0)^m\frac{f_m(\beta)}{f_1(\beta)}. \tag{1}$$

Поскольку $f_1(\beta_0)\neq 0$, все коэффициенты $f_k(\beta)/f_1(\beta)$ аналитичны вблизи $\beta=\beta_0$. Попытаемся решить это последнее уравнение с помощью подстановки вида $\lambda(\beta)=\lambda_0+\sum\limits_{k=1}^{\infty}\alpha_k(\beta-\beta_0)^k$. Коэффициенты α_k можно сосчитать последовательной подстановкой в (1); например,

$$\alpha_1=-\left[\frac{f_0(\beta)}{f_1(\beta)}\right]'\Big|_{\beta=\beta_0},$$
$$\alpha_2=-\frac{1}{2}\left[\frac{f_0(\beta)}{f_1(\beta)}\right]''\Big|_{\beta=\beta_0}-\alpha_1^2\frac{f_2(\beta_0)}{f_1(\beta_0)}.$$

Нетрудно убедиться, что определяемые рекуррентно коэффициенты α дают степенной ряд с ненулевым радиусом сходимости (задача 1a). Единственность тоже доказывается довольно просто (задача 1b). ∎

Следствие. Пусть $T(\beta)$ — матричнозначная функция, аналитическая вблизи β_0, и допустим, что λ_0 — простое собственное значение $T(\beta_0)$. Тогда

(a) при β, близком к β_0, $T(\beta)$ имеет в точности одно собственное значение $\lambda_0(\beta)$ вблизи λ_0;

(b) $\lambda_0(\beta)$ есть простое собственное значение, если β близко к β_0;

(c) $\lambda_0(\beta)$ аналитично вблизи $\beta=\beta_0$.

Для кратных корней нужен более сложный анализ, однако он остается таким же прямым. Основную теорему для этого случая доказывать мы не будем (доказательство можно найти в ссылках, которые даются в Замечаниях).

Теорема XII.2. Пусть $F(\beta, \lambda)=\lambda^n+a_1(\beta)\lambda^{n-1}+\ldots+a_n(\beta)$ — полином степени n по λ с единичным коэффициентом при старшей степени и всеми остальными коэффициентами, аналитически зависящими от β. Допустим, что $\lambda=\lambda_0$ есть корень $F(\beta_0, \lambda)$ кратности m. Тогда для β вблизи β_0 существует в точности m корней (с учетом кратности) вблизи λ_0 и эти корни суть ветви одной или нескольких многозначных аналитических функций в худшем случае с алгебраической точкой ветвления в $\beta=\beta_0$. Точнее, существуют положительные целые числа $p_1, \ldots, p_k$, такие, что $\sum_{i=1}^{k} p_i=m$, и многозначные аналитические функции $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ (не обязательно различные), имеющие сходящиеся **ряды Пюизо** (ряды Тейлора по $(\beta-\beta_0)^{1/p}$)

$$\lambda_i(\beta)=\lambda_0+\sum_{j=1}^{\infty}\alpha_j^{(i)}(\beta-\beta_0)^{j/p_i},$$

так что m корней вблизи λ_0 задаются p_1 значениями λ_1, p_2 значениями λ_2 и т. д.

Следствие. Если $T(\beta)$ — матричнозначная функция, аналитическая вблизи β_0, и если λ_0 — собственное значение $T(\beta_0)$ алгебраической кратности m, то для β вблизи β_0 матрица $T(\beta)$ имеет точно m собственных значений (с учетом кратности) вблизи λ_0. Все эти собственные значения суть ветви одной или нескольких многозначных функций, аналитических вблизи β_0, с особенностями — в худшем случае алгебраическими — в точке β_0.

Если A и B самосопряжены, то возмущенные собственные значения оператора $A+\beta B$ аналитичны в точке $\beta=0$, даже когда A имеет вырожденные собственные значения. То, что точки ветвления, допускаемые предыдущей теоремой, в этом случае не появляются, есть содержание теоремы Реллиха. Эта теорема и другая родственная теорема об аналитичности собственных векторов в этом случае — очень глубокие результаты конечномерной теории возмущений. Действительно, пример в начале этого раздела показывает что точки ветвления могут появиться при *невещественных* β даже и для «самосопряженного случая» $T(\beta)^* = T(\bar{\beta})$.

Теорема XII.3 (теорема Реллиха). Предположим, что $T(\beta)$ — матричнозначная аналитическая функция в области R, содержащей отрезок вещественной оси, и что $T(\beta)$ самосопряжена при β на вещественной оси. Пусть λ_0 — собственное значение $T(\beta_0)$ кратности m. Если β_0 *вещественно*, существуют $p \leqslant m$ различных функций $\lambda_1(\beta), \ldots, \lambda_p(\beta)$, *однозначных* и аналитических в окрестности β_0, которые представляют собой *все* собственные значения.

Доказательство. Рассмотрим одну из функций $\lambda_i(\beta)$ из теоремы XII.2:

$$\lambda(\beta) = \lambda_0 + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j (\beta - \beta_0)^{j/p}.$$

Главный факт, которым мы воспользуемся, состоит в том, что каждая ветвь $\lambda(\beta)$ есть собственное значение, так что, в частности, ***каждая ветвь вещественна при вещественных*** β ***вблизи*** β_0. Поэтому

$$\alpha_1 = \lim_{\beta \downarrow \beta_0} (\lambda(\beta) - \lambda_0) |\beta - \beta_0|^{-p^{-1}}$$

вещественно и

$$e^{i\pi/p}\alpha_1 = \lim_{\beta \uparrow \beta_0} (\lambda(\beta) - \lambda_0) |\beta - \beta_0|^{-p^{-1}}$$

вещественно. Значит, если $p \neq 1$, то $\alpha_1 = 0$. По индукции можно показать, что $\alpha_j = 0$, если j/p не целое число. Следовательно, $\lambda(\beta)$ в самом деле аналитична в точке $\beta = \beta_0$. ∎

Теперь мы рассмотрим специальный случай $H(\beta) = H_0 + \beta V$. Допустим, что E_0 — невырожденное собственное значение H_0. Из теоремы XII.1 нам известно, что при малых β оператор $H_0 + \beta V$ имеет единственное собственное значение $E(\beta)$ вблизи E_0 и что $E(\beta)$ аналитична вблизи $\beta = 0$. Коэффициенты соответствующего ряда Тейлора называются **коэффициентами Релея — Шредингера**, а сам этот ряд Тейлора называется **рядом Релея — Шредингера.** Мы можем воспользоваться результатами Дополнения, чтобы найти формулы для коэффициентов. Эти формулы проще, если H_0 самосопряжен, так что ограничимся этим случаем. $E(\beta)$ есть единственное собственное значение $H_0 + \beta V$ вблизи E_0, так что если $|E - E_0| < \varepsilon$ и ε мало, то $E(\beta)$ — единственное собственное значение $H_0 + \beta V$ в круге $\{E \mid |E - E_0| < \varepsilon\}$. Из функционального исчисления следует, что

$$P(\beta) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (H_0+\beta V-E)^{-1}\,dE$$

есть проектор на собственный вектор с собственным значением $E(\beta)$. Мы покажем в теореме XII.9, что $(H_0+\beta V-E)^{-1}$ аналитична по β вблизи $\beta=0$. Таким образом, $P(\beta)$ аналитичен по β в точке $\beta=0$. В частности, если Ω_0 есть невозмущенный собственный вектор, то $P(\beta)\Omega_0 \neq 0$ при малых β, так как $P(\beta)\Omega_0 \to \Omega_0$, когда $\beta \to 0$. Так как $P(\beta)\Omega_0$ — ненормированный собственный вектор оператора $H(\beta)$, то

$$E(\beta) = \frac{(\Omega_0,\ H(\beta)\,P(\beta)\,\Omega_0)}{(\Omega_0,\ P(\beta)\,\Omega_0)} = E_0+\beta\frac{(\Omega_0,\ VP(\beta)\,\Omega_0)}{(\Omega_0,\ P(\beta)\,\Omega_0)}.$$

Эта формула крайне важна в построении теории возмущений и играет критическую роль в рассуждениях § 2—4. Действительно, она показывает, что для того чтобы найти ряд Тейлора для $E(\beta)$, мы должны найти только ряд Тейлора для $P(\beta)$. С этой целью следует найти ряд Тейлора для $(H_0+\beta V-E)^{-1}$ и проинтегрировать его. Но разложение Тейлора для $(H_0+\beta V-E)^{-1}$ есть просто ряд геометрической прогрессии:

$$(H_0+\beta V-E)^{-1} = (H_0-E)^{-1}-\beta(H_0-E)^{-1}V(H_0-E)^{-1}+\ldots$$
$$\ldots+(-1)^n\beta^n(H_0-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^n+\ldots\,.$$

Этот ряд не только прост сам по себе, но для него также существует простая форма остаточного члена.

Таким образом, ряд Релея—Шредингера для $E(\beta)$ имеет вид

$$E(\beta) = E_0+\beta\frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n}{\sum\limits_{n=0}^{\infty} b_n\beta^n},$$

где

$$a_n = \frac{(-1)^{n+1}}{2\pi i}\oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (\Omega_0,\ [V(H_0-E)^{-1}]^{n+1}\,\Omega_0)\,dE,$$

$$b_n = \frac{(-1)^{n+1}}{2\pi i}\oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (\Omega_0,\ (H_0-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^n\,\Omega_0)\,dE.$$

Из-за контурных интегралов и деления двух степенных рядов формулы коэффициентов Релея—Шредингера довольно сложны. Для иллюстрации сосчитаем $E(\beta)$ до порядка β^4. Так как H_0 самосопряжен, можно выбрать базис собственных векторов

$\Omega_0, \ldots, \Omega_{n-1}$ так, что $H\Omega_i = E_i\Omega_i$. Пусть $V_{ij} = (\Omega_i, V\Omega_j)$. Тогда

$$b_0 = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (\Omega_0, (H_0 - E)^{-1}\Omega_0)\, dE =$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (E_0 - E)^{-1}\, dE = 1,$$

$$b_1 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} V_{00} (E_0 - E)^{-2}\, dE = 0,$$

$$b_2 = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (E_0 - E)^{-2} \sum_{i=0}^{n} (E_i - E)^{-1} V_{0i} V_{i0}\, dE.$$

Член с $i=0$ в этой последней сумме совершенно отличен от членов с $i \neq 0$. В самом деле,

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (E_0 - E)^{-3}\, dE = 0,$$

в то время как

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (E_0 - E)^{-2} (E_i - E)^{-1}\, dE = (E_i - E_0)^{-2}.$$

Поэтому

$$b_2 = -\sum_{i \neq 0} (E_i - E_0)^{-2} V_{0i} V_{i0}.$$

Подобным образом,

$$b_3 = \sum_{i \neq 0 \neq j} [(E_i - E_0)^{-1} (E_j - E_0)^{-2} +$$
$$+ (E_i - E_0)^{-2} (E_j - E_0)^{-1}] V_{0i} V_{ij} V_{j0} - 2 \sum_{i \neq 0} (E_i - E_0)^{-3} V_{0i} V_{i0} V_{00},$$

$$a_0 = V_{00},$$

$$a_1 = -\sum_{i \neq 0} (E_i - E_0)^{-1} V_{0i} V_{i0},$$

$$a_2 = \sum_{i \neq 0 \neq j} (E_i - E_0)^{-1} (E_j - E_0)^{-1} V_{0i} V_{ij} V_{j0} -$$
$$- 2 \sum_{i \neq 0} (E_i - E_0)^{-2} V_{0i} V_{i0} V_{00},$$

$$a_3 = -\sum_{\substack{i \neq 0 \neq j \\ k \neq 0}} (E_i - E_0)^{-1} (E_j - E_0)^{-1} (E_k - E_0)^{-1} V_{0i} V_{ij} V_{jk} V_{k0} +$$
$$+ 2 \sum_{i \neq 0 \neq j} [(E_i - E_0)^{-1} (E_j - E_0)^{-2} +$$
$$+ (E_j - E_0)^{-1} (E_i - E_0)^{-2}] V_{00} V_{0i} V_{ij} V_{j0} +$$
$$+ 2 \sum_{i \neq 0 \neq j} (E_i - E_0)^{-2} (E_j - E_0)^{-1} V_{0i} V_{i0} V_{0j} V_{j0} -$$
$$- 3 \sum_{i \neq 0} (E_i - E_0)^{-3} V_{0i} V_{i0} V_{00}^2.$$

Итак, если записать $E(\beta)=E_0+\sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n\beta^n$, мы сосчитали

$$\alpha_1=a_0=V_{00},$$

$$\alpha_2=a_1=-\sum_{i\neq 0}(E_i-E_0)^{-1}V_{0i}V_{i0},$$

$$\alpha_3=a_2-b_2a_0=\sum_{i\neq 0\neq j}(E_i-E_0)^{-1}(E_j-E_0)^{-1}V_{0i}V_{ij}V_{j0}-$$
$$-\sum_{i\neq 0}(E_i-E_0)^{-2}V_{0i}V_{i0}V_{00},$$

$$\alpha_4=a_3-b_3a_0-b_2a_1=$$
$$=-\sum_{\substack{i\neq 0\neq j\\ k\neq 0}}(E_i-E_0)^{-1}(E_j-E_0)^{-1}(E_k-E_0)^{-1}V_{0i}V_{ij}V_{jk}V_{k0}+$$
$$+\sum_{i\neq 0\neq j}[(E_i-E_0)^{-1}(E_j-E_0)^{-2}+$$
$$+(E_i-E_0)^{-2}(E_j-E_0)^{-1}]V_{00}V_{0i}V_{ij}V_{j0}+$$
$$+\sum_{i\neq 0\neq j}(E_i-E_0)^{-2}(E_j-E_0)^{-1}V_{0i}V_{i0}V_{0j}V_{j0}-$$
$$-\sum_{i\neq 0}(E_i-E_0)^{-3}V_{0i}V_{i0}V_{00}^2.$$

Из этих элементарных, но скучных вычислений можно извлечь несколько выводов.

(i) n-й коэффициент Релея — Шредингера α_n существенно сложнее, чем главный член

$$(-1)^{n+1}\sum_{i_1\neq 0,\ i_2\neq 0,\ \ldots,\ i_{n-1}\neq 0}\prod_{j=1}^{n-1}(E_{i_j}-E_0)^{-1}V_{0i_1}V_{i_1i_2}\ \ldots\ V_{i_{n-1}0},$$

вид которого легко угадывается из вида члена второго порядка, знакомого по всем учебникам квантовой механики.

(ii) Знаменатель в $(\Omega_0,\ VP(\beta)\Omega_0)/(\Omega_0,\ P(\beta)\Omega_0)$ не привносит новых трудностей в ряд Тейлора, но фактически приводит к сокращению некоторых членов, уже имеющихся в числителе.

(iii) Наконец, самое главное: члены ряда Тейлора очень сложны, хотя они и происходят из простого ряда. Это подсказывает нам, что простейший объект для изучения есть резольвента: для получения точных теорем относительно $E(\beta)$ в бесконечномерном случае мы будем, как правило, сначала доказывать результаты для резольвенты, а потом получать сведения о собственных значениях при помощи формул, которые определяют собственное значение как отношение контурных интегралов от матричных элементов резольвенты.

В качестве последнего результата в конечномерной теории возмущений будет приведена

Теорема XII.4. Пусть Ω_0 — невырожденный собственный вектор оператора T_0, такой, что $T_0\Omega_0 = E_0\Omega_0$, и пусть $T(\beta)$ — матричнозначная аналитическая функция, причем $T(0) = T_0$. Тогда при малых β существует векторнозначная аналитическая функция $\Omega(\beta)$ удовлетворяющая условию $T(\beta)\Omega(\beta) = E(\beta)\Omega(\beta)$, где $E(\beta)$ — собственное значение $T(\beta)$ вблизи E_0. Более того, если $T(\beta)$ самосопряжен при вещественных β, то $\Omega(\beta)$ можно выбрать так, что $\|\Omega(\beta)\| = 1$ при вещественных β.

Доказательство. Возьмем

$$\psi(\beta) = -\frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{|E-E_0|=\varepsilon} (T(\beta)-E)^{-1}\Omega_0\,dE \equiv P(\beta)\Omega_0.$$

Тогда $\psi(\beta)$ аналитична и является собственным вектором. Так как $\psi(\beta) \to \Omega_0$ при $\beta \to 0$, $(\Omega_0, \psi(\beta)) \neq 0$ при малых β. Пусть $\Omega(\beta) = (\Omega_0, \psi(\beta))^{-1/2}\psi(\beta)$. Тогда $\Omega(\beta)$ нормирован, когда $T(\beta)$ самосопряжен при вещественных β, поскольку в этом случае $(\Omega_0, \psi(\beta)) = (\Omega_0, P(\beta)\Omega_0) = \|\psi(\beta)\|^2$. ∎

В ситуации, описываемой теоремой Реллиха, также можно построить собственные векторы, аналитически зависящие от β; см. задачи 16 и 17.

Дополнение к § XII.1. Алгебраическая и геометрическая кратность собственных значений конечных матриц

Для начала напомним несколько элементарных определений, относящихся к корням алгебраических уравнений.

Определение. Корень λ_0 алгебраического уравнения $F(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + \ldots + a_n = 0$ называется **невырожденным** или **простым**, если $F'(\lambda_0) \neq 0$. Эквивалентным образом, λ_0 прост, если в разложении $F(\lambda) = \prod_{i=1}^{n} (\lambda - \lambda_i)$ точно при одном значении i мы имеем $\lambda_i = \lambda_0$. Говорят, что λ_0 имеет **кратность** m, если $F'(\lambda_0) = \ldots = F^{(m-1)}(\lambda_0) = 0$, $F^{(m)}(\lambda_0) \neq 0$, или, эквивалентным образом, если точно m из λ_i равны λ_0. Собственное значение матрицы называется **простым** или **невырожденным**, если оно является невырожденным корнем векового уравнения. Вообще, **алгебраическая кратность** собственного значения есть его кратность как корня векового, или характеристического, уравнения.

Связь между алгебраической кратностью и геометрической кратностью выясняется из следующего ряда замечаний.

(i) Пусть $\mu(\lambda)$—алгебраическая кратность λ. Из основной теоремы алгебры следует, что $\sum\limits_{\lambda \in \mathbb{C}} \mu(\lambda) = n$, если T есть $n \times n$-матрица.

(ii) Пусть $m(\lambda) = \dim\{v \mid T(v) = \lambda v\}$ есть **геометрическая кратность**, а соответствующее подпространство есть **геометрическое собственное подпространство.** Тогда $m(\lambda) \leqslant \mu(\lambda)$.

(iii) Если T самосопряжен, то $m(\lambda) = \mu(\lambda)$.

(iv) В общем случае $\mu(\lambda) = \dim\{v \mid (T-\lambda)^k v = 0$ для некоторого $k\}$. Это пространство называется **обобщенным** или **алгебраическим собственным пространством**, отвечающим λ.

Утверждения (ii) и (iv) становятся очевидными, если известно, что T можно привести к жордановой нормальной форме, т. е. существует базис, в котором T блочно-диагональна:

$$T = \left[\begin{array}{c|c|c|c} T_{\lambda_1} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & T_{\lambda_n} \end{array}\right] \qquad T_{\lambda_i} = \begin{bmatrix} \lambda_i & x & 0 & & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_i & x & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_i & x & & 0 \\ & \cdots & & & & \\ & \cdots & & & & x \\ & \cdots & & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

где x равен всегда 0 или 1. В этом случае обобщенное собственное пространство $\{v \mid (T-\lambda_i)^k v = 0\}$ натянуто на $\mu(\lambda_i)$ базисных элементов, ассоциированных с блоком T_{λ_i}, и, очевидно, $\mu(\lambda_i)$ — это число, указывающее кратность λ_i как корня уравнения $\det(T-\lambda) = 0$.

Из того, что любая матрица T может быть приведена к жордановой нормальной форме, легко также увидеть (см. задачу 2), что если ε выбрано достаточно малым, то

$$P_{\lambda_i} = -\frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{|\lambda-\lambda_i| = \varepsilon} (T-\lambda)^{-1}\, d\lambda$$

есть проектор на обобщенное собственное пространство, ассоциированное с λ_i, и что $P_{\lambda_i} P_{\lambda_j} = \delta_{ij} P_{\lambda_i}$. На самом деле один из способов установить свойства (i)—(iv) заключается в использовании этих P_{λ_i} (см. задачи 3 и 4).

XII.2. Регулярная теория возмущений

Обратимся теперь к главному результату этой главы и докажем, что при очень широких условиях ряд Релея—Шредингера имеет ненулевой радиус сходимости для возмущений неограниченных операторов в бесконечномерных гильбертовых пространствах. Один из примеров, где эти результаты применимы, — это оператор $H(\beta) = -\Delta + \beta V$ в $\mathbb{R}^3$, где $V \in L^2$ вещественнозначна, а β вещественно и положительно. В § XIII.4 мы убедимся, что $\sigma_{ess}(H(\beta))=[0, \infty)$, а в § XIII.1 — что $\inf \sigma(H(\beta)) \equiv E(\beta)$ есть монотонно убывающая функция β. Если V отрицательна в некоторой области $\mathbb{R}^3$, то $E(\beta)$ будет отрицательным при β, бо́льших некоторого β_0, и, следовательно, в силу результатов о $\sigma_{ess}(H(\beta))$, будет собственным значением. Разумно задать вопрос, будет ли эта «энергия основного состояния» $E(\beta)$ аналитична по β, хотя бы в окрестности интервала (β_0, ∞).

Этот раздел делится на четыре части. (1) Короткое обсуждение дискретных спектров не обязательно самосопряженных операторов. (2) Доказательство аналитичности дискретных собственных значений в невырожденном случае для «аналитических семейств операторов». Это общая теория регулярных возмущений. Она имеет многочисленные приложения в квантовой механике, где собственные значения — это возможные значения энергии. По этой причине мы иногда будем говорить **«энергетический уровень»** вместо «собственное значение». Другое название, которое мы заимствуем из квантовой механики, — **константа связи**. Так мы будем называть переменную β. (3) Два простых критерия (тип (A) и тип (B)) того, что $H_0+\beta V$ — аналитическое семейство; они позволят применять общую технику к конкретным случаям. (4) Короткое обсуждение вырожденной теории возмущений.

Мы определили дискретный спектр самосопряженного оператора A в § VII.3. Для таких операторов $\lambda \in \sigma_{disc}(A)$ означает, что λ есть изолированная точка $\sigma(A)$ и $\dim P_{\{\lambda\}} < \infty$, где P_Ω — прсекторнозначная мера, ассоциированная с A. В случае общего оператора, очевидно, следует сохранить требование изолированности λ в $\sigma(A)$. Спектральный проектор мы заменим проектором, введенным в § XII.1.

Теорема XII.5. Предположим, что A — замкнутый оператор, и пусть λ — изолированная точка $\sigma(A)$. Точнее, допустим, что $\{\mu \mid |\mu-\lambda| < \varepsilon\} \cap \sigma(A) = \{\lambda\}$. Тогда

(a) для любого $0 < r < \varepsilon$

$$P_\lambda = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|\mu-\lambda|=r} (A-\mu)^{-1}\, d\mu$$

существует и не зависит от r;

(b) $P_\lambda^2 = P_\lambda$. Таким образом, P_λ — проектор (*не обязательно ортогональный*).

(c) Если $G_\lambda = \operatorname{Ran} P_\lambda$ и $F_\lambda = \operatorname{Ker} P_\lambda$, то G_λ и F_λ — дополнительные (но не обязательно ортогональные) замкнутые подпространства, т. е. $G_\lambda + F_\lambda = \mathcal{H}$ и $G_\lambda \cap F_\lambda = \{0\}$. Более того, A оставляет инвариантными G_λ и F_λ в следующем точном смысле: $G_\lambda \subset D(A)$, $AG_\lambda \subset G_\lambda$, $F_\lambda \cap D(A)$ плотно в F_λ и $A[F_\lambda \cap D(A)] \subset F_\lambda$.

(d) Если $\psi \in G_\lambda$ и G_λ конечномерно, то $(A-\lambda)^n\psi = 0$ для некоторого n. Если $B \equiv A \restriction F_\lambda$, то $\lambda \notin \sigma(B)$.

Доказательство. (a) Мы знаем уже, что $(A-\mu)^{-1}$ есть аналитическая функция на $\mathbb{C} \setminus \sigma(A) \equiv \rho(A)$. Значит, этот интеграл существует как риманов интеграл со значениями в банаховом пространстве. Его независимость от r есть следствие интегральной теоремы Коши.

(b) Пусть $r < R < \varepsilon$. Тогда, пользуясь уравнением для резольвенты, имеем

$$P_\lambda^2 = (2\pi i)^{-2} \oint_{|\mu-\lambda|=r} \oint_{|\nu-\lambda|=R} (A-\mu)^{-1}(A-\nu)^{-1}\,d\nu\,d\mu =$$

$$= (2\pi i)^{-2} \oint_{|\mu-\lambda|=r} \oint_{|\nu-\lambda|=R} (\nu-\mu)^{-1}\left[(A-\nu)^{-1}-(A-\mu)^{-1}\right]d\mu\,d\nu =$$

$$= (2\pi i)^{-2}\left[\oint_{|\nu-\lambda|=R} d\nu\,(A-\nu)^{-1} \oint_{|\mu-\lambda|=r} d\mu\,(\nu-\mu)^{-1} - \right.$$

$$\left. - \oint_{|\mu-\lambda|=r} d\mu\,(A-\mu)^{-1} \oint_{|\nu-\lambda|=R} d\nu\,(\nu-\mu)^{-1}\right] =$$

$$= (2\pi i)^{-2}\left[\oint_{|\nu-\lambda|=R} (A-\nu)^{-1}\,0\,d\nu - \oint_{|\mu-\lambda|=r} (2\pi i)(A-\mu)^{-1}d\mu\right] = P_\lambda.$$

(c) То, что $G_\lambda = \operatorname{Ker}(1-P_\lambda)$ и $F_\lambda = \operatorname{Ker} P_\lambda$ суть замкнутые дополнительные подпространства, есть результат элементарной алгебры (см. задачу 6). Пусть $\psi = P_\lambda\psi \in G_\lambda$. Поскольку P_λ задается римановым интегралом, $\psi = \lim_{n\to\infty} \psi_n$, где

$$\psi_n = \sum_{i=1}^{n} c_i^{(n)}\left(A-\mu_i^{(n)}\right)^{-1}\psi$$

и $c_i^{(n)}$ и $\mu_i^{(n)}$ выбраны так, что суммы сходятся к $-(2\pi i)^{-1}\times \times \oint (A-\mu)^{-1}\psi\,d\mu$. Простой расчет, основанный на формуле $A(A-\mu)^{-1} = 1 + \mu(A-\mu)^{-1}$, доказывает, что $\psi_n \to \psi$ и что $\{A\psi_n\}$ есть последовательность Коши. Так как A замкнут, мы заключаем, что $\psi \in D(A)$, и описанная выше процедура приближения показывает, что $A\psi = AP_\lambda\psi = P_\lambda(A\psi)$. Следовательно, $A\psi \in G_\lambda$. Доказательство утверждений относительно $D(A)$ и F_λ мы оставляем читателю.

(d) Предположим, что $A\psi = \nu\psi$. Тогда

$$P_\lambda\psi = (-2\pi i)^{-1} \oint_{|\mu-\lambda|=r} (\nu-\mu)^{-1}\psi\,d\mu = \begin{cases} \psi, & \text{если } \nu = \lambda, \\ 0, & \text{если } \nu \neq \lambda. \end{cases}$$

Отсюда следует, что единственное собственное значение $A\restriction G$ есть λ. Если G_λ конечномерно, то жорданова нормальная форма оператора $C\equiv A\restriction G_\lambda$ имеет единственное λ на диагонали и некоторое количество единиц выше диагонали. Таким образом, $(C-\lambda)^{(\dim G_\lambda)}=0$, т. е. $(A-\lambda)^n\psi=0$ для всех $\psi\in G_\lambda$.

Наконец, положим

$$R_\lambda=(-2\pi i)^{-1}\oint_{|\mu-\lambda|=r}(\lambda-\mu)^{-1}(A-\mu)^{-1}\,d\mu.$$

Проделав вычисления того же типа, что в (b), найдем, что $R_\lambda P_\lambda=P_\lambda R_\lambda$ и $(A-\lambda)R_\lambda=R_\lambda(A-\lambda)=1-P_\lambda$. Равенство $R_\lambda(A-\lambda)=1-P_\lambda$ имеет смысл операторного тождества на векторах из $D(A)$. Таким образом, R_λ переводит F_λ в себя и $(B-\lambda)R_\lambda=R_\lambda(B-\lambda)=I\restriction F_\lambda$. ∎

Теперь мы можем определить дискретный спектр.

Определение. Точка $\lambda\in\sigma(A)$ называется **дискретной**, если она изолирована и P_λ (заданный по теореме XII.5) конечномерен; если P_λ одномерен, то мы называем λ **невырожденным** собственным значением.

Читатель должен проверить, что это определение дискретного спектра находится в согласии с определением, данным в гл. VII и VIII, когда A самосопряжен. Заметим, что если λ — невырожденное собственное значение, то любое $\psi\in\operatorname{Ran}P_\lambda$ удовлетворяет $A\psi=\lambda\psi$. Чтобы завершить обсуждение дискретного спектра, докажем теорему, обратную к теореме XII.5.

Теорема XII.6. Пусть A — оператор с $\{\mu\,|\,|\mu-\lambda|=r\}\subset\rho(A)$. Тогда $P=(-2\pi i)^{-1}\oint_{|\mu-\lambda|=r}(A-\mu)^{-1}\,d\mu$ есть проектор. Если его размерность $n<\infty$, то A имеет не более n точек спектра в $\{\mu\,|\,|\mu-\lambda|<r\}$ и каждая из них дискретна. Если $n=1$, то в $\{\mu\,|\,|\mu-\lambda|<r\}$ имеется точно одна спектральная точка и она невырожденна.

Доказательство. Доказательство теоремы XII.5 (b) проходит без всяких изменений и показывает, что P есть проектор, а из доказательства (c) следует, что $G=\operatorname{Ran}P$ и $F=\operatorname{Ker}P$ суть замкнутые дополнительные инвариантные подпространства. Пусть $A_1=A\restriction G$ и $A_2=A\restriction F$. Как при доказательстве теоремы XII.5 (d), убеждаемся, что $\nu\notin\sigma(A_2)$, если $|\nu-\lambda|<r$. Следовательно, $(A-\nu)^{-1}$ существует при таких ν тогда и только тогда, когда существует $(A_1-\nu)^{-1}$. Если G конечномерно, то A_1 имеет собственные значения $\nu_1,\dots,\nu_k(k\leqslant n)$, так что $\sigma(A)\cap\{\nu\,|\,|\nu-\lambda|<r\}$ есть конечное множество. Чтобы убедиться в том, что каждая точка спектра в этом круге дискретна, заметим, что если P_ν есть спектральный проектор из

теоремы XII.5 и ν лежит внутри круга, то $P_\nu P = PP_\nu = P_\nu$. Следовательно, $\operatorname{Ran} P_\nu \subset \operatorname{Ran} P$, что завершает доказательство. ∎

Закончив таким образом краткое обсуждение дискретных спектров, мы можем перейти к настоящему предмету нашего исследования.

Определение. Операторнозначная функция (возможно, неограниченная) $T(\beta)$ в комплексной области R называется **аналитическим семейством** или **аналитическим семейством в смысле Като** тогда и только тогда, когда

(i) при всяком $\beta \in R$ оператор $T(\beta)$ замкнут и его резольвентное множество непусто;

(ii) при всяком $\beta_0 \in R$ существует некоторое $\lambda_0 \in \rho(T(\beta_0))$, такое, что $\lambda_0 \in \rho(T(\beta))$ при β, близких к β_0, и $(T(\beta)-\lambda_0)^{-1}$ есть аналитическая операторнозначная функция β вблизи β_0.

Если $T(\beta)$ — семейство ограниченных операторов, это определение эквивалентно определению ограниченных операторнозначных аналитических функций (задача 8). Число λ_0 в вышеприведенном определении не играет никакой специальной роли, как показывает следующая

Теорема XII.7. Пусть $T(\beta)$ — аналитическое семейство в области R. Тогда область

$$\Gamma = \{\langle \beta, \lambda\rangle \mid \beta \in R,\ \lambda \in \rho(T(\beta))\}$$

открыта и функция $(T(\beta)-\lambda)^{-1}$, определенная на Γ, есть аналитическая функция двух переменных.

Доказательство. Пусть $\langle \beta_0, \lambda_1\rangle \in \Gamma$, и допустим, что $(T(\beta)-\lambda_0)^{-1}$ существует и аналитична по β при β, близких к β_0. В силу первого резольвентного тождества, $1-(\lambda_1-\lambda_0)(T(\beta_0)-\lambda_0)^{-1}$ имеет обратный оператор, равный $(T(\beta_0)-\lambda_0)(T(\beta_0)-\lambda_1)^{-1}$. Так как множество обратимых операторов в $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ открыто, $[1-(\lambda-\lambda_0)(T(\beta)-\lambda_0)^{-1}]$ обратим при λ вблизи λ_1 и β вблизи β_0. При таких $\langle\beta, \lambda\rangle$ оператор $T(\beta)-\lambda$ имеет обратный, равный

$$(T(\beta)-\lambda_0)^{-1}[1-(\lambda-\lambda_0)(T(\beta)-\lambda_0)^{-1}]^{-1},$$

так что $\langle\beta, \lambda\rangle \in \Gamma$. Значит, Γ открыто. Чтобы доказать аналитичность $(T(\beta)-\lambda)^{-1}$, заметим, что $1-(\lambda-\lambda_0)(T(\beta)-\lambda_0)^{-1}$ аналитична при λ вблизи λ_0 и β вблизи β_0 и ее значения принадлежат множеству обратимых операторов. Из одной общей теоремы (задача 9) следует тогда, что $(1-(\lambda-\lambda_0)(T(\beta)-\lambda_0)^{-1})^{-1}$, а следовательно, и $(T(\beta)-\lambda)^{-1}$ аналитична. ∎

Для того чтобы заготовить все нужное для доказательства теоремы Като — Реллиха, остается доказать одну простую техническую лемму.

Лемма. Если P и Q — два (не обязательно ортогональных) проектора и $\dim(\operatorname{Ran} P) \neq \dim(\operatorname{Ran} Q)$, то $\|P-Q\| \geqslant 1$. В частности, если $P(x)$ есть непрерывная проекторнозначная функция x на связном топологическом пространстве, то $\dim(\operatorname{Ran} P(x))$ есть константа.

Доказательство. Без потери общности допустим, что $\dim(\operatorname{Ran} P) < \dim(\operatorname{Ran} Q)$. Положим $F = \operatorname{Ker} P$ и $E = \operatorname{Ran} Q$. Тогда $\dim(F^{\perp}) = \dim(\operatorname{Ran} P) < \dim E$. В результате $F \cap E \neq \{0\}$ (см. задачу 4 к гл. X). Пусть $\psi \neq 0$, $\psi \in F \cap E$. Тогда $P\psi = 0$, $Q\psi = \psi$, так что $\|(P-Q)\psi\| = \|\psi\|$. Отсюда следует, что $\|P-Q\| \geqslant 1$. Последнее утверждение леммы следует из элементарного рассуждения, основанного на связности. ▌

Теорема XII.8 (теорема Като—Реллиха). Пусть $T(\beta)$ — аналитическое семейство в смысле Като. Пусть E_0 — невырожденное собственное значение $T(\beta_0)$. Тогда при β, близком к β_0, существует в точности одна точка $E(\beta) \in \sigma(T(\beta))$ вблизи E_0 и эта точка изолирована и невырожденна. $E(\beta)$ есть аналитическая функция β при β, близких к β_0, и существует аналитический собственный вектор $\Omega(\beta)$ при β вблизи β_0. Если при вещественных $\beta - \beta_0$ оператор $T(\beta)$ самосопряжен, то $\Omega(\beta)$ можно выбрать так, что он будет нормирован при вещественных $\beta - \beta_0$.

Доказательство. Выберем ε таким, что единственной точкой из $\sigma(T(\beta_0))$ внутри $\{E \mid |E-E_0| \leqslant \varepsilon\}$ будет E_0. Так как окружность $\{E \mid |E-E_0| = \varepsilon\}$ компактна, а множество Γ из последней теоремы открыто, можно выбрать такое δ, что $E \notin \sigma(T(\beta))$ при $|E-E_0| = \varepsilon$ и $|\beta-\beta_0| \leqslant \delta$. Положим $N = \{\beta \mid |\beta-\beta_0| \leqslant \delta\}$.
Тогда

$$P(\beta) = -(2\pi i)^{-1} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (T(\beta)-E)^{-1}\, dE$$

существует и аналитичен при $\beta \in N$. Из невырожденности E_0 как собственного значения $T(\beta_0)$ следует, что $P(\beta_0)$ одномерен. В силу последней леммы отсюда вытекает, что $P(\beta)$ одномерен при всех $\beta \in N$. Следовательно, по теореме XII.6, существует точно одно собственное значение $E(\beta)$ оператора $T(\beta)$, такое, что $|E(\beta) - E_0| < \varepsilon$ при $\beta \in N$, и это собственное значение невырожденно. Аналитичность $E(\beta)$ следует из формулы

$$(E(\beta) - E_0 - \varepsilon)^{-1} = \frac{(\Omega_0, (T(\beta) - E_0 - \varepsilon)^{-1} P(\beta)\Omega_0)}{(\Omega_0, P(\beta)\Omega_0)}.$$

Мы получим аналитический собственный вектор, выбирая $\Omega(\beta) = P(\beta)\Omega_0$ или

$$\Omega(\beta) = (\Omega_0, P(\beta)\Omega_0)^{-1/2} P(\beta)\Omega_0$$

в вещественном случае, где Ω_0 — невозмущенный собственный вектор. ∎

Итак, мы видим, как просто доказывается аналитичность энергетических уровней по константе связи, *коль скоро* нам известно, что $T(\beta)$ — аналитическое семейство. В этом не было бы большой пользы, если бы мы не располагали удобными критериями аналитичности $T(\beta)$. По счастью, есть два очень простых таких критерия, отражающих обычный дуализм оператор — форма. Мы подробно обсудим операторный критерий и кратко критерий в терминах форм.

Определение. Пусть R — связная область в комплексной плоскости, и пусть для каждого $\beta \in R$ задан $T(\beta)$ — замкнутый оператор с непустым резольвентным множеством. Будем говорить, что $T(\beta)$ — **аналитическое семейство типа (А)**, тогда и только тогда, когда

(i) операторная область определения $T(\beta)$ есть некоторое множество D, независимое от β;

(ii) $T(\beta)\psi$ есть векторнозначная аналитическая функция β для всякого $\psi \in D$.

Разумеется, каждое семейство типа (А) есть аналитическое семейство в смысле Като. Общий случай этой теоремы мы рассмотрим в задачах, а здесь займемся лишь линейным случаем $T(\beta) = H_0 + \beta V$. Сначала мы докажем лемму, которая интересна сама по себе, так как она представляет собой удобный признак того, что семейство функций есть семейство типа (А).

Лемма. Пусть H_0 — замкнутый оператор с непустым резольвентным множеством. Определим $H_0 + \beta V$ на $D(H_0) \cap D(V)$. Тогда $H_0 + \beta V$ есть аналитическое семейство типа (А) вблизи $\beta = 0$ в том и только том случае, когда

(a) $D(V) \supset D(H_0)$;

(b) для некоторых a и b и для всех $\psi \in D(H_0)$

$$\|V\psi\| \leqslant a\|H_0\psi\| + b\|\psi\|.$$

Таким образом, $H_0 + \beta V$ типа (А) тогда и только тогда, когда V H_0-ограничен в смысле § X.2.

Доказательство. Предположим сначала, что $H_0 + \beta V$ — аналитическое семейство типа (А). Тогда $D(H_0) = D(H_0 + \beta V) = D(H_0) \cap D(V)$, так что (a) выполнено. Так как H_0 замкнут, то $D(H_0)$ с нормой $|||\psi||| = \|H_0\psi\| + \|\psi\|$ есть банахово пространство $\hat{D}$. Фиксируем малое положительное β, так чтобы β и $-\beta$ оба находились в области аналитичности. Отображение $H_0 + \beta V\colon \hat{D} \to \mathscr{H}$ всюду определено и обладает в $\hat{D} \times \mathscr{H}$ замкнутым графиком, поскольку этот график замкнут в $\mathcal{H}\times\mathcal{H}$ в более слабой топологии. Следовательно, по теореме о замкнутом графике,

$$\|(H_0+\beta V)\psi\|\leqslant a_1|||\psi||| \quad \text{и} \quad \|(H_0-\beta V)\psi\|\leqslant a_2|||\psi|||.$$

Отсюда

$$\|V\psi\|\leqslant(2\beta)^{-1}[\|(H_0+\beta V)\psi\|+\|(H_0-\beta V)\psi\|]\leqslant(2\beta)^{-1}(a_1+a_2)|||\psi|||,$$

так что условие (b) тоже выполнено.

Теперь, напротив, допустим, что (a) и (b) выполнены. Тогда для $\psi\in D(H_0)$

$$\|H_0\psi\|\leqslant\|(H_0+\beta V)\psi\|+|\beta|\|V\psi\|\leqslant$$
$$\leqslant\|(H_0+\beta V)\psi\|+|\beta|a\|H_0\psi\|+|\beta|b\|\psi\|.$$

Значит, если $|\beta|< a^{-1}$, имеем

$$\|H_0\psi\|\leqslant(1-|\beta|a)^{-1}\|(H_0+\beta V)\psi\|+(1-|\beta|a)^{-1}b|\beta|\|\psi\|.$$

Следовательно, $H_0+\beta V$ замкнут на $D(H_0)$, поскольку если $\psi_n\to\psi$ в $\mathcal{H}$, причем $\psi_n\in D(H_0)$ и $(H_0+\beta V)\psi_n$ — последовательность Коши, то и $H_0\psi_n$ есть последовательность Коши вследствие приведенного выше неравенства и, значит, $\psi\in D(H_0)$. То, что $(H_0+\beta V)\psi$ аналитична для $\psi\in D(H_0)$, очевидно. ∎

Из этого доказательства вытекает, что если V бесконечно мал относительно H_0, то $H_0+\beta V$ есть *целое* семейство типа (A).

Пример 1. Пусть $V\in L^2(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)$, и пусть $H_0=-\Delta$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$. В более общей постановке пусть $V=\sum V_{ij}$ с $V_{ij}\in L^2+L^\infty$ и $H_0=-\Delta$ на $L^2(\mathbb{R}^{3n})$. Тогда $H_0+\beta V$ есть целое аналитическое семейство типа (A).

Пример 2. Можно показать, что если $V\ll H_0$ и $W\ll H_0$, то $W\ll H_0+V$ (задача 11). Поэтому, положив $H_0=-\Delta_1-\Delta_2-2/r_1-2/r_2$ на $L^2(\mathbb{R}^6)$ и $V=|r_1-r_2|^{-1}$, мы увидим, что $H_0+\beta V$ есть аналитическое семейство типа (A). В приближении бесконечной массы ядра H_0+V представляет собой гамильтониан атома гелия (кинематика разобрана в § XI.5).

Теорема XII.9. Пусть $H_0+\beta V$ — аналитическое семейство типа (A) в некоторой области R. Тогда $H_0+\beta V$ — аналитическое семейство в смысле Като. В частности, если $0\in R$ и если E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0, то существует единственная точка $E(\beta)\in\sigma(H_0+\beta V)$ вблизи E_0 и для малых $|\beta|$, которая является изолированным невырожденным собственным значением. Более того, $E(\beta)$ аналитична вблизи $\beta=0$.

Доказательство. Поскольку аналитичность — свойство локальное, допустим, что $0\in R$, и докажем аналитичность в смысле Като вблизи $\beta=0$. Выберем $\lambda\notin\sigma(H_0)$. Тогда $(H_0-\lambda)^{-1}$ и $H_0(H_0-\lambda)^{-1}=$ $=1+\lambda(H_0-\lambda)^{-1}$ ограничены. Значит, для любого $\varphi\in\mathscr{H}$

$$\|V(H_0-\lambda)^{-1}\varphi\|\leqslant a\|H_0(H_0-\lambda)^{-1}\varphi\|+b\|(H_0-\lambda)^{-1}\varphi\|\leqslant$$
$$\leqslant(a\|H_0(H_0-\lambda)^{-1}\|+b\|(H_0-\lambda)^{-1}\|)\|\varphi\|.$$

Следовательно, $V(H_0-\lambda)^{-1}$ ограничен; значит, для малых β обратный $[1+\beta V(H_0-\lambda)^{-1}]^{-1}$ существует и аналитичен по β (поскольку задается геометрическим рядом). Прямое вычисление (задача 12) показывает, что $(H_0-\lambda)^{-1}[1+\beta V(H_0-\lambda)^{-1}]^{-1}$ есть оператор, обратный к $(H_0+\beta V-\lambda)$, так что при малых β имеем $\lambda\notin\sigma(H_0+\beta V)$ и $(H_0+\beta V-\lambda)^{-1}$ аналитичен по β. Это доказывает, что $H_0+\beta V$ есть аналитическое семейство в смысле Като вблизи $\beta=0$. Записывая теперь $H_0+\beta V=(H_0+\beta_0 V)+(\beta-\beta_0)V$, докажем аналитичность в $\beta=\beta_0$. ∎

Пример 1 (заново). Из теорем X.15 и XII.9 вытекает, что $E_0(\beta)$ — наименьшее собственное значение оператора $-\Delta+\beta V$ — есть аналитическая функция β в окрестности (β_0, ∞), где $\beta_0=$ $=\inf\{\beta>0\,|\,E_0(\beta)<0\}$. Применяя теорему XII.9, мы предполагаем невырожденность основного состояния, что будет доказано в § XIII.12.

Пример 2 (заново). Для оператора $h\equiv-\Delta_1-2/r_1$ задача о собственных значениях решается точно. Его наименьшее собственное значение есть $E=-1$. Оператор H_0 имеет вид $h\otimes 1+1\otimes h$ на $L^2(\mathbb{R}^3)\otimes L^2(\mathbb{R}^3)=L^2(\mathbb{R}^6)$, так что энергия основного состояния этого оператора равна -2. Для малых $|\beta|$ энергия основного состояния $E(\beta)$ аналитична, и ее коэффициенты Тейлора при $\beta=0$ задаются формулой Релея — Шредингера, обсуждавшейся в § 1.

Физически нас интересует энергия $E(1)$ основного состояния атома гелия. Немедленно возникает вопрос, имеет ли ряд Тейлора для $E(\beta)$ в точке $\beta=0$ радиус сходимости, бо́льший 1. В теореме XII.11 мы получим прямые нижние оценки на радиус сходимости ряда Релея — Шредингера, однако они будут грубыми, и мы не сумеем непосредственно воспользоваться ими для доказательства того, что $\beta=1$ находится внутри круга сходимости. Возможно, с помощью тяжких трудов удастся показать, что $\beta=1$ действительно лежит внутри круга сходимости (мы думаем, что это так), но ведь вопрос этот совершенно академический! В самом деле, при $\beta=1$, даже если ряд сходится, нужно огромное число членов, для того чтобы хорошо приблизить $E(1)$, а коэффициенты Релея — Шредингера высшего порядка очень трудно считать. Так, например, приближение первого порядка $(\Omega_0, V\Omega_0)$ для разности $E(1)-E(0)$ расходится с экспериментом примерно на 15%. Оказывается, другие методы, которые мы рассмотрим в

§ XIII.2, позволяют получить совпадение с экспериментом с точностью, лучшей чем 1% (а если учесть различные релятивистские поправки, то даже с точностью до одной миллионной). Однако при малых β теория возмущений точнее. Оказывается, энергия основного состояния Li^+ прямо связана с $E(4/9)$ и задается приближением первого порядка с точностью до 5%. Значение $E(1/4)$, которое связано с энергией основного состояния Be^{++}, задается этим приближением с точностью до 2%.

Пример 3 (сверхтонкая структура атома водорода). С теорией возмущений связано одно из самых поразительных достижений квантовой физики в смысле совпадения теории с экспериментом. В обычной модели атома водорода есть один энергетический уровень около —13 эВ, энергия основного состояния. Но в реальном атоме есть два уровня; это расщепление обязано своим происхождением взаимодействию между магнитными моментами электрона и протона. Излучение, вызванное переходом между этими уровнями, наблюдают радиоастрономы, изучая межгалактические газовые облака, и именно этот переход доминирует в водородном мазере. По этой последней причине разность энергий между этими уровнями очень точно измерена. В единицах с $\hbar=1$, когда ΔE измеряется в герцах (Гц) = число колебаний в секунду, эта разность равна

$$\Delta E\,(1s_{1/2}) = 1\,420\,405\,751,800 \text{ Гц}.$$

Существует старая теория магнитных взаимодействий, принадлежащая Ферми и Сегре и основанная на классических моделях взаимодействующих магнитов. В потенциал Ферми — Сегре входит константа связи β, составленная из фундаментальных постоянных (магнитные моменты электрона и протона, электрический заряд), спин-спиновое взаимодействие и множитель $\rho(r)$ — эффективное распределение заряда протона. На практике $\rho(r)$ аппроксимируется δ-функцией, и, таким образом, этот случай технически оказывается за пределами той математической теории, которой мы занимаемся, однако гладкая функция $\rho(r)$ с пиком в нуле может быть включена в нашу теорию и приводит примерно к тому же результату в низшем порядке теории возмущений.

При сравнении теории с экспериментом возникает интересная задача. Физические постоянные, которые требуются, чтобы сосчитать β, известны лишь с точностью до 10^{-5} или 10^{-6}, а $\Delta E\,(1s_{1/2}) = \beta a_1 + \beta^2 a_2 + \ldots$, где $\beta \approx 10^{-4}$ и a_1, a_2, измеренные в единицах энергии основного состояния водорода, порядка 1. Для действительно аккуратного сравнения с экспериментом рассматривается еще сверхтонкое расщепление первого возбужденного состояния $\Delta E\,(2s_{1/2}) = \beta b_1 + \beta^2 b_2$. Теперь, если посмотреть на отношение $\Delta E\,(2s_{1/2})/\Delta E\,(1s_{1/2})$ то, поскольку уже само β порядка 10^{-4}, ошибка в β в шестом знаке приводит к ошибке в $(a_1+\beta a_2)/(b_1+\beta b_2)$ только в десятом знаке! Эксперимент дает

$$\frac{\Delta E\,(2s_{1/2})}{\Delta E\,(1s_{1/2})}=\frac{1}{8}\,(1{,}000\,034\,495).$$

Теория Ферми—Сегре (с релятивистскими поправками) в низшем порядке теории возмущений дает

$$\frac{\Delta E\,(2s_{1/2})}{\Delta E\,(1s_{1/2})}=\frac{1}{8}\,(1{,}000\,034\,45).$$

Еще лучшее согласие было бы даже странным, так как этот расчет не принимает во внимание конечного размера ядра, поправок за счет сильных взаимодействий и т. п.

Вернемся теперь к общим критериям того, что линейная функция $H_0+\beta V$ будет аналитическим семейством в смысле Като. Есть признак в терминах форм, совершенно аналогичный операторному определению семейства типа (A). **Аналитическое семейство типа (b)** есть семейство замкнутых строго m-секториальных форм $q(\beta)$, по одной для каждого β в некоторой области R комплексной плоскости, таких, что

(i) область определения формы $q(\beta)$ есть некоторое подпространство F, независимое от β;

(ii) $(\psi, q(\beta)\psi)$ есть аналитическая функция β в R для любого $\psi\in F$.

Если $q(\beta)$—аналитическое семейство типа (b), то всякому $\beta\in R$ по теореме VIII.16 отвечает единственный замкнутый оператор $T(\beta)$. Операторы $T(\beta)$ называются **аналитическим семейством типа (B)**. Как и для типа (A), всякое аналитическое семейство типа (B) есть аналитическое семейство в смысле Като, и $H_0+\beta V$, определенный в смысле формы на $Q(H_0)\cap Q(V)$, задает аналитическое семейство типа (B) вблизи $\beta=0$ тогда и только тогда, когда V H_0-ограничен как форма.

Методами, связанными с критерием типа (B), можно воспользоваться для расширения результатов, которые мы обсудили в примере 1 выше, на потенциалы из класса Рольника $R+L^{\infty}$. Методы типа (B) приводят к свойствам сильной аналитичности $H_0+\beta V$, если H_0 и V положительны:

Теорема XII.10. Пусть H_0 положителен и самосопряжен, и пусть V самосопряжен. Положим $V_+=\frac{1}{2}(V+|V|)$; $V_-=\frac{1}{2}(|V|-V)$. Предположим, что

(i) $Q(V_+)\cap Q(H_0)$ плотно;

(ii) V_- H_0-ограничен как форма с относительной гранью нуль.

Тогда $H_0+\beta V$ есть аналитическое семейство типа (B) в плоскости с разрезом $\{\beta\,|\,\beta\notin(-\infty, 0]\}$.

Ссылки на литературу, содержащую доказательство этой теоремы, можно найти в Замечаниях.

Пример 4. Из обсуждения в § XIII.12 будет следовать, что основное состояние оператора $-d^2/dx^2+x^2+\beta x^4$ невырожденно, если $\beta > 0$. Поэтому теорема XII.10 утверждает, что энергия его основного состояния $E(\beta)$ аналитична в окрестности положительной вещественной полуоси.

Существуют примеры аналитических семейств, не принадлежащие ни к типу (A), ни к типу (B). Например, пусть $T(\beta)$ есть аналитическое семейство типа (A), и пусть C — любой ограниченный самосопряженный оператор. Тогда $U(\beta)=\exp(i\beta C)$ есть целая аналитическая функция. Нетрудно убедиться что $\tilde{T}(\beta)=U(\beta)T(\beta)U(\beta)^{-1}$, определенный на $U(\beta)D$, задает аналитическое семейство. Однако C и T могут быть выбраны так, что ни $D(\tilde{T}(\beta))$, ни $Q(\tilde{T}(\beta))$ не постоянны.

Мы хотим сделать несколько замечаний, причем некоторые из них — это предупреждения о возможных западнях. Во-первых, заметим, что, как и в § 1, имеются явные формулы для коэффициентов ряда Тейлора для $E(\beta)$, задаваемые контурными интегралами от резольвенты. Если H_0 имеет чисто дискретный спектр, то можно проинтегрировать и получить такие же формулы, как в предыдущем разделе. Если H_0 самосопряжен, то опять можно взять эти контурные интегралы и получить спектральные интегралы вместо сумм; например, если E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0, так что $\operatorname{dist}(E_0, \sigma(H_0)\setminus E_0)>\varepsilon$, то

$$\alpha_2=-\int\limits_{|\lambda-E_0|>\varepsilon}(\lambda-E_0)^{-1}\,d(V\Omega_0, P_\lambda V\Omega_0).$$

Во-вторых, мы предупреждаем читателя, что степенной ряд $E(\beta)$ может иметь больший радиус сходимости, чем круг, в котором $H(\beta)$ имеет в качестве собственного значения $E(\beta)$.

Пример 5. Пусть $H_0=-\Delta-1/r$ и $V=1/r$. Тогда собственные значения оператора $H_\beta=H_0+\beta V$ при малых β суть $-{}^1/_4 n^{-2}(1-\beta)^2$, $n=1, 2, \ldots$. В частности, энергия основного состояния ($n=1$) $E_0(\beta)=-{}^1/_4+{}^1/_2\beta-{}^1/_4\beta^2$ задается функцией, имеющей аналитическое продолжение во всю комплексную плоскость. Но при $\beta>1$ оператор H_β вообще не имеет собственных значений!

Значит, одна из черт конечномерной теории отсутствует: вообще говоря, аналитическое продолжение собственного значения не обязано быть собственным значением. Однако в одном важном специальном случае можно доказать, что аналитическое продолжение собственного значения есть собственное значение (см. задачу 13).

Наконец, отметим, что можно получить явные нижние оценки радиуса сходимости ряда Тейлора:

Теорема XII.11. Предположим, что $\|V\varphi\| \leqslant a\|H_0\varphi\| + b\|\varphi\|$. Пусть H_0 самосопряжен и имеет изолированное невырожденное собственное значение E_0 и пусть $\varepsilon = {}^1/_2 \operatorname{dist}(E_0, \sigma(H_0) \setminus \{E_0\})$. Определим

$$r(a, b, E_0, \varepsilon) = [a + \varepsilon^{-1}[b + a(|E_0| + \varepsilon)]]^{-1}.$$

Тогда собственное значение $E(\beta)$ оператора $H_0 + \beta V$ вблизи E_0 аналитично в круге радиуса $r(a, b, E_0, \varepsilon)$.

В задаче 14 от читателя требуется доказать эту теорему.

* *

*

Последний вопрос регулярной теории возмущений, который мы обсудим,— это случай, когда E_0 есть изолированное вырожденное собственное значение $T(\beta_0)$ с конечной кратностью. Учитывая опыт конечномерного случая, мы будем предполагать, что $T(\beta)$ самосопряжен при вещественных β. Если $T(\beta)$ — семейство Като, то мы без затруднений докажем, что $P(\beta) = (-2\pi i)^{-1} \oint (T(\beta) - E)^{-1} dE$ аналитичен по β, когда β лежат около β_0. Мы сталкиваемся, таким образом, с задачей нахождения собственных значений $H(\beta)$, суженного на *переменное* конечномерное подпространство $\operatorname{Ran} P(\beta)$. Чтобы свести это к истинно конечномерной задаче, нам потребуется следующий технический результат Като, имеющий также и другие приложения (см. задачи 15 и 17).

Теорема XII.12. Пусть R — связная односвязная область комплексной плоскости, содержащая 0. Пусть $P(\beta)$ — проекторнозначная аналитическая функция в R. Тогда существует аналитическое семейство $U(\beta)$ обратимых операторов со свойством

$$U(\beta) P(0) U(\beta)^{-1} = P(\beta).$$

Более того, если $P(\beta)$ самосопряжен при вещественных β в R, то $U(\beta)$ может быть выбран унитарным для вещественных β.

Доказательство мы отложим до конца этого раздела.

Теорема XII.13. Пусть $T(\beta)$ — аналитическое семейство в смысле Като при β вблизи 0, т. е. $T(\beta)$ самосопряжен при вещественных β. Пусть E_0 — дискретное собственное значение кратности m. Тогда существуют m не обязательно различных однозначных функций, аналитических вблизи $\beta=0$: $E^{(1)}(\beta), \ldots, E^{(m)}(\beta)$ с $E^{(k)}(0) = E_0$, таких, что эти функции суть собственные значения $T(\beta)$ при β вблизи нуля (индексы у $E^{(1)}(0), \ldots, E^{(m)}(0)$ указывают на вырождение собственного значения). Более того, это единственные собственные значения вблизи E_0.

Доказательство. Так как E_0 — изолированная точка в $\sigma(T(0))$, а $T(\beta)$ — аналитическое семейство, то $P(\beta) = (-2\pi i)^{-1} \times \times \oint (T(\beta) - E)^{-1} dE$ существует и аналитичен по β при малых β. Из доказательства теоремы XII.6 видно, что

$$\sigma(T(\beta) \restriction \operatorname{Ran} P(\beta)) = \sigma(T(\beta)) \cap \{E \mid |E - E_0| < \varepsilon\}.$$

Из теоремы XII.12 мы знаем, что существует семейство $U(\beta)$, аналитическое вблизи $\beta = 0$, унитарное при вещественных β и такое, что $U(\beta) P(0) U(\beta)^{-1} = P(\beta)$. Пусть $\tilde{T}(\beta) = U(\beta)^{-1} T(\beta) U(\beta)$. Тогда $\operatorname{Ran} P(0)$ есть инвариантное подпространство для всех таких $\tilde{T}(\beta)$. Следовательно, $S(\beta) \equiv \tilde{T}(\beta) \restriction \operatorname{Ran} P(0)$ есть конечномерное аналитическое семейство операторов, самосопряженных при вещественных β. Утверждение теоремы теперь вытекает из теоремы Реллиха (теорема XII.3). ∎

Так как мы свели бесконечномерную задачу к конечномерной, то из существования аналитических собственных векторов в конечномерном случае вытекает их существование и в бесконечномерном случае.

Пример 1 (заново). Если $H_0 + \beta_0 V$ имеет n собственных значений в $(-\infty, 0)$, то $H_0 + \beta V$ имеет по меньшей мере n собственных значений при малых $|\beta - \beta_0|$, и те из них, которые лежат вблизи собственных значений $H_0 + \beta_0 V$, аналитичны по β вблизи β_0.

Наконец, докажем теорему XII.12. Идею доказательства мы получим, дифференцируя $U(\beta) P(0) U(\beta)^{-1} = P(\beta)$. Найдем $P'(\beta) = [U'(\beta) U(\beta)^{-1}, P(\beta)]$, где $[A, B] = AB - BA$. Итак, мы ищем оператор $Q(\beta)$, удовлетворяющий условию $P'(\beta) = [Q(\beta), P(\beta)]$, а затем решаем дифференциальное уравнение $U'(\beta) = Q(\beta) U(\beta)$.

Лемма. Пусть R есть связное односвязное подмножество $\mathbb{C}$, такое, что $0 \in R$, и пусть $A(\beta)$ — аналитическая функция на R со значениями во множестве ограниченных операторов на некотором банаховом пространстве X. Тогда для любого $x_0 \in X$ существует единственная функция $f(\beta)$, аналитическая в R и со значениями в X, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{d}{d\beta} f(\beta) = A(\beta) f(\beta), \quad f(0) = x_0. \tag{2}$$

Доказательство. Согласно стандартным методам аналитического продолжения, достаточно предположить, что R есть круг радиуса r_0, и показать, что аналитическое решение существует внутри

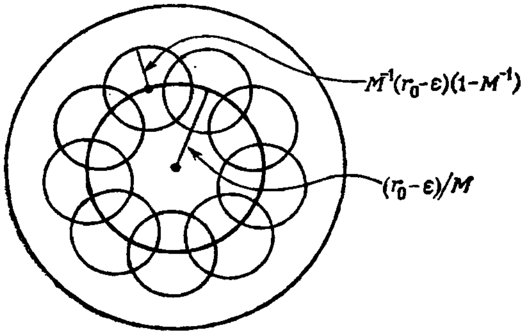


Рис. XII.1.

круга радиуса $r_0-2\varepsilon$ с любым ε. Заметим сначала, что единственность следует из (2): если $f(\beta)=\sum_{n=0}^{\infty} f_n\beta^n$ и $A(\beta)=\sum_{n=0}^{\infty} A_n\beta^n$, то

$$f_0=x_0, \tag{3a}$$

$$f_n=n^{-1}\left[\sum_{k=0}^{n-1} A_k f_{n-1-k}\right]. \tag{3b}$$

Теперь покажем, что если f_n определены формулами (3), то $\sum_{n=0}^{\infty} f_n\beta^n$ сходится при $|\beta|<r_0-2\varepsilon$. Пусть $M=\max\{1+\|A(\beta)\| \mid |\beta|\leqslant r_0-\varepsilon\}$. В силу интегральной формулы Коши $\|A_n\|<M(r_0-\varepsilon)^{-n}$. Простая индукция, основанная на (3), показывает, что $\|f_n\|<(M(r_0-\varepsilon)^{-1})^n\|x_0\|$. Следовательно, $f(\beta)$ аналитична в круге радиуса $(r_0-\varepsilon)/M$. Повторяя ту же аргументацию в точке β, такой, что $|\beta|$ близок к $(r_0-\varepsilon)/M$, можно доказать, что f аналитична в круге радиуса $(r_0-\varepsilon)M^{-1}+M^{-1}(r_0-\varepsilon)\times\times(1-M^{-1})$. (См. рис. XII.1.) После конечного числа повторений мы получим аналитичность в круге радиуса $r_0-2\varepsilon$. ∎

Доказательство теоремы XII.12. Мы разделим доказательство на четыре части.

(i) Пусть $Q(\beta)=[P'(\beta),\ P(\beta)]$. Имеем $P^2(\beta)=P(\beta)$, так что

$$P'(\beta)=P'(\beta)P(\beta)+P(\beta)P'(\beta). \tag{4}$$

Следовательно, $P(\beta)P'(\beta)P(\beta)=2P(\beta)P'(\beta)P(\beta)$, т. е. $P(\beta)\times\times P'(\beta)P(\beta)=0$. В результате

$$[Q(\beta),\ P(\beta)]=P'(\beta)P(\beta)+P(\beta)P'(\beta)-2P(\beta)P'(\beta)P(\beta)=P'(\beta)$$

в силу (4).

(ii) Пользуясь леммой с $X=\mathscr{L}(\mathscr{H})$, решим уравнения $dU/d\beta=Q(\beta)U(\beta)$ и $dV/d\beta=-V(\beta)Q(\beta)$ с начальными условиями

$U(0) = 1 = V(0)$. Тогда $U(\beta)V(\beta) = V(\beta)U(\beta) = 1$; в частности, $U(\beta)$ обратим. В самом деле,

$$\frac{d}{d\beta}(V(\beta)U(\beta)) = \frac{dV}{d\beta}U(\beta) + V(\beta)\frac{dU}{d\beta} = 0,$$

и, следовательно, $VU \equiv 1$. С другой стороны, если $F(\beta) = U(\beta)V(\beta)$, то $F(\beta)$—решение дифференциального уравнения $dF/d\beta = Q(\beta)F(\beta) - F(\beta)Q(\beta)$; $F(0) = 1$. Поскольку $F(\beta) \equiv 1$ есть решение этого уравнения с данным начальным условием, мы заключаем, что вследствие единственности решения, доказанной в лемме, $F(\beta) = 1$.

(iii) $U(\beta)P(0)V(\beta) = P(\beta)$. В самом деле, положим $\tilde{P}(\beta) = U(\beta)P(0)V(\beta)$. Тогда $d\tilde{P}(\beta)/d\beta = [Q(\beta), \tilde{P}(\beta)]$ с начальным условием $\tilde{P}(0) = P(0)$. Но, с другой стороны, согласно (i), $P(\beta)$ есть также решение уравнения $dP(\beta)/d\beta = [Q(\beta), P(\beta)]$ с $P(\beta)|_{\beta=0} = P(0)$. В силу единственности решения дифференциального уравнения, $\tilde{P}(\beta) = P(\beta)$.

(iv) Наконец, мы должны доказать, что $U(\beta)$ унитарен при вещественных β, если $P(\beta)$ самосопряжен при вещественных β. Допустим, что $P(\beta)^* = P(\beta)$, если $\beta = \bar{\beta}$. Из принципа симметрии Шварца следует, что $P(\beta)^* = P(\bar{\beta})$ при всех β. По определению Q, $Q(\beta)^* = -Q(\bar{\beta})$. Положим $\tilde{V}(\beta) = U(\bar{\beta})^*$. Тогда $d\tilde{V}/d\beta = -\tilde{V}(\beta)Q(\beta)$; $\tilde{V}(0) = 1$. В силу единственности решения дифференциального уравнения, $\tilde{V}(\beta) = V(\beta)$. Следовательно, при вещественных β имеем $U(\beta)^* = \tilde{V}(\beta) = V(\beta) = U(\beta)^{-1}$, так что U унитарен. ∎

XII.3. Асимптотическая теория возмущений

Элегантный аппарат регулярной теории возмущений, развитый в предыдущем разделе, не всегда применим даже к тем случаям, которые кажутся совсем простыми. Рассмотрим в $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ семейство гамильтонианов $H(\beta) = H_0 + \beta V$, где $H_0 = -d^2/dx^2 + x^2$ и $V = x^4$. Мы обсуждали самосопряженность этого семейства с различных точек зрения в гл. X. При любом $\beta > 0$ оператор $H(\beta)$ самосопряжен на $D(H_0) \cap D(V) = D(p^2) \cap D(x^4)$; см. задачу 23 к гл. X. Поскольку $D(H_0) = D(p^2) \cap D(x^2)$, очевидно, что область определения изменяется при включении возмущения. Значит, критерий аналитичности семейства операторов, используемый в теореме XII.9, уже неприменим. Подобным же образом меняется и область определения формы $Q(H(\beta))$. Фактически никакие критерии аналитичности здесь не могут выполняться, потому что разложение около точки $\beta = 0$ *расходится*.

Разные авторы пользовались следующим рассуждением, чтобы предсказать расходимость ряда теории возмущений для собственных значений оператора $H(\beta)$ при $\beta \neq 0$. Если β отрицательно, то $x^2+\beta x^4 \to -\infty$, когда $x \to \pm\infty$, так что $H_0+\beta V$ качественно совершенно отличен от H_0 (он на самом деле даже не самосопряжен в существенном). По этой причине естественно ожидать, что ряд теории возмущений при отрицательных β будет расходиться. Но, поскольку степенные ряды сходятся в круге, эти ряды не могут сходиться ни при каком β. Независимо от того, готовы ли мы принять эти наводящие соображения, они приводят к правильному выводу. Тщательный анализ позволяет доказать, что коэффициенты Релея—Шредингера a_n для энергии основного состояния $E_0(\beta)$ удовлетворяют условию $|a_n| \geqslant AB^n\Gamma(n/2)$ с подходящими константами A и B.

Таким образом, мы должны решить, имеют ли ряды теории возмущений какой-либо смысл в этом случае. Именно этим вопросом мы займемся в этом и в следующем разделах. Интерес к расходящимся рядам теории возмущений выходит далеко за рамки нерелятивистской квантовой теории. В некоторых (в настоящее время не до конца формализованных) квантовых теориях поля наиболее полезным вычислительным средством служит другой ряд теории возмущений, называемый рядом Гелл-Манна—Лоу или рядом Фейнмана. В некоторых случаях доказано, что эти ряды расходятся, и считается, что они расходятся и в других случаях. По этой причине, и в особенности благодаря сходству между некоторыми гамильтонианами теории поля и p^2+x^2+ $+\beta x^4$ (см. § X.7), задачи, которыми мы займемся в этом разделе, существенны для квантовой теории поля.

Проще всего формальный ряд интерпретировать как асимптотический.

Определение. Пусть f—функция, определенная на положительной вещественной полуоси. Будем говорить, что формальный ряд $\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ **асимптотический** для f при $z \downarrow 0$, тогда и только тогда, когда для каждого фиксированного N

$$\lim_{z \downarrow 0}\left(f(z)-\sum_{n=0}^{N} a_n z^n\right)\Big/ z^N = 0.$$

Пусть f определена в некотором секторе комплексной плоскости $\{z \mid 0<|z|<B,\ |\arg z| \leqslant \theta\}$; мы будем говорить, что ряд $\sum a_n z^n$ **асимптотический** для f при $|z| \to 0$ **равномерно в секторе**, если для каждого N

$$\lim_{\substack{|z|\to 0 \\ |\arg z| \leqslant \theta}}\left(f(z)-\sum_{n=0}^{N} a_n z^n\right)\Big/ z^N = 0.$$

Если $\sum a_n z^n$—асимптотический ряд для f, мы иногда будем писать

$$f \underset{z \downarrow 0}{\sim} \sum a_n z^n.$$

Заметим, что если $f \sim \sum a_n z^n$ и $f \sim \sum b_n z^n$ при $z \downarrow 0$, то

$$\lim_{z \downarrow 0} \left(\sum_{n=0}^{N} a_n z^n - \sum_{n=0}^{N} b_n z^n \right) \Big/ z^N = 0$$

для всех N, так что $a_n = b_n$ при всех n. Значит, *любая функция f имеет не более одного асимптотического ряда при $z \downarrow 0$.*

Пример 1. Рассмотрим функцию $f(z) = \exp(-z^{-1})$ при $z > 0$. Тогда $z^{-n} f(z) \to 0$ при $z \downarrow 0$, так что f имеет нулевой асимптотический ряд. Фактически нулевой ряд является асимптотическим равномерно в любом секторе $|\arg z| \leqslant \theta$ с $\theta < \pi/2$.

Этот пример иллюстрирует важную черту асимптотических рядов: *две различные функции могут иметь один и тот же асимптотический ряд.* Если говорится, что $f(z)$ имеет некоторый определенный асимптотический ряд, то это еще не дает никаких сведений о значении $f(z)$ для некоторого фиксированного отличного от нуля значения z. Нам известно, что $f(z)$ хорошо аппроксимируется посредством $a_0 + a_1 z$, когда z становится «малым», но это определение ничего не говорит о том, насколько мало «малое» z. Если асимптотический ряд $\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ не сходится, то типичное поведение таково: при «малом» z небольшое число первых частных сумм даст довольно хорошее приближение к $f(z)$, но, когда $N \to \infty$, эти суммы начинают сильно осциллировать и больше не служат хорошим приближением к $f(z)$. Для примера мы покажем сейчас, что ряд Релея—Шредингера для энергии основного состояния $E_0(\beta)$ гамильтониана $p^2 + x^2 + \beta x^4$ $(\beta > 0)$ является асимптотическим для $E_0(\beta)$ при $\beta \downarrow 0$. Для $\beta = 0{,}2$ вариационные методы (см. § XIII.2) дают значение $E_0(\beta) = 1{,}118292\ldots$. Первые 15 частных сумм приведены в следующей таблице:

N	$\sum_{n=0}^{N} a_n (0{,}2)^n$	N	$\sum_{n=0}^{N} a_n (0{,}2)^n$
1	1,150000	9	2,353090
2	1,097500	10	—2,442698
3	1,153750	11	13,253968
4	1,105372	12	—42,333586
5	1,176999	13	168,895730
6	1,049024	14	—796,466406
7	1,314970	15	3005,179546
8	0,686006		

Мы видим, таким образом, типичное поведение: сначала колебания около правильного ответа (на самом деле даже не очень около!) и затем страшная раскачка. И по мере того, как N становится больше, положение только ухудшается: 50-я частная сумма имеет порядок величины 10^{45}, а тысячный член — порядок 10^{2000}.

Пример 2. Пусть $f \in C^\infty([-1, 1])$. Тогда ряд $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$ является асимптотическим для f при $x \downarrow 0$ или $x \uparrow 0$. В самом деле, по формуле Тейлора с остаточным членом, имеем оценку

$$\left| f(x) - \sum_{n=0}^{N} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n \right| \leqslant \frac{|x|^{N+1}}{(N+1)!} \sup_{|a| \leqslant |x|} [|f^{(n+1)}(a)|].$$

Так как функции класса C^∞ могут быть неаналитическими, этот пример показывает что асимптотический ряд может не сходиться; но даже если ряд сходится, его сумма может не иметь ничего общего с функцией f (см. пример 1).

Мы определили аналитические семейства на открытых множествах. Допуская некоторую вольность речи, будем говорить, что семейство аналитично в замкнутом множестве, если оно непрерывно по норме на этом множестве и аналитично в его внутренности.

Теорема XII.14. Пусть H_0 — самосопряженный оператор. Допустим, что $H(\beta)$ — аналитическое семейство в области $\{\beta \mid 0 < |\beta| < B, |\arg \beta| \leqslant \theta\}$ и выполнены следующие условия:

(a) $\lim\limits_{\substack{|\beta| \to 0 \\ |\arg\beta| \leqslant \theta}} \|(H(\beta) - \lambda)^{-1} - (H_0 - \lambda)^{-1}\| = 0$ для некоторого $\lambda \notin \sigma(H_0)$;

(b) существует замкнутый симметрический оператор V, такой, что $C^\infty(H_0) \subset D(V)$ и $V[C^\infty(H_0)] \subset C^\infty(H_0)$;

(c) $C^\infty(H_0) \subset D(H(\beta))$ при всех β в указанном секторе, и для $\psi \in C^\infty(H_0)$ имеем $H(\beta)\psi = H_0\psi + \beta V\psi$.

Пусть E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0. Тогда, если $|\beta|$ мало и $|\arg\beta| \leqslant \theta$, существует в точности одно собственное значение $E(\beta)$ оператора $H(\beta)$ вблизи E_0. Более того, формальный ряд Релея — Шредингера $\sum a_n\beta^n$ для собственного значения оператора $H_0 + \beta V$ почленно конечен и является асимптотическим для $E(\beta)$ равномерно в этом секторе. Именно, для всех N

$$\lim_{\substack{|\beta| \to 0 \\ |\arg\beta| \leqslant \theta}} \left| E(\beta) - \sum_{n=0}^{N} a_n\beta^n \right| \Big/ \beta^N = 0.$$

Это главный результат настоящего раздела. Результат состоит из нескольких различных утверждений, по этой причине мы разделим и доказательство на несколько лемм. Первое утверждение заключается в том, что если β мало, то вблизи E_0 существует собственное значение $E(\beta)$ оператора $H_0+\beta V$. Мы подчеркнем это свойство, дав ему специальное название — устойчивость. В § 5 и 6 мы обсудим ситуации, когда устойчивость не имеет места. Второе утверждение относится к асимптотическому характеру ряда для $E(\beta)$. Аналогичный результат имеет место для собственного вектора, отвечающего $E(\beta)$ (см. задачу 24). Главный способ доказательства асимптотичности уже знаком нам по § 2. Это формулы

$$E(\beta)=\frac{(\Omega_0,\ (H_0+\beta V)\,P(\beta)\,\Omega_0)}{(\Omega_0,\ P(\beta)\,\Omega_0)} \quad \text{и} \quad P(\beta)=-\frac{1}{2\pi i}\oint (H(\beta)-E)^{-1}\,dE.$$

Как мы видели, эти формулы позволяют свести сложную структуру коэффициентов Релея — Шредингера к некоторым простым операциям с геометрическими рядами. Мы будем использовать главным образом остаточный член в этих рядах.

Определение. Пусть $A(\beta)$ — семейство операторов на множестве $\{\beta \mid 0<|\beta|<B,\ |\arg\beta|\leqslant\theta\}$. Предположим, что существует такой оператор A_0, что для некоторого $\lambda\notin\sigma(A_0)$

$$\underset{\substack{|\beta|\to 0\\ |\arg\beta|<\theta}}{s\text{-}\lim}\ (A(\beta)-\lambda)^{-1}=(A_0-\lambda)^{-1}.$$

Изолированное невырожденное собственное значение E_0 оператора A_0 называется **устойчивым**, если $A(\beta)$ имеет точно одно собственное значение вблизи E_0 при малых β и это собственное значение изолировано и невырожденно. Таким образом, E_0 устойчиво, если для всякого достаточно малого ε существует такое δ, что из $|\beta|<\delta$ и $|\arg\beta|\leqslant\theta$ следует, что в $\{E \mid |E-E_0|\leqslant\varepsilon\}$ имеется ровно одна точка из $\sigma(A(\beta))$ и эта точка является невырожденным собственным значением.

Лемма 1. Если выполнено условие (а) теоремы XII.14, то всякое изолированное невырожденное собственное значение оператора H_0 устойчиво.

Доказательство. Применяя первую резольвентную формулу, убеждаемся, что если $(H(\beta)-\lambda)^{-1}\to(H_0-\lambda)^{-1}$ по норме для некоторого $\lambda\notin\sigma(H_0)$, то резольвента сходится при всех $\lambda\notin\sigma(H_0)$ и сходимость равномерна на компактных множествах из $\rho(H_0)$. Значит, если ε задано так, что H_0 имеет лишь одно собственное значение в $\{E \mid |E-E_0|<\varepsilon\}$, то для некоторого δ заключаем, что $E \notin \sigma(H(\beta))$ при $|\beta| < \delta$, $|\arg \beta| \leqslant \theta$ и $|E - E_0| = \varepsilon$. Стало быть, при малых $|\beta|$

$$P(\beta) = \frac{-1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (H(\beta) - E)^{-1} dE$$

существует и сходится по норме к

$$P_0 = \frac{-1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (H_0 - E)^{-1} dE$$

при $|\beta| \to 0$. По теореме XII.5, P_0 есть проектор на собственный вектор оператора H_0, отвечающий собственному значению E_0. В силу леммы, предшествующей теореме XII.8, $P(\beta)$ одномерен, если $|\beta|$ мало. Таким образом, лемма 1 следует из теоремы XII.6. ∎

Теперь мы построим асимптотический ряд для $P(\beta)\Omega_0$.

Лемма 2. Предположим, что выполнены условия теоремы XII.14 и что Ω_0 — собственный вектор H_0 с собственным значением E_0. При малых $|\beta|$ пусть $\Omega(\beta) = P(\beta)\Omega_0$, где $P(\beta)$ задается вышеприведенными формулами. Тогда для всех N

$$\lim_{\substack{|\beta| \to 0 \\ |\arg \beta| < \theta}} \left\| \Omega(\beta) - \sum_{n=0}^{N} \varphi_n \beta^n \right\| \Big/ |\beta|^N = 0,$$

где

$$\varphi_n = (-1)^{n+1} (2\pi i)^{-1} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (H_0 - E)^{-1} [V(H_0 - E)^{-1}]^n \Omega_0 \, dE.$$

Доказательство. Пусть $|E - E_0| = \varepsilon$. Формально

$$(H(\beta) - E)^{-1} = \sum_{n=0}^{N} (-\beta)^n (H_0 - E)^{-1} [V(H_0 - E)^{-1}]^n + \\ + (-\beta)^{N+1} (H(\beta) - E)^{-1} [V(H_0 - E)^{-1}]^{N+1}.$$

Применим теперь обе части этого формального равенства к Ω_0. Так как $\Omega_0 \in C^\infty(H_0)$, обе части по условию (b) корректно определены. По условию (c) обе части дают один и тот же результат при действии на них оператора $H(\beta) - E$. Поскольку $E \notin \sigma(H(\beta))$, обе части равны. Применяя теорему о замкнутом графике, можно доказать, что $[V(H_0 - E)^{-1}]^N \Omega_0$ непрерывно по E на $\{E \mid |E - E_0| = \varepsilon\}$

(см. задачу 25). Следовательно,

$$\frac{1}{|\beta|^N}\left\|\Omega(\beta)-\sum_{n=0}^{N}\varphi_n\beta^n\right\|=$$
$$=\frac{|\beta|}{2\pi}\left\|\oint_{|E-E_0|=\varepsilon}(H(\beta)-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^{N+1}\Omega_0\,dE\right\|\leqslant$$
$$\leqslant\varepsilon|\beta|\sup_{\substack{|E-E_0|=\varepsilon\\ |\beta|<\delta\\ |\arg\beta|\leqslant\theta}}\|(H(\beta)-E)^{-1}\|\,\|[V(H_0-E)^{-1}]^{N+1}\Omega_0\|\to$$
$$\to 0 \text{ при } |\beta|\to 0. \blacksquare$$

Чтобы завершить доказательство теоремы, нам потребуется еще такая лемма, доказательство которой мы отнесем к задаче 26 (c).

Лемма 3. Пусть f и g — две функции, определенные в секторе $\{\beta\,|\,0<|\beta|<B, |\arg\beta|\leqslant\theta\}$. Допустим, что $f\underset{\beta\to 0}{\sim}\sum a_n\beta^n$ и $g\underset{\beta\to 0}{\sim}\sum b_n\beta^n$, причем $b_0\neq 0$. Если $\sum c_n\beta^n$ — формальный ряд для $\sum a_n\beta^n/\sum b_n\beta^n$, то он является асимптотическим для функции $h(\beta)=f(\beta)/g(\beta)$ при $\beta\to 0$.

Доказательство теоремы XII.14. Так как лемма 1 уже доказана, то остается только доказать, что ряд Релея — Шредингера почленно конечен и является асимптотическим. В силу леммы 2 и условия (b) ряды для $(H(\beta)\Omega_0, P(\beta)\Omega_0)$ и $(\Omega_0, P(\beta)\Omega_0)$ почленно конечные и асимптотические. Так как $\lim_{|\beta|\to 0}(\Omega_0, P(\beta)\Omega_0)=1\neq 0$, то с помощью леммы 3 доказательство завершается. $\blacksquare$

Наконец, зададимся вопросом: когда условие (a) может быть доказано? Сформулируем в этой связи две общие теоремы. Мы наметим доказательство лишь одной из них (см. в Замечаниях ссылки на литературу, где приведены полные доказательства). Как и в гл. XIII, мы будем говорить, что два ограниченных снизу самосопряженных оператора удовлетворяют условию $A\leqslant B$, если $Q(B)\subset Q(A)$ и $(\varphi, A\varphi)\leqslant(\varphi, B\varphi)$ при всех $\varphi\in Q(B)$.

Теорема XII.15. Предположим, что H_0 и V самосопряжены. Предположим далее, что

(i) $H_0\geqslant 0$;

(ii) при любом $a>0$ существует такое b, что

$$V_-\leqslant aH_0+b$$

(V_- есть отрицательная часть V, даваемая спектральной теоремой; если, в частности, $V\geqslant 0$, то $V_-=0$, так что (ii) выполнено);

(iii) при некоторых c и d

$$|V| \leqslant cH_0^2 + d.$$

Тогда $H_0 + \beta V$ есть аналитическое семейство типа (B) в плоскости с разрезом $\{\beta \mid |\arg \beta| < \pi,\ |\beta| > 0\}$ и при любом $\theta < \pi$

$$\lim_{\substack{|\beta| \to 0 \\ |\arg \beta| \leqslant \theta}} \|(H(\beta) - \lambda)^{-1} - (H_0 - \lambda)^{-1}\| = 0.$$

Теорема XII.16. Допустим, что H_0 и V — самосопряженные операторы. Допустим далее, что

(i) $H_0 \geqslant 0$;

(ii) при любом $a > 0$ существует такое b, что $V_- \leqslant aH_0 + b$;

(iii) при некотором d, некотором $c < 1$ и некотором B

$$\pm \beta [H_0^{1/2}, [H_0^{1/2}, V]] \leqslant c(H_0^2 + \beta^2 V^2) + d, \quad \text{если } 0 < \beta < B;$$

(iv) при всех $e > 0$ существует такое f, что

$$\pm \beta i [H_0, V] \leqslant e(H_0^2 + \beta^2 V^2) + f, \quad \text{если } 0 < \beta < B;$$

(v) при некоторых $p > 1$, g и h

$$|V|^{2/p} \leqslant gH_0^2 + h;$$

(vi) $H_0 + \beta V$ самосопряжен в существенном на $D(H_0) \cap D(V)$, если $0 < \beta < B$.

Тогда $H_0 + \beta V$ есть аналитическое семейство типа (B) в плоскости с разрезом и при любом $\theta < \pi$

$$\lim_{\substack{|\beta| \to 0 \\ |\arg \beta| \leqslant \theta}} \|(H(\beta) - \lambda)^{-1} - (H_0 - \lambda)^{-1}\| = 0.$$

Если, кроме того,

(iii′), (iv′) для любого B можно так выбрать d, f, чтобы выполнялись неравенства из (iii), (iv);

(vi′) оператор $H_0 + \beta V$ самосопряжен в существенном на $D(H_0) \cap D(V)$ при всех $\beta > 0$,

то $H(\beta)$ есть аналитическое семейство типа (A) в плоскости с разрезом.

Главная идея доказательства теоремы XII.16 состоит в том, чтобы воспользоваться условиями (ii), (iii) и (iv) для доказательства «квадратичных» оценок. Именно, при данном $\theta < \pi$ можно найти такие α, $\gamma > 0$, что

$$H_0^2 + |\beta|^2 V^2 \leqslant \alpha (H_0 + \beta V)^* (H_0 + \beta V) + \gamma$$

при всех β, таких, что $0<|\beta|<B$, $|\arg\beta|<\theta$. Отсюда следует, что $H_0+\beta V$ замкнут на $D(H_0)\cap D(V)$ (задача 27). Запишем теперь

$$\|(H_0+\beta V-\lambda)^{-1}-(H_0-\lambda)^{-1}\|\leqslant$$
$$\leqslant|\beta|^{1/p}\|(H(\beta)-\lambda)^{-1}|\beta V|^{1-1/p}|V|^{1/p}(H_0-\lambda)^{-1}\|.$$

По квадратичной оценке $(H(\beta)-\lambda)^{-1}|\beta V|^{1-1/p}$ равномерно ограничен в секторе $\{\beta\mid 0<\beta<B, |\arg\beta|<\theta\}$. В силу (v), $|V|^{1/p}(H_0-\lambda)^{-1}$ ограничен. Следовательно, $\|(H_0+\beta V-\lambda)^{-1}-(H_0-\lambda)^{-1}\|$ стремится к нулю не медленнее, чем $|\beta|^{1/p}$.

Пример 3 (ангармонический осциллятор). Пусть $H_0=-d^2/dx^2+x^2$ на $L^2(\mathbb{R})$ и $V=x^{2m}$. Тогда все условия теоремы XII.16 выполнены. Действительно, (i) и (ii) проверяются непосредственно; (vi) было доказано в примере 2 § X.4 и примере 2 § X.9. Чтобы доказать (iii) и (iv), следует проделать явные вычисления с операторами рождения и уничтожения A, $A^\dagger$, введенными в дополнении к § V.3 (см. задачу 28). Чтобы убедиться, что (v) выполняется с $p=m$ надо опять воспользоваться операторами A, $A^\dagger$ (задача 28). Поскольку V оставляет $C^\infty(H_0)$ инвариантным и применима теорема XII.16, выполнены все условия теоремы XII.14. Стало быть, собственные значения оператора $p^2+x^2+\beta x^{2m}$ имеют ряды Релея — Шредингера в качестве асимптотических рядов равномерно в секторах $|\arg\beta|\leqslant\theta<\pi$. Можно также доказать, что собственные значения имеют аналитическое продолжение на многолистные поверхности $|\arg\beta|\leqslant\theta$, $0<\beta<B_\theta$ при любом $\theta<(m+1)\pi/2$ и ряд будет асимптотическим на многолистной поверхности.

Пример 4 (теория поля $(\varphi^4)_2$ с пространственным обрезанием). Пусть H_0 — гамильтониан свободного бозонного поля с массой $m_0>0$ в двумерном пространстве-времени. Пусть $V=\int g(x):\varphi^4(x):dx$ с $g\in L^1\cap L^2$ и $g\geqslant 0$ (как обсуждалось в § X.7). Тогда можно доказать выполнение всех условий теоремы XII.16 (или теоремы XII.15). Единственное изолированное собственное значение H_0 — это фоковский вакуум. Теорема XII.14 в сформулированном виде неприменима, поскольку $C^\infty(H_0)$ не инвариантно относительно V. Однако, если N — оператор числа частиц, то V и $(H_0-E)^{-1}$ оставляют $C^\infty(N)$ инвариантным, а $\Omega_0\in C^\infty(N)$. Легко обобщить метод теоремы XII.14 для доказательства того, что ряд Релея — Шредингера является асимптотическим в случае, когда инвариантность $C^\infty(H_0)$ заменяется инвариантностью $C^\infty(N)$. На этом пути мы приходим к заключению, что энергия основного состояния гамильтониана $H_0+\beta V$ обладает асимптотическим рядом. Коэффициенты этого ряда задаются суммами диаграмм типа диаграмм Фейнмана (см. Замечания).

Если выполнено условие (а) теоремы XII.14, то эта теорема — удобное средство для доказательства устойчивости, однако есть такие случаи, когда оно не выполнено, но устойчивость может быть доказана следующим способом.

Теорема XII.16$^1/_2$. Пусть H_0 — замкнутый оператор и P — конечнсмерный *ортогональный* проектор, такой, что $\operatorname{Ran} P \subset D(H_0)$ и $H_0P = PH_0$. Допустим, что оператор $H_0 \restriction \operatorname{Ran}(1-P)$ секториальный с сектором $S_0 \equiv \{z \mid |\arg z| \leqslant \theta_0 < \pi/2\}$ и что $H_0 \restriction \operatorname{Ran} P$ имеет спектр вне S_0. Пусть V — замкнутый секториальный оператор с сектором S_0. Допустим, что $\operatorname{Ran} P \subset D(V) \cup D(V^*)$. Пусть E_0 — изолированное невырожденное собственное значение оператора $H_0 \restriction \operatorname{Ran} P$. Тогда для любых ε, $\delta > 0$ существует такое B, что сумма в смысле форм $H_0 + \beta V$ имеет в точности одно собственное значение $E(\beta)$ в $\{E \mid |E - E_0| < \varepsilon\}$ при β в области $Q \equiv \{\beta \mid |\arg \beta| \leqslant \leqslant \pi/2 - \theta_0 - \delta, \ |\beta| \leqslant B\}$. Это собственное значение невырожденно, это единственная спектральная точка оператора $H_0 + \beta V$ вблизи E_0 и

$$\sup \{ \| (H_0 + \beta V - E)^{-1} \| \mid |E - E_0| = \varepsilon, \ \beta \in Q \} < \infty.$$

Более того, допустим, что $H_0\Omega_0 = E_0\Omega_0$ и что $((H_0 - E)^{-1} V)^j \times \times (H_0 - E)^{-1} \Omega_0 \in D(V)$ при $|E - E_0| = \varepsilon$ для $j = 0, 1, \ldots, k$. Тогда коэффициенты Релея — Шредингера для $E(\beta)$ конечны по меньшей мере до порядка β^{k+1} и ряд Релея — Шредингера является асимптотическим в области Q по меньшей мере до этого порядка.

Доказательство. Достаточно доказать только устойчивость, так как утверждение об асимптотических рядах следует тогда из доказательств лемм 2 и 3. Напишем $V = V_1 + V_2$, где $V_1 = = (1-P) V (1-P)$, $V_2 = V - V_1$; V_2 — ограниченный оператор конечного ранга, так как $\operatorname{Ran} P \subset D(V) \cup D(V^*)$. Очевидно, $H_0 + \beta V_1$ секториален на $\operatorname{Ran}(1-P)$ при $\beta \in Q$ независимо от того, какие мы выберем B и δ и равен H_0 на $\operatorname{Ran} P$. Так как βV_2 ограничен, мы можем изучать его действие на $\sigma(H_0 + \beta V_1)$ при помощи регулярной теории возмущений. Результат состоит в том, что при малых β интересующая нас верхняя грань конечна, так что проектор $-(2\pi i)^{-1} \int (H_0 + \beta V - E)^{-1} dE$ имеет постоянную размерность. ∎

Пример 5. Пусть $H_0 = -\Delta + W$, где W — вещественнозначная функция, $W(x) \to 0$ при $x \to \infty$. Пусть $V = |x|$ (можно взять и $V = |x|^n$). В этом случае $H_0 + \beta V \to H_0$ в смысле сильной резольвентной сходимости. Равномерной резольвентной сходимости здесь не может быть, так как $(H_0 + \beta V - i)^{-1}$ компактен (см. § XIII.14), а $(H_0 - i)^{-1}$ не компактен. Следовательно, теорема XII.14 неприменима.

Если у H_0 есть отрицательные собственные значения, мы можем выбрать P проектором на соответствующие собственные векторы (или на те, которые отвечают m низшим собственным значениям; в таком случае мы добавим к H_0 константу, для того чтобы обеспечить секториальность $H_0\restriction(1-P)$ относительно сектора S_0). Так как собственные векторы H_0 убывают экспоненциально (см. § XIII.11), то $\operatorname{Ran} P\subset D(V)=D(V^*)$, так что условия первой части теоремы XII.16$^1/_2$ выполнены. Более того, при очень слабых предположениях о W можно показать, пользуясь методом § XIII.11, что при E вблизи E_0 и малых a оператор $(H_0-E)^{-1}$ есть ограниченное отображение $\mathscr{H}_a$ на себя, где

$$\mathscr{H}_a=\{\psi \mid \|\psi\|_a=\|e^{a|x|}\psi\|_2<\infty\}.$$

Так как $\Omega_0\in\mathscr{H}_a$ при малых a и V ограничен как оператор из $\mathscr{H}_a$ в $\mathscr{H}_{a/2}$, мы можем проверить условие второй части теоремы XII.16$^1/_2$ при любом k. Следовательно, ряд Релея — Шредингера асимптотический во всех порядках и при любом β, удовлетворяющем условию $\operatorname{Re}\beta>0$. Если $\beta<0$, то собственное значение не устойчиво, однако ряд Релея — Шредингера, как мы увидим в § 5, сохраняет свое значение.

Наконец, рассмотрим пример, который показывает, что иногда и при неустойчивых собственных значениях удается доказать, что ряд Релея — Шредингера асимптотический. Однако это требует подробного рассуждения. Этот пример также весьма наглядно иллюстрирует, что две различные функции могут иметь один асимптотический ряд.

Пример 6 (потенциал двойной ямы). Рассмотрим семейство операторов на $L^2(\mathbb{R})$:

$$H(\beta)=-d^2/dx^2+x^2+2\beta x^3+\beta^2x^4.$$

Поскольку полный потенциал можно записать в виде $x^2(1+\beta x)^2$, то, очевидно, $H(\beta)$ при любом $\beta\geqslant 0$ ограничен снизу. Применяя методы гл. X, мы видим, что $H(\beta)$ самосопряжен в существенном на $\mathscr{S}(\mathbb{R})$, а методы § XIII.4 или § XIII.14 показывают, что он имеет чисто дискретный спектр и полный набор собственных векторов. Хотя $H(\beta)$ не линеен по β, нетрудно обобщить формулы, полученные в § 1, и получить формальные ряды для собственных значений: следует писать $2\beta x^3+\beta^2x^4$ вместо V в формулах § 1 вплоть до порядка n, а затем собрать все члены порядка n. Так как $(\Omega_n, (2\beta x^3+\beta^2x^4)\Omega_m)=0$, если $|n-m|>4$ для невозмущенных собственных векторов Ω_n оператора $H(0)$, то все суммы в определении ряда Релея — Шредингера конечны, и мы получаем для собственных значений $H(\beta)$ формальный ряд $\sum_{n=0}^{\infty}a_n\beta^n$. Так как вся задача инвариантна по отношению к одновременной замене $x\to -x$, $\beta\to-\beta$, то $a_{2n+1}=0$ при всех n.

До сих пор эта задача как будто не слишком отличается от ангармонического осциллятора примера 3, и действительно, если заменить 2 в члене $2\beta x^3$ на некоторое θ, $-2 < \theta < 2$, то можно доказать резольвентную сходимость по норме при $\beta \downarrow 0$. Однако заметим, что полный потенциал исчезает также при $x = -\beta^{-1}$. Действительно, сдвигая x на $-^1/_2\beta^{-1}$, мы получим унитарно эквивалентный оператор

$$\tilde{H}(\beta) = -d^2/dx^2 + {}^1/_{16}\beta^{-2} - {}^1/_2 x^2 + \beta^2 x^4.$$

Так как потенциальный член в $\tilde{H}(\beta)$ симметричен относительно замены $x \mapsto -x$, то очевидно что потенциал в $H(\beta)$ имеет две идентичные ямы: одну с центром в $x = 0$ и вторую — в $x = -\beta^{-1}$. В результате при весьма малых β мы ожидаем наличия двух собственных значений вблизи E_0 — энергии основного состояния оператора $H(0)$, так как можно получить два почти ортогональных вектора с энергией около E_0, пользуясь основным состоянием $\Omega_0(x)$ оператора $H(0)$ и сдвинутым состоянием $\Omega_0(x+\beta^{-1})$. По этой причине мы будем обозначать собственные значения $H(\beta)$ при $\beta > 0$ символами $E_0(\beta) < E_0'(\beta) < E_1(\beta) < E_1'(\beta) < \ldots$ а соответствующие собственные векторы — символами $\Omega_0(x, \beta)$, $\Omega_0'(x, \beta)$ и т. д. Во избежание недоразумений штрих будет употребляться ниже только для различения этих двух серий, а не для производных; E_0, E_1, ... — это те собственные значения $\tilde{H}(\beta)$, собственные функции которых инвариантны относительно замены $x \mapsto -x$, а E_0', E_1', ... — те, чьи собственные функции нечетны относительно замены $x \mapsto -x$. Мы ожидаем, что при $\beta \downarrow 0$ *оба* значения $E_0(\beta)$ и $E_0'(\beta)$ приближаются к E_0, т. е. собственное значение E_0 оператора $H(0)$ *неустойчиво*. Более того, у нас есть основания ожидать, что $E_0(\beta) - E_0'(\beta)$ стремится к нулю очень быстро, а именно как $\exp(-a\beta^{-2})$ с соответствующим a. В самом деле, истинные собственные функции $\tilde{H}(\beta)$ четны или нечетны относительно $x \mapsto -x$. Если мы начинаем в момент $t = 0$ с состояния типа $N(\beta)^{-1}[\Omega_0(x, \beta) + \Omega_0'(x, \beta)]$, сосредоточенного около $x = 0$, то по прошествии времени $t = \pi/(E_0' - E_0)$ это состояние, развиваясь в согласии с динамикой, описываемой $H(\beta)$, окажется сосредоточенным в $x = -\beta^{-1}$, т. е. оно пройдет сквозь потенциальный барьер между двумя ямами. Стало быть, $E_0'(\beta) - E_0(\beta)$ должна быть того же порядка, что вероятность туннельного эффекта, а эта последняя имеет порядок $\exp(-d\sqrt{h})$, где d — ширина барьера, т. е. $1/\beta$, а h — высота барьера, т. е. $\beta^{-2}/16$.

Итак, мы ожидаем, что два собственных значения $E_0(\beta)$ и $E_0'(\beta)$ приближаются к единому собственному значению E_0 оператора $H(0)$ и что оба они имеют в качестве асимптотического ряда один и тот же ряд Релея — Шредингера. Мы наметим доказательство этих фактов, оставляя все детали читателю (задача 36).

Рассуждение здесь довольно сложное, и мы будем свободно пользоваться средствами из гл. XIII. Мы установим три факта. (i) При $\beta\downarrow 0$ и $E_i(\beta)$, и $E_i'(\beta)$ приближаются к $E_l(0)\equiv E_l$ и, в частности, существует независимый от β промежуток между $E_0'(\beta)$ и $E_1(\beta)$ при $\beta\to 0$. (ii) Мы докажем, что $\exp(-a\beta^{-2})\leqslant \leqslant E_0'(\beta)-E_0(\beta)\leqslant \exp(-b\beta^{-2})$ при $\beta\downarrow 0$ с соответствующими a и b (iii) Мы покажем, что $E_0(\beta)$ (а значит, в силу (ii), и $E_0'(\beta)$) имеет ряд Релея—Шредингера в качестве асимптотического ряда.

Как первый шаг к установлению (i) рассмотрим операторы $H^{\mathrm{D}}(a)$ и $H^{\mathrm{N}}(a)$ на $L^2(-a, a)$, задаваемые посредством $-d^2/dx^2+x^2$ с граничными значениями Дирихле (соответственно Неймана) в $x=\pm a$. Пусть $E_n^{\mathrm{D}}(a)$ и $E_n^{\mathrm{N}}(a)$ обозначают собственные значения $H^{\mathrm{D}}(a)$ и $H^{\mathrm{N}}(a)$. Пусть E_n обозначает собственные значения $-d^2/dx^2+x^2$ на всем $L^2(\mathbb{R})$. Методы § XIII.15 позволяют получить неравенства

$$E_n^{\mathrm{N}}(a)\leqslant E_n\leqslant E_n^{\mathrm{D}}(a), \tag{5a}$$

если $a^2\geqslant E_n=2n+1$. (Это условие понадобилось нам для того, чтобы, когда в $L^2(\mathbb{R})$ будет сформулирована краевая задача с граничными условиями Неймана в $x=\pm a$, наименьшие собственные значения для интервалов $|x|\geqslant a$ были больше E_n.) Мы покажем, что

$$E_n^{\mathrm{D}}(a)\leqslant E_n^{\mathrm{N}}(a)+\exp(-ca^2) \tag{5b}$$

при больших a. Насколько больших—зависит от n. Пусть $\psi_n^{\mathrm{N}}(x;a)$ обозначает n-й нормированный собственный вектор оператора $H^{\mathrm{N}}(a)$. Мы утверждаем, что при достаточно больших a

$$|\psi_n^{\mathrm{N}}(a;\ a)|\leqslant \exp(-{}^1/_{12}a^2). \tag{6}$$

Чтобы доказать (6), рассмотрим $\varphi(x)$—решение уравнения $-\varphi''+x^2\varphi=E_n^{\mathrm{N}}(a)\varphi$ с граничными условиями $\varphi'(a)=0$, $\varphi(a)=1$. Выберем a настолько большим, чтобы было $a>16$ и $(a/2)^2\geqslant \geqslant(a^2/9)+(2n+1)$. Тогда в интервале $[{}^1/_2a, a]$ имеем $x^2-E_n^{\mathrm{N}}(a)\geqslant \geqslant a^2/9$, так как $E_n^{\mathrm{N}}(a)\leqslant 2n+1$. Следовательно, в силу рассуждений, построенных на сравнении, такого типа, какими мы пользовались в § XI.2, $\varphi(x)\geqslant \operatorname{ch}({}^1/_3a(x-a))$ при $x\in[{}^1/_2a,\ a]$. В частности, $\varphi(x)\geqslant {}^1/_2\exp({}^1/_{12}a^2)$ при $x\in[{}^1/_2a,\ {}^3/_4a]$, и, значит, так как $a>16$,

$$\int\limits_{a/2}^{3a/4}|\varphi(x)|^2dx\geqslant \operatorname{ch}({}^1/_6a^2).$$

Поскольку $\psi_n^{\mathrm{N}}(x;\ a)$ отличается от φ только множителем нормировки, (6) выполнено. Для дальнейших нужд заметим, что аналогичные рассуждения показывают, что

$$\left|\frac{\partial\psi_n^{\mathrm{D}}}{\partial x}(a;\ a)\right|\leqslant \exp(-ca^2). \tag{6$'$}$$

Фиксируем теперь n_0 и выберем a_0 так, чтобы (6) выполнялось для $n=0, 1, \ldots, n_0$ и чтобы было $a \geqslant a_0$. Положим

$$\eta_i(x) = \begin{cases} \psi_i^{\mathrm{N}}(x;\ a) - \psi_i^{\mathrm{N}}(a;\ a), & i=0,\ 2,\ \ldots, \\ \psi_i^{\mathrm{N}}(x;\ a) - a^{-1}x\psi_i^{\mathrm{N}}(a;\ a), & i=1,\ 3,\ \ldots . \end{cases}$$

Тогда $\eta_i(x)$ исчезают при $x=\pm a$, так что они будут подходящими пробными функциями для $H^{\mathrm{D}}(a)$, т. е. они лежат в $Q(H^{\mathrm{D}}(a))$. Вследствие (6) $\Delta_{ij}=(\eta_i,\ \eta_j)$ и $E_{ij}=(\eta_i,\ H^{\mathrm{D}}(a)\eta_j)$ удовлетворяют при $0 \leqslant i,\ j \leqslant n_0$ неравенствам

$$|\Delta_{ij}-\delta_{ij}| \leqslant d \exp\left(-\frac{1}{20}a^2\right), \qquad |E_{ij}-E_i^{\mathrm{N}}(a)\delta_{ij}| \leqslant d \exp\left(-\frac{1}{20}a^2\right)$$

при подходящем d. Пусть $E_{(i)}$ будет i-м собственным значением $\Delta^{-1/2}E\Delta^{-1/2}$, где $\Delta=\{\Delta_{ij}\}$ и $E=\{E_{ij}\}$. По методу Релея — Ритца из § XIII.2, $E_{(i)} \geqslant E_i^{\mathrm{D}}(a)$ (для $i=0,\ \ldots,\ n_0$), и в силу предыдущих неравенств

$$\|\Delta^{-1/2}E\Delta^{-1/2}-E_i^{\mathrm{N}}\delta_{ij}\| \leqslant d_1 \exp(-{}^1/_{20}a^2).$$

Следовательно, $|E_{(i)}-E_i^{\mathrm{N}}| \leqslant d_1 \exp(-{}^1/_{20}a^2)$, так что (5b) выполняется.

Теперь мы можем установить (i). Из формы $\tilde{H}(\beta)$ видно, что E_i (соответственно E_i') есть собственное значение с номером $i+1$ оператора $-d^2/dx^2+x^2+2\beta x^3+\beta^2x^4$ на $L^2(-{}^1/_2\beta^{-1},\ \infty)$ с граничными условиями Неймана (соответственно Дирихле) в $x=-\beta^{-1}/2$. Фиксируем $a>\sqrt{2n+1}$ и наложим дополнительное граничное условие Дирихле или Неймана в $x=\pm a$. Пусть $E_{i,\,\mathrm{D}}(\beta,\ a)$, $E_{i,\,\mathrm{N}}(\beta,\ a)$, $E'_{i,\,\mathrm{D}}(\beta,\ a)$, $E'_{i,\,\mathrm{N}}(\beta,\ a)$ обозначают соответствующие собственные значения. При помощи «вилки» Дирихле — Неймана (§ XIII.15) получаем

$$E_{i,\,\mathrm{N}}(\beta,\ a) \leqslant E_i(\beta) \leqslant E_{i,\,\mathrm{D}}(\beta,\ a)$$

и аналогично для штрихованных величин. Устремляя β к нулю, мы видим, что

$$E_i^{\mathrm{N}}(a) \leqslant \underline{\lim}\, E_i(\beta) \leqslant \overline{\lim}\, E_i(\beta) \leqslant E_i^{\mathrm{D}}(a),$$

где $E_i^{\mathrm{N}}(a)$ определен выше. Устремляя теперь a к ∞ и пользуясь неравенствами (5), мы видим, что $|E_i(\beta)-E_i| \to 0$ при $\beta \to 0$.

В качестве подготовки к доказательству (ii) заметим, что $\|\Omega_i(\beta)-\tilde{\Omega}_i(\beta)\| \to 0$ и $\|\Omega_i'(\beta)-\tilde{\Omega}_i'(\beta)\| \to 0$ при $\beta \downarrow 0$, где $\tilde{\Omega}_i(x,\ \beta)=2^{-1/2}(\Omega_i(x)+\Omega_i(x+\beta^{-1}))$ и $\tilde{\Omega}_i'(x,\ \beta)=2^{-1/2}(\Omega_i(x)-\Omega_i(x+\beta^{-1}))$. Действительно, $\tilde{\Omega}_i$ четна относительно отражения в $x=-{}^1/_2\beta^{-1}$ и

$$\|(H(\beta)-E_i(\beta))\,\tilde{\Omega}_i\| \to 0$$

при $\beta\downarrow 0$. Так как $H(\beta)$ имеет лишь одно собственное значение с четной собственной функцией вблизи $E_l(\beta)$, получаем, что $\|\Omega_l(\beta)-\tilde{\Omega}_l(\beta)\|\to 0$. Аргументация для штрихованных величин аналогична. В частности,

$$\int_{-1/2\beta^{-1}}^{\infty} \Omega_l(x, \beta)\,\Omega_l'(x, \beta)\,dx \to \frac{1}{2} \quad \text{при} \quad \beta\downarrow 0. \tag{7}$$

Пользуясь (7), граничными условиями при $x=-1/2\beta^{-1}$ и интегрируя по частям

$$\int_{-1/2\beta^{-1}}^{\infty} [\Omega_l(H(\beta)\,\Omega_l')-\Omega_l'(H(\beta)\,\Omega_l)]\,dx,$$

находим, что

$$\frac{1}{2}(E_l'-E_l)=\Omega_l\left(-\frac{1}{2}\beta^{-1},\ \beta\right)\frac{d}{dx}\Omega_l'\left(-\frac{1}{2}\beta^{-1},\ \beta\right). \tag{8}$$

При помощи метода, которым мы доказывали (6) и (6′), исходя из того, что на $(-1/2\beta^{-1},\ 0)$ выполнено $1/4x^2\leqslant x^2(1+\beta x)^2\leqslant x^2$, легко показать, что правая часть (8) ограничена снизу величиной $\exp(-a\beta^{-2})$, а сверху — величиной $\exp(-b\beta^{-2})$. Это завершает доказательство (ii).

Обратимся теперь к (iii). При $\varphi\in\mathscr{S}$, как легко видеть, $(H(\beta)-H(0))\varphi\to 0$, когда $\beta\downarrow 0$. Так как спектр $H(\beta)$ стремится к спектру $H(0)$ в силу (i), очевидно, что $(H(\beta)-z)^{-1}-(H(0)-z)^{-1}\to 0$ сильно при $\beta\downarrow 0$, если $z\neq 2n+1$. В частности, если

$$P(\beta)=\frac{1}{2\pi i}\int_{|z-1|=1/2}(z-H(\beta))^{-1}dz$$

то $P(\beta)\to P(0)$ сильно, когда $\beta\downarrow 0$. Разумеется, $P(0)$ — проектор ранга 1, а $P(\beta)$ при $\beta\neq 0$ — проектор ранга 2. Как обычно, $e(\beta)\equiv(\Omega_0,\ P(\beta)\,\Omega_0)^{-1}(\Omega_0,\ H(\beta)\,P(\beta)\,\Omega_0)$ имеет в качестве асимптотического ряда ряд Релея — Шредингера. Далее, $e(\beta)=\theta(\beta)\,E_0(\beta)+(1-\theta(\beta))\,E_0'(\beta)$ с подходящей функцией $\theta(\beta)$. Поскольку $E_0-E_0'\to 0$ быстрее, чем любая степень β, оба $E_0(\beta)$ и $E_0'(\beta)$ имеют в качестве асимптотического ряда один и тот же ряд Релея — Шредингера.

XII.4. Методы суммирования в теории возмущений

Самая мысль, что функция может быть определена расходящимся асимптотическим рядом, была совершенно чужда сознанию девятнадцатого века. Когда Борель, в то время еще неизвестный молодой человек, открыл, что его методы суммирования дают «правильный» ответ для многих классических расходящихся рядов, он решил совершить путешествие в Стокгольм к Миттаг-Леффлеру, признанному главе комплексного анализа. Миттаг-Леффлер вежливо выслушал все то, что Борель хотел ему сказать, и затем, положив руку на полное собрание сочинений своего учителя Вейерштрасса, сказал по-латыни: «Мастер запрещает это».

РАССКАЗ МАРКА КАЦА

Итак, мы видели, что расходящийся ряд теории возмущений, такой, например, как ряд для уровней энергии оператора $p^2+x^2+\beta x^4$, тем не менее может давать некоторые сведения относительно истинных уровней энергии и что при достаточно широких условиях ряд Релея — Шредингера является асимптотическим. Мы видели также, что если о некотором ряде говорится, что он является асимптотическим, то это очень слабое утверждение; в частности, если $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ есть асимптотический ряд для $E(\beta)$, то это еще не дает нам никаких сведений о $E(\beta_0)$ при фиксированном $\beta_0 \neq 0$. В этом разделе мы изучим вопрос, не может ли тем не менее расходящийся ряд теории возмущений определять энергетический уровень $E(\beta)$, если пользоваться какими-либо более изощренными методами, чем прямое суммирование.

Прежде всего мы поищем какое-либо условие, более сильное, чем утверждение что $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ — асимптотический ряд для $E(\beta)$, и более слабое, чем утверждение, что ряд сходится, но такое, которое все же единственным образом определяет $E(\beta)$. Напомним, что неединственность функции, представляемой асимптотическим рядом, следует из того, что ненулевые функции, такие, как $\exp(-\beta^{-1})$, могут иметь нулевой асимптотический ряд. Мы ищем, таким образом, более сильное условие, которое гарантировало бы единственность. Такое условие дается следующей теоремой Карлемана.

Теорема XII.17 (теорема Карлемана). Пусть g — функция, аналитическая внутри сектора $S=\{z \mid 0 \leqslant |z| \leqslant B,\ |\arg z| \leqslant \pi/2\}$ и непрерывная на S. Предположим, что для каждого n

$$|g(z)| \leqslant b_n |z|^n$$

при всех z внутри сектора. Если еще $\sum\limits_{n=1}^{\infty} b_n^{-1/n} = \infty$, то g — тождественный нуль.

Нам понадобится только частный случай теоремы Карлемана, который мы докажем ниже. Отметим, что условие $|g(z)| \leqslant b_n |z|^n$ утверждает в точности, что g имеет нулевой асимптотический ряд. Дополнительное условие $\sum\limits_{n=1}^{\infty} b_n^{-1/n} = \infty$ есть граница, указывающая, насколько быстро $b_n^{-1/n}$ может стремиться к нулю, или, эквивалентно, насколько быстро b_n может стремиться к бесконечности. Так как $\sum\limits_{n=1}^{\infty} n^{-1}$ только слегка расходится, то условие $\sum\limits_{n=1}^{\infty} b_n^{-1/n} = \infty$ совсем ненамного слабее оценки $b_n \leqslant C_0 B_0^n n^n$ с соответствующим образом выбранными C_0 и B_0, или, что эквивалентно, $b_n \leqslant CB^n n!$ с соответствующими C и B. Это позволяет придать теореме Карлемана такую форму:

Теорема XII.18. Допустим, что g есть функция, аналитическая внутри и непрерывная на $S = \{z \mid |\arg z| \leqslant {}^1/_2\pi + \varepsilon,\ 0 < |z| \leqslant R\}$ с некоторым $\varepsilon > 0$. Если существуют C и B, такие, что

$$|g(z)| \leqslant CB^n n!\, |z|^n$$

при всех $z \in S$ и при всех n, то g — тождественный нуль.

Доказательство. Для упрощения обозначений положим $w = z^{-1}$ и $f(w) = g(w^{-1})$. Тогда f аналитична в

$$\tilde{S} = \{w \mid |\arg w| \leqslant {}^1/_2\pi + \varepsilon,\ |w| \geqslant R^{-1}\}.$$

При всех n и всех $w \in \tilde{S}$ имеем $|f(w)| \leqslant CB^n n!\, |w|^{-n}$. По формуле Стирлинга, для любого $\delta > 0$ можно найти такое D_δ, что $n! \leqslant D_\delta n^n e^{-n(1-\delta)}$. Выбирая n наибольшим целым, меньшим $|w|/B$, видим, что $|f(w)| \leqslant C' e^{-\varepsilon |w|}$ с некоторыми C' и ε. Пользуясь принципом Фрагмена — Линделёфа, мы покажем, что $f(w_0) = 0$, если w_0 вещественно и $w_0 > R^{-1}$, и с помощью аналитического продолжения заключим, что $f \equiv 0$. Выберем α так, что $\alpha({}^1/_2\pi + \varepsilon) = {}^1/_2\pi$. Пусть $f_m(w) = f(w) \exp[m(w/w_0)^\alpha]$. Так как $\alpha < 1$ и $|f(w)| \leqslant C' e^{-\varepsilon |w|}$, то $f_m(w) \to 0$ при $|w| \to \infty$. Следовательно, по принципу максимума,

$$|f_m(w_0)| \leqslant \max \{|f_m(w)| \mid |w| = R^{-1} \text{ или } |\arg w| = {}^1/_2\pi + \varepsilon\}.$$

Положив $M_1 = \max\{|f(w)| \mid |w| = R^{-1}\}$ и $M_2 = \max\{|f(w)| \mid |\arg w| = {}^1/_2\pi + \varepsilon\}$, видим, что

$$|f_m(w_0)| \leqslant \max\{M_1 \exp[m(R^{-1}/w_0)^\alpha],\ M_2\},$$

откуда

$$|f(w_0)| \leqslant \max\{M_1 \exp[m(-1+(R^{-1}/w_0)^{\alpha})],\ M_2 \exp[-m]\}.$$

Так как m произвольно, $f(w_0)=0$. ∎

В процессе доказательства мы установили, что если f аналитична в $\tilde{S}$ и убывает экспоненциально, то f есть нуль. Некоторое расширение этого факта (теорему Карлсона) мы докажем и будем использовать в § XIII.13.

Как видно из доказанной теоремы, мы выделили условие более сильное, чем утверждение, что $E(\beta)$ имеет асимптотический ряд $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$.

Определение. Будем говорить, что функция $E(\beta)$, аналитическая в секторе $\{\beta \mid 0<|\beta|<B,\ |\arg\beta|<{}^1/_2\pi+\varepsilon\}$, удовлетворяет **сильному асимптотическому условию** и имеет $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ в качестве **сильного асимптотического ряда,** если существуют такие C и σ, что при всех N и всех β в данном секторе

$$\left|E(\beta)-\sum_{n=0}^{N} a_n\beta^n\right| \leqslant C\sigma^{N+1}(N+1)!\,|\beta|^{N+1}.$$

Теорема XII.19. Если $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ — сильный асимптотический ряд для двух аналитических функций f и g, то $f=g$.

Доказательство. В силу предположения,

$$|f(\beta)-g(\beta)| \leqslant 2C\sigma^{N+1}(N+1)!\,|\beta|^{N+1}$$

в $\{\beta \mid 0<|\beta|\leqslant{}^1/_2B,\ |\arg\beta|\leqslant{}^1/_2(\pi+\varepsilon)\}$, поэтому из теоремы XII.18 следует, что $f-g=0$. ∎

Чтобы понять, что дает идея сильного асимптотического условия в применении к собственным значениям, полезна следующая простая лемма технического характера (задача 26).

Лемма. Если f и g удовлетворяют сильным асимптотическим условиям и $\lim_{|\beta|\to 0} g(\beta)\neq 0$, то отношение f/g удовлетворяет сильному асимптотическому условию и его асимптотический ряд дается формальным отношением асимптотических рядов для f и g.

Пример 1. Рассмотрим уровни энергии ангармонического осциллятора $p^2+x^2+\beta x^4$. Мы видели, что $E(\beta)=(H(\bar{\beta})\Omega_0,\ P(\beta)\Omega_0)/(\Omega_0,\ P(\beta)\Omega_0)$. По предыдущей лемме, достаточно получить оценку вида $C\sigma^{N+1}(N+1)!\,|\beta|^{N+1}$ нормы остатка $P(\beta)\Omega_0$ после вычитания первых N членов асимптотического ряда. Поскольку $P(\beta)$ задан как интеграл от резольвенты, следует лишь установить сильное асимптотическое условие для $(H(\beta)-E)^{-1}\Omega_0$ с оценкой, равномерной по $|E-E_0|=\varepsilon$. Остаточный член, который мы должны оценить, есть в точности отстаточный член геометрического ряда:

$$(H(\beta)-E)^{-1}\Omega_0-\sum_{n=0}^{N}(-\beta)^n(H_0-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^n\Omega_0=$$
$$=(-\beta)^{N+1}(H(\beta)-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^{N+1}\Omega_0.$$

Так как $\|(H(\beta)-E)^{-1}\|$ равномерно ограничена вследствие сходимости по норме, доказанной в предыдущем разделе, то нам нужно только доказать, что

$$\|[x^4(p^2+x^2-E)^{-1}]^{N+1}\Omega_0\|\leqslant C\sigma^{N+1}(N+1)!$$

при $|E-{}^1/_2|={}^1/_2$. В терминах стандартных операторов A, $A^\dagger$, обсуждавшихся в дополнении к § V.3, $x^4={}^1/_4(A+A^\dagger)^4$, так что интересующая нас норма может быть оценена посредством $(2^4)^{N+1}$ членов вида

$$4^{-N-1}\|A_1^{\#}\dots A_4^{\#}(H_0-E)^{-1}A_5^{\#}\dots A_{4N+4}^{\#}(H_0-E)^{-1}\Omega_0\|,$$

где каждый $A^{\#}$ есть или A, или $A^\dagger$. Оценка $C\sigma^{N+1}(N+1)!$ получается с помощью формул

$$A\Omega_n=\sqrt{n}\,\Omega_{n-1},\quad A^\dagger\Omega_n=\sqrt{n+1}\,\Omega_{n+1},$$
$$(H_0-E)^{-1}\Omega_n=(2n+1-E)^{-1}\Omega_n.$$

Следовательно, энергетические уровни осциллятора $p^2+x^2+\beta x^4$ удовлетворяют сильному асимптотическому условию; в частности, уровни энергии ангармонического осциллятора единственным образом определяются соответствующими рядами Релея — Шредингера.

Саймон обобщил приведенное рассуждение на абстрактную ситуацию. Из полученных при этом результатов типичен следующий.

Теорема XII.20. Пусть H_0, V и M — самосопряженные операторы, удовлетворяющие следующим условиям:

(i) $H_0\geqslant 0$;

(ii) для каждого $a>0$ существует такое b, что $V_-\leqslant aH_0+b$;

(iii) $|V|\leqslant cH_0^2+d$ для некоторых c и d;

(iv) $0\leqslant M\leqslant H_0$;

(v) M и H_0 коммутируют;

(vi) $C^\infty(M)\subset D(V)$ и V переводит $C^\infty(M)$ в себя;

(vii) существуют такие константы e и f, что для любых n и всех $\psi \in C^\infty(M)$

$$\|(M+1)^n V\psi\| \leqslant e\|(M+f)^{n+2}\psi\|.$$

Пусть $H_0+\beta V$ определено как сумма форм при малых $|\beta|$ и $|\arg\beta| < \pi-\varepsilon$. Тогда любому изолированному невырожденному собственному значению H_0 отвечает при малых $|\beta|$ собственное значение $H_0+\beta V$ и ряд Релея—Шредингера есть его сильный асимптотический ряд.

Доказательство см. в литературе, указанной в Замечаниях.

Эта теорема позволяет распространить идею примера 1 на n-мерный ангармонический осциллятор. В частности, если $\mathscr{H}=L^2(\mathbb{R}^n)$,

$$H_0=\sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\omega_i^2x_i^2\right) \quad \text{и} \quad V=\sum_{i,\,j,\,k,\,l=1}^{n} a_{ijkl}x_ix_jx_kx_l,$$

где коэффициенты a таковы, что $V(x)\geqslant 0$ при всех $x\in\mathbb{R}^n$, то любому невырожденному собственному значению E_0 оператора H_0 отвечает ряд Релея—Шредингера, являющийся сильным асимптотическим рядом для собственного значения $E(\beta)$ оператора $H(\beta)= =H_0+\beta V$, причем $E(0)=E_0$.

Пример 2 ($(\varphi^4)_2$ с пространственным обрезанием). В § X.7 мы коротко обсудили полевые теории с пространственным обрезанием в двумерном пространстве-времени:

$$H_0=\int\sqrt{m^2+k^2}a^\dagger(k)\,a(k)\,dk=d\Gamma\left(\sqrt{k^2+m^2}\right),$$

$$V=\int g(x):\varphi^4(x):dx,$$

где $g\in L^2\cap L^1$, $g\geqslant 0$ и

$$M=\int a^\dagger(k)\,a(k)\,dk=d\Gamma(1)$$

—оператор числа частиц. Можно убедиться, что выполнены все условия теоремы XII.20. Труднее всего доказать условие (ii), которое обсуждалось в § X.9. Следовательно, ряд Релея—Шредингера для энергии основного состояния есть сильный асимптотический ряд для энергии точного основного состояния. Как мы уже отмечали, ряд Релея—Шредингера в этом случае задается суммами фейнмановских диаграмм. Этот пример позволяет думать, что в более общей ситуации фейнмановский ряд может быть сильным асимптотическим рядом.

Из сильного асимптотического условия вытекает, что $|a_n| < < C\sigma^n n!$. В простых примерах появляются ряды, в которых a_n

ведут себя как $(kn)!$ с $k>1$. Следовательно, в этих случаях сильное асимптотическое условие уже не может выполняться. Но из простых рассуждений, основанных на использовании масштабных преобразований и теоремы Карлемана, следует, что любая функция g, аналитическая в многолистной области $\{z \mid 0<|z|<B, |\arg z|<{}^1/_2 k\pi+\varepsilon\}$ и удовлетворяющая неравенству $|g(z)| \leqslant C\sigma^N[k(N+1)]!\,|z|^{N+1}$ при всех N и z в указанной области, равна нулю тождественно Это подсказывает таксе

Определение. Будем говорить, что функция $E(\beta)$, аналитическая в секторе $\{\beta \mid 0<|\beta|<B, \ |\arg\beta|<{}^1/_2 k\pi+\varepsilon\}$, удовлетворяет **модифицированному сильному асимптотическому условию порядка k** и имеет $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ в качестве **сильного асимптотического ряда порядка k**, если существуют такие C и σ, что при любых N и всех β в указанном секторе

$$\left|E(\beta)-\sum_{n=0}^{N} a_n\beta^n\right| \leqslant C\sigma^{N+1}[k(N+1)]!\,|\beta|^{N+1}.$$

Обобщая теорему Карлемана. можно обобщить и теорему XII.19: если f и g обе имеют $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ в качестве сильного асимптотического ряда порядка k, то $f=g$.

Пример 3 (осциллятор x^{2m}). Пусть $H_0=-d^2/dx^2+x^2$. и $V=x^{2m}$ $(m \geqslant 3)$. Численные расчеты показывают, что коэффициенты Релея—Шредингера a_n для энергии основного состояния ведут себя при больших n как $(-1)^{n+1}C\sigma^n[(m-1)n]!\,[1+O(1/n)]$, откуда должно следовать, что обычное сильное асимптотическое условие не может быть выполнено. Однако можно показать, что $E(\beta)$ имеет продолжение в многолистный сектор $\{\beta \mid |\arg\beta| \leqslant {}^1/_2(m+1)\pi-\varepsilon, \ |\beta| \leqslant B_\varepsilon\}$ с любым $\varepsilon>0$ и что в таком секторе выполнено сильное асимптотическое условие порядка $m-1$. Стало быть, асимптотические ряды и в этих случаях определяют собственные значения.

Так как сильный асимптотический ряд определяет $E(\beta)$ единственным образом можно ожидать, что есть какой-то способ построить E с помощью a_n, раз мы знаем, что E удовлетворяет сильному асимптотическому условию. Метод явного построения E содержится в следующей теореме Ватсона, доказательство которой можно найти в ссылках на литературу.

Теорема XII.21 (теорема Ватсона). Предположим, что $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ есть сильный асимптотический ряд для $E(\beta)$ в секторе

$\{\beta \mid 0<|\beta|<B,\ |\arg\beta| \leqslant {}^1/_2\pi+\varepsilon\}$. Рассмотрим функцию

$$g(z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a_n}{n!}z^n,$$

аналитическую в некотором круге с центром в $z=0$ вследствие сильного асимптотического условия. Тогда

(a) g имеет аналитическое продолжение в область $\{z \mid |\arg z|<\varepsilon\}$;

(b) если $|\beta|<B$ и $|\arg\beta|<\varepsilon$, то $\int\limits_0^{\infty}|g(x\beta)|\,e^{-x}\,dx<\infty$;

(c) если $|\beta|<B$ и $|\arg\beta|<\varepsilon$, то $E(\beta)=\int\limits_0^{\infty}g(x\beta)\,e^{-x}\,dx$.

Заметим, что так как $\int\limits_0^{\infty}x^ne^{-x}\,dx=n!$, то, если бы можно было переставить $\int\limits_0^{\infty}$ и $\sum\limits_{n=0}^{\infty}$, мы имели бы

$$\int\limits_0^{\infty}g(x\beta)\,e^{-x}\,dx=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\beta^n \quad \text{(формально)}.$$

Описанный здесь способ получения суммы $\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_n\beta^n$ есть частный пример **метода суммирования**, т. е. метода получения конечного ответа из расходящегося ряда, ответа, который *формально* является суммой такого ряда. Этот метод называется **методом суммирования по Борелю**; $g(z)$ называется **борелевым образом** $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$, а формула преобразования Лапласа $\int\limits_0^{\infty}g(x\beta)\,e^{-x}\,dx$ иногда называется обратным преобразованием Бореля.

Пример 1 (заново). Можно выбрать ε произвольно близким к π, так что g будет аналитической в плоскости с разрезом $\mathbb{C}\setminus(-\infty,-R)$, где R — радиус сходимости преобразования Бореля. В частном случае одномерного осциллятора известно, что $E(\beta)$ аналитична в $\{\beta \mid |\arg\beta|<\pi\}$, поэтому обратное преобразование Бореля сходится к E при любом положительном β (и, более общим образом, при любом β с $\operatorname{Re}\beta>0$).

Пример 2 (заново). В этом случае мы можем восстановить $E(\beta)$ при достаточно малых $|\beta|$ и $|\arg\beta|$ из преобразования Бореля ряда Релея — Шредингера.

Пример 3 (заново). Метод Бореля прямо не применим, но работает его обобщение (задача 29 (b)). Конкретно, для осциллятора x^{2m} модифицированный борелев образ

$$g(z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a_n}{[n(m-1)]!}z^n$$

аналитичен в плоскости с разрезом $\mathbb{C}\setminus(-\infty,\ -R_m)$ и для положительных малых β

$$E(\beta)=\int_0^{\infty} g(\beta x^{m-1})\,e^{-x}\,dx.$$

Итак, мы видели, что описанный метод суммирования позволяет восстановить собственные значения. В некоторых частных случаях могут оказаться полезными другие методы, даже более удобные в вычислительном отношении; мы их коротко обсуждаем в Замечаниях.

XII.5. Концентрация спектра

В двух предыдущих разделах мы изучали возмущенные системы с изолированным собственным значением, расположенным поблизости от изолированного собственного значения невозмущенной системы, и ряды теории возмущений, которые почленно конечны во всех порядках, но не сходятся. В этом разделе мы хотим исследовать более сложную ситуацию, когда есть изолированное невозмущенное собственное значение и почленно конечный ряд теории возмущений, но нет возмущенного собственного значения!

Рассмотрим следующий простой пример. Пусть $H_0=-\Delta-1/r$ и $V=E_0\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}$, где $\mathbf{e}$ — фиксированный единичный вектор в $\mathbb{R}^3$. При вещественных β оператор $H_0+\beta V$ есть гамильтониан атома водорода в постоянном электрическом поле $-\beta E_0\mathbf{e}$, т. е. гамильтониан так называемого эффекта Штарка. В § X.5 мы доказали, что $H_0+\beta V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. С другой стороны, легко видеть, что если $\beta\neq 0$, то $H_0+\beta V$ не ограничен снизу. Мы покажем ниже (§ XIII.4), что $\sigma(H_0+\beta V)=(-\infty,\ \infty)$, если $\beta\neq 0$. Следовательно, коль скоро включено возмущение, все собственные значения H_0 оказываются погруженными в непрерывный спектр. Тем не менее ряд теории возмущений для энергии основного состояния, задаваемый формальными выражениями из § 1, почленно конечен. Что же это значит?

Прежде чем дать математический ответ на этот вопрос, приведем другую интерпретацию изложенного. Пусть

$$V_n(r)=\begin{cases} E_0 \mathbf{e}\cdot\mathbf{r}, & \text{если } |\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}|<n,\\ E_0 n, & \text{если } \mathbf{e}\cdot\mathbf{r}\geqslant n,\\ -E_0 n, & \text{если } \mathbf{e}\cdot\mathbf{r}\leqslant -n.\end{cases}$$

Каждое V_n есть возмущение типа (A), так что при некотором $B^{(n)}$ ряд теории возмущений $\sum a_m^{(n)}\beta^m$ для энергии основного состояния $E^{(n)}(\beta)$ гамильтониана $H_0+\beta V_n$ сходится к $E^{(n)}(\beta)$, если $|\beta|\leqslant B^{(n)}$. Предположим, что $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m\beta^m$ есть формальный ряд теории возмущений для энергии основного состояния гамильтониана $H_0+\beta V$. Заметим, что $a_m^{(n)}$ сходится к a_m при $n\to\infty$. Мы, таким образом, интерпретируем $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m\beta^m$ как формальный предел сходящейся последовательности $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m^{(n)}\beta^m$. Эта интерпретация не очень удовлетворительна математически, ибо похоже, что $B^{(n)}\to 0$ и что $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m\beta^m$ расходится при всех β, однако нужно подчеркнуть, что такая интерпретация правильна с физической точки зрения! Действительно, эксперимент с реальными атомами в реальном электрическом поле делается не в поле, простирающемся во всем пространстве; потенциал V — это идеализация. Потенциал V_n гораздо ближе к экспериментально получаемому потенциалу, а $E^{(n)}(\beta)$ — к измеряемой спектроскопической наблюдаемой. Но так как $E^{(n)}(\beta)\approx a_0+a_1^{(n)}\beta$ для малых β и $a_1^{(n)}\approx a_1$ при больших n, то мы можем оценить $E^{(n)}(\beta)$, пользуясь a_1.

Несмотря на предыдущее замечание о физическом содержании задачи, нельзя не чувствовать, что и весь ряд теории возмущений все же должен иметь какое-то отношение к $H_0+\beta V$. Действительно, мы увидим, что спектр $H_0+\beta V$ «сгущается» возле невозмущенных собственных значений и что центр сгущения задается асимптотическим рядом $\sum a_m\beta^m$. Точный смысл «сгущения» раскрывается следующим определением.

Определение. Пусть H_n — семейство самосопряженных операторов, и пусть $\{P_n(\Omega)\}$ — семейство спектральных проекторов H_n. Пусть $\{S_n\}_{n=1}^{\infty}$ и T — подмножества в $\mathbb{R}$. Будем говорить, что **часть спектра H_n, лежащая в T, асимптотически попадает в S_n**, тогда и только тогда, когда

$$\operatorname*{s-lim}_{n\to\infty} P_n(T\setminus S_n)=0.$$

Когда $H_n \to H$ в сильном резольвентном смысле, будем говорить, что **часть спектра H_n в S_n есть асимптотически часть спектра H в T**, если

$$\operatorname*{s-lim}_{n\to\infty} P_n(S_n) = P(T),$$

где $\{P(\Omega)\}$ — проекторнозначная мера оператора H.

Пример 1. Пусть $H = I$, $H_n = I + n^{-1}X$, где X — оператор $(Xf)(x) = xf(x)$ на $L^2(-\infty, \infty)$. Если $\chi_{(a,b)}$ — умножение на характеристическую функцию интервала (a, b), то $P_n(1-\alpha, 1+\beta) = \chi_{(-n\alpha, n\beta)}$. Часть спектра H_n в $(0, 2)$ асимптотически попадает в $(1-n^{-1/2}, 1+n^{-1/2})$, а часть спектра H_n в $(1-n^{-1/2}, 1+n^{-1/2})$ есть асимптотически часть спектра H в $(0, 2)$. Чтобы увидеть связь между этим асимптотическим «погружением» и интуитивным представлением о «сгущении», рассмотрим спектральные меры, связанные с фиксированным вектором ψ. Если $d\mu_n(\lambda) = d(\psi, P_n(\lambda)\psi)$, то $d\mu_n(\lambda) = d\mu_1(1 + (\lambda - 1)n^{-1})$. Следовательно, $d\mu_n \to \delta(\lambda - 1)$.

В этом примере мы замечаем характерную симметрию:

Предложение. Предположим, что $H_n \to H$ в сильном резольвентном смысле. Пусть $T = (a, b)$, причем $a, b \notin \sigma_{pp}(H)$. Пусть $S_n \subset T$ при достаточно больших n. Тогда часть спектра H_n в T асимптотически попадает в S_n тогда и только тогда, когда часть спектра H_n, лежащая в S_n, асимптотически является частью спектра H в T.

Доказательство. По теореме VIII.24, $\operatorname{s-lim} P_n(T) = P(T)$. Следовательно, $\operatorname{s-lim} P_n(S_n) = P(T)$ тогда и только тогда, когда $\operatorname{s-lim} P_n(T \setminus S_n) = 0$. ∎

Подчеркнем, что понятие асимптотической концентрации есть свойство *последовательности* операторов $\{H_n\}_{n=1}^{\infty}$. Нет никакого смысла говорить, что один оператор H_n имеет спектр, сосредоточенный в S_n. В примере 1 все H_n унитарно эквивалентны, так что $\sigma(H_n) = \sigma(H_m)$.

Теперь мы можем высказать одну гипотезу о связи между $a_0 + a_1\beta$ и $H_0 + \beta V$ в рассмотренном примере эффекта Штарка. Допустим, что мы можем найти такой интервал I вокруг энергии a_0 невозмущенного основного состояния, что $\sigma(H_0) \cap I = \{a_0\}$, и такую функцию $f(\beta)$ с $f(\beta)/\beta \to 0$, что часть спектра $H(\beta)$ в $(a_0 + a_1\beta - f(\beta), a_0 + a_1\beta + f(\beta))$ является асимптотически частью спектра H_0 в I. Это свойство определяет a_1 единственным образом (задача 31). Поэтому, хотя $H(\beta)$ не имеет собственного значения вблизи $a_0 + a_1\beta$, он имеет спектр, сконцентрированный вблизи $a_0 + a_1\beta$, когда $\beta \to 0$. Средством для доказательства такой концентрации спектра служит понятие псевдособственного значения.

Определение. Предположим, что $H(\beta)$ — семейство самосопряженных операторов, определенных при малых вещественных β таким образом, что, когда $\beta \to 0$, $H(\beta) \to H_0$ в сильном резольвентном смысле. Пусть E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0 и ψ_0 — соответствующий нормированный собственный вектор. Семейство векторов $\psi(\beta)$ (β — вещественное) и семейство чисел $E_0+\beta E_1$ называются соответственно **псевдособственным вектором первого порядка** и **псевдособственным значением первого порядка** тогда и только тогда, когда

(i) $\lim\limits_{\beta\to 0} \|\psi(\beta)-\psi_0\|=0$;

(ii) $\lim\limits_{\beta\to 0} \beta^{-1}\|(H(\beta)-E_0-\beta E_1)\psi(\beta)\|=0$.

Далее вместо утверждения: «существует псевдособственный вектор первого порядка $\psi(\beta)$ с отвечающим ему псевдособственным значением $E_0+\beta E_1$», мы кратко будем говорить: «$E_0+\beta E_1$ есть псевдособственное значение $H(\beta)$».

Теорема XII.22. Предположим, что $H(\beta) \to H_0$ в сильном резольвентном смысле при $\beta \to 0$ и что все $H(\beta)$ самосопряжены. Пусть E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0 и I — такой интервал, что $\bar{I} \cap \sigma(H_0)=\{E_0\}$. Тогда существует функция $f(\beta)$, удовлетворяющая условию $f(\beta)/\beta \to 0$, такая, что часть спектра $H(\beta)$, лежащая в I, асимптотически попадает в

$$I_\beta \equiv (E_0+\beta E_1-f(\beta),\ E_0+\beta E_1+f(\beta))$$

в том и только том случае, когда $E_0+\beta E_1$ есть псевдособственное значение первого порядка для $H(\beta)$.

Доказательство. Пусть $P^\beta(\Omega)$ суть спектральные проекторы $H(\beta)$. Если часть $\sigma(H(\beta))$, лежащая в I, асимптотически попадает в I_β, то $P^\beta(I_\beta)$ сильно сходится к $P^0(I)=P^0(\{E_0\})$. В частности, если ψ_0 — невозмущенный собственный вектор оператора H и $\psi(\beta)=$ $=P^\beta(I_\beta)\psi_0$, то $\psi(\beta)\to\psi_0$ по норме. Более того,

$$\beta^{-1}\|[H(\beta)-E_0-E_1\beta]\psi(\beta)\| \leqslant \beta^{-1}f(\beta)\|\psi(\beta)\| \to 0,$$

когда $\beta \to 0$, так что $E_0+E_1\beta$ есть псевдособственное значение первого порядка.

Обратно, допустим, что $E_0+\beta E_1$ — псевдособственное значение, отвечающее псевдособственному вектору $\psi(\beta)$. Положим

$$f(\beta)=\|[H(\beta)-E_0-E_1\beta]\psi(\beta)\|^{1/2}\beta^{1/2}.$$

Тогда $\beta^{-1}f(\beta)\to 0$ при $\beta\to 0$. Мы покажем, что $P^\beta(I_\beta)$ сильно сходится к $P^0(\{E_0\})$:

$$\beta^{-2}f(\beta)^4=\|[H(\beta)-E_0-E_1\beta]\psi(\beta)\|^2=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}(\lambda-E_0-E_1\beta)^2\,d(\psi(\beta),\ P^\beta(\lambda)\psi(\beta))\geqslant$$

$$\geqslant f(\beta)^2\int_{\notin I_\beta}d(\psi(\beta),\ P^\beta(\lambda)\psi(\beta))=f(\beta)^2\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi(\beta)\|^2.$$

Следовательно, $\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi(\beta)\|\leqslant\beta^{-1}f(\beta)\to 0$. Так как

$$\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi_0\|\leqslant\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi(\beta)\|+\|\psi(\beta)-\psi_0\|,$$

то $(I-P^\beta(I_\beta))P^0(\{E_0\})\to 0$ по норме. Таким образом,

$$P^\beta(I\setminus I_\beta)P^0(\{E_0\})=P^\beta(I\setminus I_\beta)(1-P^\beta(I_\beta))P^0(\{E_0\})\to 0.$$

Кроме того, из сильной резольвентной сходимости вытекает, что $P^\beta(I)\to P^0(\{E_0\})$ и, следовательно,

$$P^\beta(I\setminus I_\beta)(1-P^0(\{E_0\}))\xrightarrow{s}0.$$

Отсюда заключаем, что $P^\beta(I\setminus I_\beta)\xrightarrow{s}0$. ∎

Теорема XII.23. Допустим, что самосопряженные операторы $H(\beta)$ заданы для каждого β из некоторой окрестности N нуля в $\mathbb{R}$. Пусть $H_0\equiv H(0)$ и существует такой симметрический оператор V, что

(i) H_0 самосопряжен в существенном на $D(H_0)\cap D(V)$;

(ii) если $\varphi\in D(H_0)\cap D(V)$, то при любом $\beta\in N$ имеем $\varphi\in D(H(\beta))$ и $H(\beta)\varphi=H_0\varphi+\beta V\varphi$;

(iii) E_0 — изолированное собственное значение H_0 с кратностью 1, и соответствующий собственный вектор ψ_0 принадлежит $D(V)$.

Пусть I — такой открытый интервал, что $\sigma(H_0)\cap\bar{I}=\{E_0\}$, и пусть $E_1=(\psi_0,\ V\psi_0)$ — коэффициент Релея — Шредингера первого порядка для возмущения собственного значения E_0.

Тогда существует такая функция $f(\beta)$ с $\beta^{-1}f(\beta)\to 0$, что часть спектра $H_0+\beta V$, лежащая в I, асимптотически попадает в $(E_0+E_1\beta-f(\beta),\ E_0+E_1\beta+f(\beta))$.

Доказательство. Простые рассуждения, использующие (i), (ii) и первое резольвентное уравнение, показывают, что $H(\beta)\to H_0$ в сильном резольвентном смысле, когда $\beta\to 0$ (задача 32). По теореме XII.22, достаточно построить псевдособственный вектор первого порядка $\psi(\beta)$ с псевдособственным значением $E_0+E_1\beta$. Пусть $\{P^\beta(\Omega)\}$ — спектральные проекторы оператора $H(\beta)$. Выберем $\psi(\beta)=P^{\beta}(I)\psi_0$. По теореме VIII.24, $\text{s-lim}\, P^{\beta}(I)=P^{0}(I)$, так что $\psi(\beta)\to\psi_0$, когда $\beta\to 0$. Так как $\psi_0\in D(H(\beta))$ для любого $\beta\in N$, то $P^{\beta}(I)H(\beta)\psi_0=H(\beta)P^{\beta}(I)\psi_0$. Следовательно,

$$\begin{aligned}\|\beta^{-1}(H(\beta)-E_0-\beta E_1)\psi(\beta)\| &= \|\beta^{-1}P^{\beta}(I)(H_0+\beta V-E_0-E_1\beta)\psi_0\| = \\ &= \|P^{\beta}(I)(V-E_1)\psi_0\| \leqslant \\ &\leqslant \|[P^{\beta}(I)-P^{(0)}(I)](V-E_1)\psi_0\|+\|P^{(0)}(I)(V-E_1)\psi_0\|.\end{aligned}$$

Так как $\text{s-lim}\, P^{\beta}(I)=P^{(0)}(I)$, первый член в правой части неравенства сходится к нулю. Так как E_0 невырожденно, то $P^{(0)}(I)\varphi=(\psi_0,\varphi)\psi_0$ и, следовательно,

$$P^{(0)}(I)(V\psi_0)=E_1\psi_0.$$

Значит, и второй член равен нулю. Тем самым доказано, что $\psi(\beta)$ есть псевдособственный вектор первого порядка. ∎

Пример 2 (эффект Штарка для атома водорода). Пусть $H_0=-\Delta-1/r$ и $V=E_0\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}$. Тогда $E_0=-1/4$ есть энергия основного состояния для H_0. По теореме X.38, $H_0+\beta V$ самосопряжен в существенном на $D(H_0)\cap D(V)$. Функция ψ_0 известна явно, причем $|\psi_0(x)|\leqslant C\exp(-|x|/2)$ с соответствующим C. Кроме того, $\psi_0\in D(V)$. Стало быть, выполнены условия теоремы XII.23. Поскольку $E_1\equiv(\psi_0,V\psi_0)=0$, мы заключаем, что, когда $\beta\to 0$, часть спектра $H_0+\beta V$, находящаяся вблизи от E_0, концентрируется в $(E_0-\lambda\beta,\ E_0+\lambda\beta)$ при любом $\lambda>0$. Вдобавок можно доказать, что все коэффициенты ряда Релея — Шредингера конечны. Более того, для любого n можно найти $f^{(n)}(\beta)$, удовлетворяющую условию $|\beta|^{-n}f^{(n)}(\beta)\to 0$, так чтобы часть спектра $H_0+\beta V$, лежащая вблизи E_0, концентрировалась в $\left(\sum_{m=0}^{n}E_m\beta^m-f^{(n)}(\beta),\ \sum_{m=0}^{n}E_m\beta^m+f^{(n)}(\beta)\right)$, когда $|\beta|\to 0$.

Кроме обобщения на порядок n, упомянутого в этом примере, теорема XII.23 имеет другое важное обобщение — она может применяться к уровням конечной кратности вырождения. Например, в рассмотренном примере эффекта Штарка первое собственное значение выше основного состояния четырехкратно вырождено и расщепляется в первом порядке на одно двукратное псевдособственное значение и два однократных псевдособственных значения. Можно явно найти четыре линейно независимых псевдособственных вектора, сходящихся к векторам ψ_i, удовлетворяющим уравнению $H_0\psi_i=-{}^1/_{16}\psi_i$, с псевдособственными значениями два раза $-{}^1/_{16}$ и $-{}^1/_{16}\pm a\beta$, где a можно сосчитать, пользуясь «теорией возмущений при условии вырождения».

XII.6. Резонансы и золотое правило Ферми

Всякий раз как возникает потребность в анализе или в высшей алгебре, вы должны воспринимать это как тревожный сигнал о том, что оператор пытается подменить опыт теорией.

Б. ГРЭМ, «РАЗУМНЫЙ ВКЛАДЧИК»

До сих пор мы рассматривали последовательно все более сингулярные возмущения изолированных собственных значений. В § 2 был рассмотрен случай, когда существуют и возмущенное собственное значение, и сходящийся ряд теории возмущений, а в § 3 и 4 — случай, когда возмущенное собственное значение существует, но соответствующий ряд теории возмущений расходится. В примерах § 5 не существует и возмущенного собственного значения. В этом разделе будет разобран еще более сингулярный, но, как мы увидим, важный для физики случай, когда не только не существует возмущенного собственного значения, но еще и невозмущенное собственное значение не изолировано.

Простой пример этого явления возникает, если

$$H_0 = -\Delta_1 - \frac{2}{r_1} - \Delta_2 - \frac{2}{r_2}$$

и $V = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$ на $L^2(\mathbb{R}^6)$. Точки $\mathbb{R}^6$ мы будем записывать в виде $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle$, где $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^3$. Если пренебречь релятивистскими эффектами и перейти к пределу бесконечной массы ядра, то $H_0 + V$ — это гамильтониан атома гелия. Если $h = -\Delta - 2/r$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$, то $H_0 = 1 \otimes h + h \otimes 1$. Так как h и H_0 самосопряжены, можно применить теорему VIII.33 и выразить спектр H_0 через спектр h при естественном отождествлении $L^2(\mathbb{R}^6)$ с $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. Собственные значения h известны, это $\{-1/n^2\}_{n=1}^{\infty}$, так что H_0 имеет собственные значения

$$\{E_{n,m}\} = \left\{ -\left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{m^2} \right) \right\}_{n,m=1}^{\infty}.$$

Далее, $\sigma_{\text{ess}}(h) = [0, \infty)$, так что $\sigma_{\text{ess}}(H_0) = [-1, \infty)$. Следовательно,

$$\sigma(H_0) = \{x + y \mid x, y \in [0, \infty) \cup \{-1/n^2\}_{n=1}^{\infty}\} = \\ = \left\{ -1 - \frac{1}{n^2} \right\}_{n=1}^{\infty} \cup [-1, \infty).$$

Таким образом, собственные значения $E_{n,m}$ лежат в непрерывном спектре, если $n \geqslant 2$ и $m \geqslant 2$ (рис. XII.2). Когда возмущение V включено, из физических соображений мы ожидаем, что собственные значения, находящиеся в непрерывном спектре, «растворятся». Это ожидание совершенно справедливо, с точностью до двух пояснений, которые мы обсудим в Замечаниях. Однако в физических проявлениях атома гелия остается «память» об этих

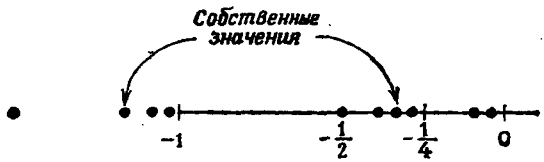


Рис. XII.2. Спектр H_0.

собственных значениях H_0. При рассеянии электронов на ионах гелия наблюдаются «пики» в сечении рассеяния при полных энергиях системы $H^+ + e$ вблизи энергий $E_{n,m}$ (практически на общем фоне выделяются пики только при малых m и n) (рис. XII.3). Похожие пики обнаруживаются и в поглощении света гелием, т. е. при частотах падающего излучения, при которых энергия кванта света близка к разности $E_{n,m}$ и $E_{1,1}$ (= энергия основного состояния), свет сильно поглощается (рис. XII.4). Подчеркнем, что наши графики для рассеяния и поглощения очень схематичны. В частности, энергии $E_{n,m}$ сдвинуты за счет возмущения V.

Не только положения этих пиков, отвечающие так называемым **состояниям Оже**, или **автоионизации**, поддаются наблюдению, но и ширина этих пиков довольно хорошо описывается с помощью вычислительного метода, называемого золотым правилом Ферми. Этот метод выводится чисто эвристически, и мы опишем вывод в Замечаниях. Вывод основан на физической модели механизма, который приводит к появлению пиков. В остальной части этого раздела мы прежде всего выделим математическую величину, отвечающую ширине пиков, а затем покажем, как золотое правило Ферми следует из теории регулярных возмущений Като—Реллиха, по крайней мере для атома гелия. Подчеркнем, что золотое правило Ферми успешно применяется во многих ситуациях, где оно до сих пор не имеет строгого обоснования.

Наша интерпретация золотого правила Ферми будет состоять из трех шагов, из которых два «квазиматематические», а последний — строго математический. Цель первых двух шагов — выделить такую величину, которая подходит для точного математи-

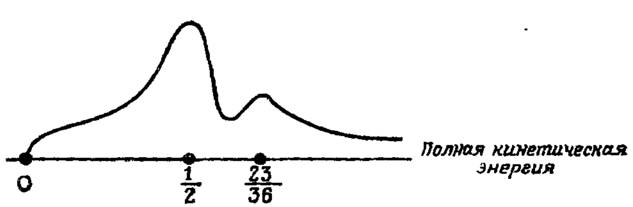


Рис. XII.3. Схематическое изображение сечения упругого рассеяния в реакции $e + He^+ \to e + He^+$.

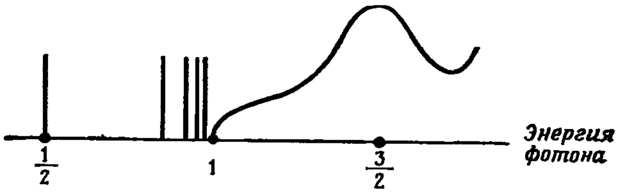


Рис. XII.4. Схематическое изображение сечения поглощения в процессе $He + \gamma$.

ческого анализа. Хотя эта величина и не является в точности шириной пика, мы свяжем ее с шириной при помощи цепочки нестрогих рассуждений. Это положение довольно обычно в математической физике: точные математические величины не совпадают с величинами, наблюдаемыми в эксперименте, но связаны с ними посредством некоторых нестрогих рассуждений. Так что в ряде проблем математической физики непременно наличествует этот внематематический привкус.

На первом шаге мы свяжем ширину пиков с мнимой частью положения полюсов «амплитуды рассеяния». Второй шаг — отыскание полюсов аналитического продолжения резольвенты. Таким образом, квазиматематическая часть анализа состоит в замене неточного понятия «ширина пика» точным — «мнимая часть положения полюса на втором листе аналитического продолжения среднего значения резольвенты по состояниям из некоторого плотного множества». Изучая эту точную величину, мы докажем, что она равна мнимой части собственного значения некоторого несамосопряженного оператора. Главным техническим приемом этого доказательства будет метод скейлинга (масштабных преобразований), который мы дальше будем изучать в § XIII.10.

Рассеяние в квантовой механике описывается квадратом модуля «амплитуды рассеяния» (см. § XI.6). Амплитуда рассеяния, являющаяся комплекснозначной функцией энергии и угла рассеяния, в типичных случаях (см. § XI.7) есть аналитическая функ-

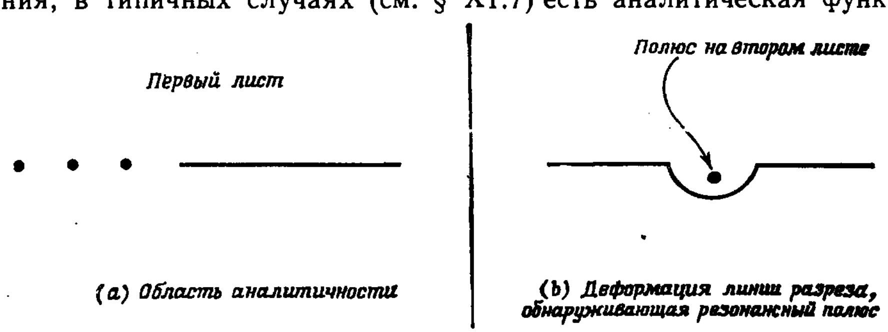


Рис. XII.5. Продолжение амплитуды рассеяния.

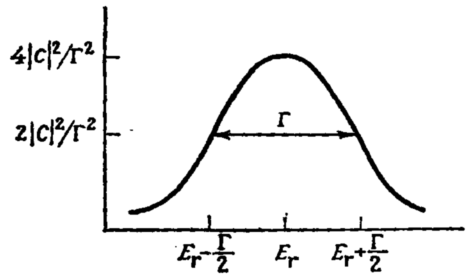


Рис. XII.6. Резонансный пик Брейта—Вигнера.

ция энергии в плоскости с разрезом $\mathbb{C}\setminus\sigma(H)$, где H — гамильтониан взаимодействующей квантовой системы. Предположим, что амплитуда рассеяния $f(E)$ имеет аналитическое продолжение на второй лист (рис. XII.5) и что на втором листе есть простой полюс, расположенный в точке $E_r - i\Gamma/2$ очень близко от вещественной оси. Тогда

$$f(E)=\frac{c}{E-E_r+{}^1/_2 i\Gamma}+f_b(E),$$

где фоновая часть f_b аналитична в точке $E=E_r-{}^1/_2 i\Gamma$. Если полюс очень близок к вещественной оси и $f_b(E_r)$ не слишком велика, то

$$|f(E)|^2=\frac{|C|^2}{(E-E_r)^2+{}^1/_4\Gamma^2}+R,$$

где остаток R мал около $E=E_r$. На рис. XII.6 изображен график, называемый **резонансом Брейта—Вигнера**: $|C|^2((E-E_r)^2+{}^1/_4\Gamma^2)^{-1}$. Заметим, что его ширина на половине максимума есть как раз Γ. Этот полюс амплитуды $f(E)$ называется резонансным полюсом, а Γ называется **шириной резонанса**. Если полюсной член много больше, чем фоновый член при $E=E_r$, то Γ есть приблизительно ширина «пика» в $|f(E)|^2$. Так мы решили первую половину «квазиматематической» задачи — сформулировали понятие ширины пика.

В связи со второй половиной нашей задачи обратимся к тому известному факту, что амплитуда рассеяния связана с граничным значением резольвенты $(H-E)^{-1}$, когда E приближается к вещественной оси из верхней полуплоскости (см. § XI.6 и XI.7). Поэтому будем искать метод продолжения $(\psi, (H-E)^{-1}\psi)=R_\psi(E)$ на второй лист. Если мы найдем, что такое продолжение возможно для плотного множества $\psi\in\mathcal{H}$ и что для этого плотного множества функция $R_\psi(E)$ имеет полюс при $E=E_r-{}^1/_2 i\Gamma$, то мы будем связывать E с резонансным полюсом, а Γ — с шириной резонанса. Разумеется, требуется какое-то основание, дающее нам право считать, что полюс связан именно с H, а не с некоторым частным выбором плотного множества ψ, поэтому мы будем рассматривать лишь такие ψ, для которых $(\psi, (H_0 - z)^{-1}\psi)$ также имеет продолжение на второй лист, но без полюса в $E_r - {}^1/_2 i\Gamma$.

Итак, мы завершили программу отыскания нужной математической величины:

Определение. Пусть существует такое плотное множество векторов $D \subset \mathscr{H}$, что для всех $\psi \in D$ обе функции $(\psi, (H - z)^{-1}\psi) = R_\psi(z)$ и $(\psi, (H_0 - z)^{-1}\psi) = R_\psi^{(0)}(z)$ имеют аналитическое продолжение на второй лист (через вещественную ось из верхней полуплоскости первого листа). Если $R_\psi^{(0)}(z)$ аналитична в $z_0 = E_r - {}^1/_2 i\Gamma$, а $R_\psi(z)$ при некотором ψ имеет полюс в z_0, то будем называть z_0 **резонансным полюсом**, а Γ — **шириной резонанса**.

Хотелось бы считать величину Γ шириной пика, но это не всегда правильно. Во-первых, формула, связывающая амплитуду рассеяния с резольвентой, не всегда включает в себя средние только по векторам из D, а во-вторых, может оказаться, что нельзя пренебречь «фоном».

Для изучения резонансных полюсов нам потребуется технический прием, основанный на масштабных преобразованиях. Здесь мы лишь наметим основные идеи этого приема и применим его к оператору $h = -\Delta - 2/r$ и к гамильтониану гелия. Детальное изложение этих методов и их применения к общему классу операторов мы отложим до § XIII.10. Для вещественных θ определим $u(\theta)$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$ формулой

$$(u(\theta) f)(r) = e^{3\theta/2} f(e^\theta r);$$

$u(\theta)$ образуют однопараметрическую группу унитарных преобразований пространства $L^2(\mathbb{R}^3)$. Легко видеть, что $u(\theta)$ оставляет инвариантной $D(h) = D(-\Delta)$ и что

$$h(\theta) \equiv u(\theta) h u(\theta)^{-1} = -e^{-2\theta}\Delta - 2e^{-\theta}/r.$$

Первый факт принципиальной важности, следующий из теорем X.12 и XII.9, состоит в том, что $h(\theta)$ допускает продолжение до семейства операторов, аналитических в смысле Като во всей плоскости.

Найдем спектр $h(\theta)$. Спектр $-\Delta$ есть $[0, \infty)$. Из теоремы XIII.14 и того, что $r^{-1}(-\Delta + 1)^{-1}$ есть оператор Гильберта — Шмидта, следует, что $-\Delta - 2e^\theta/r$ имеет спектр $[0, \infty)$ и, возможно, множество изолированных точек вне $[0, \infty)$, даже когда θ не вещественно. Далее, каждая такая точка вне $[0, \infty)$ есть собственное значение конечной кратности. Следовательно, $h(\theta)$ имеет спектр $\{e^{-2\theta}\lambda \mid \lambda \in [0, \infty)\}$ плюс, возможно, дополнительный дискретный спектр. Точки дискретного спектра задаются аналитическими функциями $f(\theta)$ (с возможными алгебраическими особенностями) в соответствии с теоремами XII.8 и XII.13. Но

$$u(\theta_0)\,h(\theta_1+i\theta_2)\,u(\theta_0)^{-1}=h(\theta_1+\theta_0+i\theta_2)$$

с вещественными θ_1, θ_2, θ_0. Значит, $h(\theta_1+i\theta_2)$ унитарно эквивалентен $h(\theta_1'+i\theta_2)$, и потому они имеют одни и те же собственные значения. Вследствие этого функции $f(\theta)$ постоянны, если постоянна $\operatorname{Im}\theta$. Так как $f(\theta)$ аналитичны, то они постоянны при всех θ. При $\theta=0$ имеем $\sigma_{pp}(h)=\{-1/n^2\}_{n=1}^{\infty}$, так что

$$\sigma(h(\theta))=\{e^{-2\theta}\lambda\,|\,\lambda\in[0,\ \infty)\}\cup\{-1/n^2\}_{n=1}^{\infty}$$

(рис. XII. 7). Мы не доказали, что $h(\theta)$ не может иметь собственных значений в секторе $0>\arg\lambda>-2\operatorname{Im}\theta$, но детальный анализ с использованием явных решений уравнения Шредингера с кулоновым потенциалом показывает, что их там нет,

Рассмотрим масштабные преобразования H_0 и $H_0+\beta V$. Определим $U(\theta)$ на $\mathbb{R}^6$ формулой $(U(\theta)F)(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{r}_2)=e^{3\theta}F(e^{\theta}\mathbf{r}_1,\ e^{\theta}\mathbf{r}_2)$ при вещественных θ. Аналогично, для вещественных θ положим $V(\theta)\equiv U(\theta)VU(\theta)^{-1}=e^{-\theta}V$ и $H_0(\theta)=U(\theta)H_0U(\theta)^{-1}=h(\theta)\otimes 1+$ $+1\otimes h(\theta)$. И $H_0(\theta)$, и $V(\theta)$ имеют аналитические продолжения типа (А) на всю комплексную область. Для всех θ оператор $H_0(\theta)$ имеет вид $A\otimes 1+1\otimes B$, хотя A и B не самосопряжены. В § XIII.9 мы докажем, что

$$\sigma(A\otimes 1+1\otimes B)=\{x+y\,|\,x\in\sigma(A),\ y\in\sigma(B)\}.$$

Следовательно,

$$\sigma(H_0(\theta))=\{x+y\,|\,x,\ y\in\sigma(h_0(\theta))\}=$$
$$=\bigcup_{n=1}^{\infty}\left\{-\frac{1}{n^2}+\lambda e^{-2\theta}\,\middle|\,\lambda\geqslant 0\right\}\cup\left\{-\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\,\middle|\,n,\,m\ \text{целые}\right\}\cup$$
$$\cup\{\lambda e^{-2\theta}\,|\,\lambda\geqslant 0\}$$

(рис. XII.8). В частности, собственные значения, погруженные в $\sigma(H_0)$, суть изолированные дискретные собственные значения $H_0(\theta)$ при невещественных θ. Все собственные значения $E_{n,m}$ $(n,\,m\geqslant 2)$ вырожденны. Можно воспользоваться симметриями и разложить $L^2(\mathbb{R}^6)$ в бесконечную прямую сумму пространств $\mathscr{H}_k$, каждое из которых остается инвариантным под действием операторов $H_0(\theta)$, $V(\theta)$. При фиксированных n и m каждое $E_{n,m}$ есть собственное значение лишь для конечного числа операторов $H_0(\theta)\restriction\mathscr{H}_k$, при-

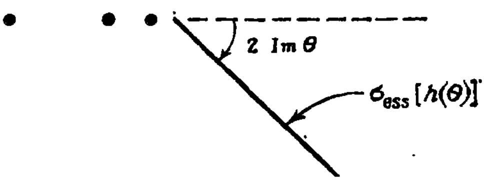


Рис. XII.7. $\sigma(h(\theta))$, $0\leqslant\operatorname{Im}\theta\leqslant\pi/2$.

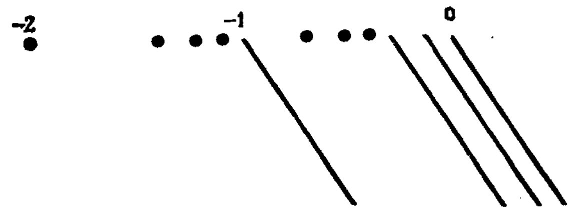


Рис. XII.8. $\sigma(H_0(\theta))$.

чем для некоторых из $\mathcal{H}_k$ собственное значение $E_{n,m}$ невырожденно. Для каких $\mathcal{H}_k$ оно есть собственное значение $H_0(\theta)\restriction\mathcal{H}_k$ и для каких оно невырожденно — зависит от n и m. Ниже мы ограничимся рассмотрением тех $\mathcal{H}_k$, для которых $E_{n,m}$ невырожденно, но при этом не будем вводить новых обозначений. Некоторые детали теории с вырождением и разложение с учетом симметрий мы рассмотрим в Замечаниях.

Пусть $H(\theta;\ \beta)=H_0(\theta)+\beta V(\theta)$. Согласно теории регулярных возмущений, описанной в § 2, если θ фиксировано и $|\beta|$ достаточно мало, то $H(\theta;\ \beta)$ имеет собственное значение вблизи $E_{n,m}$, которое задается сходящимся степенным рядом по β (рис. XII.9(a), (b)). Теперь фиксируем β и будем менять θ. Так как $H(\theta;\ \beta)$ есть аналитическое семейство по θ при фиксированном β, мы будем получать собственное значение $E^{(\theta)}(\beta)$ *до тех пор, пока собственное значение остается изолированным*. Функция $E^{(\theta)}(\beta)$ аналитична по θ при фиксированном β. Поскольку $H(\theta;\ \beta)$ и $H(\theta';\ \beta)$ унитарно эквивалентны при вещественном $\theta-\theta'$, $E^{(\theta)}(\beta)$ — постоянная функция θ. Мы можем теперь доказать, что $\operatorname{Im} E_{2,2}^{(\theta_0)}(\beta_0)\leqslant 0$, если β_0 вещественно и $\operatorname{Im}\theta_0>0$. В самом деле, предположим, что $\operatorname{Im} E_{2,2}^{(\theta_0)}(\beta_0)>0$. Тогда собственное значение останется изолированным, если мы продолжим θ к нулю, сохраняя $\operatorname{Im}\theta\geqslant 0$. Отсюда следовало бы, что $H(0;\ \beta_0)$ имеет комплексное собственное значение, что невозможно. Следовательно, $\operatorname{Im} E_{2,2}^{(\theta_0)}(\beta)\leqslant 0$. Если $\operatorname{Im} E_{2,2}^{(\theta_0)}(\beta)<0$ и мы попробуем продолжить θ к нулю, то существенный спектр сольется с собственным значением, нарушая применимость дискретной теории возмущений. Значит, нет ника-

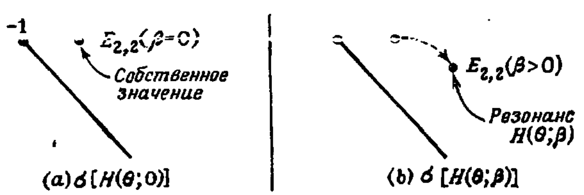


Рис. XII.9. Траектория E (β, θ) при фиксированном θ; $\operatorname{Im}\theta>0$.

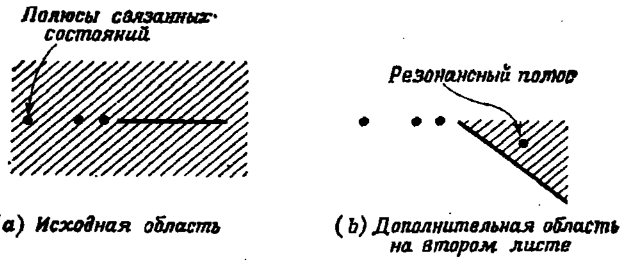


Рис. XII.10. Область аналитичности $R_\psi(E)$.

кого противоречия между самосопряженностью $H_0+\beta_0 V$ при вещественных β_0 и появлением комплексных собственных значений $E_{2,2}^{(\theta_0)}(\beta_0)$ в нижней полуплоскости, при вещественном β_0 и $\operatorname{Im}\theta_0>0$.

Второе принципиальное замечание состоит в том, что эти комплексные собственные значения $H(\theta;\ \beta)$ связаны с полюсами резольвенты оператора $H(\beta)=H_0+\beta V$ на втором листе. Пусть $\psi\in\mathcal{H}$ — такой вектор, что $U(\theta)\psi$ имеет аналитическое продолжение на всю $\mathbb{C}$. Выберем ψ так, что он будет аналитическим вектором для инфинитезимального генератора группы $U(\theta)$. Рассмотрим функцию $R_\psi(E)=(\psi,\ (H_0+\beta V-E)^{-1}\psi)$, первоначально определенную в плоскости с разрезом $\mathbb{C}\setminus\sigma(H_0+\beta V)$. При вещественных θ

$$
\begin{aligned}
R_\psi(E) &= (U(\theta)\psi,\ U(\theta)(H_0+\beta V-E)^{-1}U(\theta)^{-1}U(\theta)\psi)=\\
&=(U(\theta)\psi,\ (H(\theta;\ \beta)-E)^{-1}U(\theta)\psi).
\end{aligned}
$$

Фиксируем E в верхней полуплоскости. Тогда последняя формула имеет место в силу аналитического продолжения, если $0\leqslant\operatorname{Im}\theta<\pi/2$. Следовательно, мы можем продолжить $R_\psi(E)$ через вещественную ось на части второго листа (рис. XII.10). Поскольку $(H(\theta;\ \beta)-E)^{-1}$ имеет полюсы, когда E есть собственное значение $H(\theta;\ \beta)$, аналитическое продолжение $R_\psi(E)$ будет иметь полюсы в комплексных собственных значениях $H(\theta;\ \beta)$. В итоге *комплексные собственные значения* $H(\theta;\ \beta)$ *суть положения полюсов резольвенты на втором листе.*

Ширина этих резонансных полюсов по определению есть мнимая часть $E^{(\theta)}(\beta)$. В свою очередь $E^{(\theta)}(\beta)$ при фиксированном θ и малых β задается сходящимся рядом теории возмущений $\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_n\beta^n$. Вследствие нашей основной аргументации о постоянстве по θ коэффициенты a_n не зависят от θ. Очевидно, что a_0 вещественно, а так как $\operatorname{Im}E\leqslant 0$ при всех вещественных β, то и $\operatorname{Im}a_1=0$. Таким образом, a_2 есть первый из коэффициентов a_n, для которого, возможно, $\operatorname{Im}a_n\neq 0$. Если ряд теории возмущений быстро сходится, то $|\operatorname{Im}E(\beta)|=\Gamma/2\approx(\operatorname{Im}a_2)\beta^2$. Следовательно,

$$\Gamma \approx (\beta^2)(2 \operatorname{Im} a_2).$$

Здесь a_2 — коэффициент Релея — Шредингера, и его можно сосчитать методами § 1. Именно, если $\Omega(\theta; 0)$ — невозмущенный собственный вектор $H(\theta; 0) \equiv H_0(\theta)$ и $\overline{\Omega(\theta; 0)}$ комплексно сопряжен ему как элемент $L^2(\mathbb{R}^6)$, то (задача 33)

$$a_2 = (2\pi i)^{-1} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (\overline{\Omega(\theta; 0)}, V(H_0(\theta)-E)^{-1} V\Omega(\theta; 0)) \frac{dE}{E-E_0},$$

где E_0 — невозмущенное собственное значение. Рассмотрим теперь функцию

$$f(\theta, E) = (\overline{\Omega(\theta; 0)}, V(\theta)(H_0(\theta)-E)^{-1} V(\theta)\Omega(\theta; 0)) - \\ - |(\overline{\Omega(\theta, 0)}, V(\theta)\Omega(\theta, 0))|^2 (E_0 - E)^{-1}.$$

Функция $f(\theta, E)$ аналитична в $E = E_0$ при фиксированных θ с $\operatorname{Im}\theta > 0$, так как мы явно вычли полюсной член. Следовательно, по интегральной теореме Коши

$$a_2 = f(\theta, E)|_{E=E_0} = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} f(\theta, E_0 + i\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} f(\theta = 0, \quad E_0 + i\varepsilon).$$

На последнем шаге мы воспользовались тем, что при $\operatorname{Im} E > 0$ значение $f(\theta, E)$ определено при $\operatorname{Im}\theta = 0$ и не зависит от θ в полосе $0 \leqslant \operatorname{Im}\theta < \pi/2$. Следовательно,

$$\operatorname{Im} a_2 = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{1}{2i} [(\Omega_0, V\{(H_0 - E_0 - i\varepsilon)^{-1} - (H_0 - E_0 + i\varepsilon)^{-1}\} V\Omega_0) - \\ - |(\Omega_0, V\Omega_0)|^2 \{(E - E_0 - i\varepsilon)^{-1} - (E - E_0 + i\varepsilon)^{-1}\}|_{E=E_0}].$$

По формуле Стоуна (теорема VII.13), $\operatorname{Im} a_2$ есть функция спектральных проекторов оператора H_0 за вычетом проектора на собственный вектор Ω_0, который убирается вычитанием полюса. Теперь мы можем доказать такую теорему:

Теорема XII.24 (золотое правило Ферми для состояний Оже в гелии). Пусть заданы n и m, причем $n > 1$, $m > 1$. Ограничимся подпространством с такой симметрией, что $E_{n,m}$ в нем есть невырожденное собственное значение. Тогда для вещественных малых β резольвента оператора

$$-\Delta_1 - \Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{\beta}{|r_1 - r_2|}$$

имеет полюс на втором листе вблизи $E_0 \equiv a_0 = -n^{-2} - m^{-2}$. Положение полюса дается функцией $E(\beta)$, аналитической при малых β:

$$E(\beta) = a_0 + a_1\beta + a_2\beta^2 + \ldots .$$

Пусть $\{P_\Omega\}$—спектральное семейство для $H_0=-\Delta_1-\Delta_2-2/r_1-2/r_2$; положим $\tilde{P}(E)=P_{(-\infty,E)\setminus\{E_0\}}$. Пусть Ω_0 — невозмущенный собственный вектор H_0. Тогда

(a) $g(E)=(\Omega_0, V\tilde{P}(E)V\Omega_0)$ аналитична в $E=E_0$;

(b) $\operatorname{Im} a_2=\pi\frac{dg}{dE}\Big|_{E=E_0}$.

Доказательство. После предшествовавшего обсуждения доказать нужно только (a) и (b). По формуле Стоуна для этого достаточно показать, что

$$(\Omega_0, V\{(H_0-E)^{-1}-(E_0-E)^{-1}P_{\{E_0\}}\}V\Omega_0)$$

имеет аналитическое продолжение из области $\operatorname{Im} E>0$ на вещественную ось и ниже вблизи $E=E_0$. В самом деле, тогда $g(E)$ есть интеграл аналитической функции и его производная есть как раз (с точностью до множителя π) то выражение, которое было получено для $\operatorname{Im} a_2$. Чтобы убедиться в том, что искомая функция аналитична в $E=E_0$, следует только показать, что $U(\theta)V\Omega_0$ имеет аналитическое продолжение в полосу $|\operatorname{Im}\theta|<\varepsilon$. Но

$$U(\theta)V\Omega_0=[U(\theta)VU(\theta)^{-1}]U(\theta)\Omega_0=(e^{-\theta}V)[U(\theta)\Omega_0].$$

Существование аналитического продолжения для $U(\theta)\Omega_0$ доказывается с помощью рассуждения, основанного на принципе симметрии Шварца (задача 35). ∎

Итак, мы показали, что в низшем порядке теории возмущений

$$\Gamma=2\operatorname{Im} a_2=2\pi\frac{d}{dE}(\Omega_0, V\tilde{P}(E)V\Omega_0)|_{E=E_0}.$$

Эта формула представляет собой золотое правило Ферми, записанное, правда, в несколько иной форме, чем принято в физической литературе.

ЗАМЕЧАНИЯ

Изобилие разнообразных сведений о теории возмущений дискретных спектров можно найти в классической книге Т. Като, Теория возмущений линейных операторов.—М.: Мир, 1972.

§ *XII.1.* Дополнительное обсуждение материала этого раздела см. у Като, гл. I и II, и у Реллиха: F. Rellich, Perturbation Theory of Eigenvalue Problems.—New York: Gordon and Breach, 1969. В книге Кноппа (K. Knopp, Theory of Functions, Part II. — New York: Dover, 1947) обсуждаются теоремы XII.1 и XII.2 и, в частности, доказывается теорема XII.2.

Теорема Реллиха была доказана впервые в работе: F. Rellich, Störungstheorie der Spektralzerlegung, I.—*Math. Ann.* **113** (1937), 600—619. Чтобы оценить глубину этой теоремы, заметим, что она не справедлива для аналитических возмущений, зависящих от двух параметров. В этом можно убедиться при помощи такого примера (модификация примера, рассмотренного Реллихом): пусть $T(\beta, \lambda)=\beta\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}+\lambda\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$; $T(\beta, \lambda)$ аналитичен по β и λ и самосопряжен при вещественных β и λ, однако его собственные значения $E(\beta, \lambda)=\pm\sqrt{\beta^2+\lambda^2}$ не аналитичны по двум переменным β и λ. Теорема Реллиха распространена на различные ситуации, включающие матрицы нормальных операторов, Джемисоном (S. L. Jamison, Perturbation of normal operators. — *Proc. Amer. Math. Soc.* 5 (1954), 103—110) и Вольфом (F. Wolf, Analytic perturbations of operators in Banach spaces. — *Math. Ann.* 124 (1954), 317—333). В частности, Вольф показал, что если $A(\lambda)$ есть аналитическое семейство и $A(\lambda_n)$ нормален для последовательности $\lambda_n \to 0$, то собственные значения оператора $A(\lambda)$ аналитичны в $\lambda=0$. Содержание этой теоремы прояснено Батлером (J. Butler, Perturbation series for eigenvalues of analytic non-symmetric operators. — *Arch. Math.* 10 (1959), 21—27); см. задачу 21.

Для 2×2-матриц связь между аномальным поведением жордановых форм и особенностями собственных значений проста: если $T(\beta)=T_0+T_1\beta+\ldots+T_n\beta^n+\ldots$ есть аналитическая функция со значениями в множестве 2×2-матриц и с неаналитическими при $\beta=0$ собственными значениями, то для некоторых n матрицы $T_0, \ldots, T_{n-1}$ кратны I, а T_n не диагонализуема. В общем случае связь гораздо сложнее; неявно она содержится в § II.2.3 книги Като; см. также задачу 23.

Ряд Релея — Шредингера назван так в связи с фундаментальными исследованиями лорда Релея (Релей, Теория звука. — М. — Л.: Гостехиздат, 1955) и Шредингера (E. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem, IV. Störungstheorie mit Anwendung auf den Starkeffekt der Balmerlinien. — *Ann. Physik* 80 (1926), 437—490). Использованная при обсуждении ряда Релея—Шредингера техника проекторов восходит к Б. Секефальви-Надю (B. Sz-Nagy, Perturbations des transformations autoadjointes dans l'espace de Hilbert. — *Comm. Math. Helv.* 19 (1946/47), 347—366) и Като (T. Kato, On the convergence of the perturbation method, I, II. — *Progr. Theor. Phys.* 4 (1949), 514—523: 5 (1950). 95—101: 207—212).

§ XII.2. Первоначально теория регулярных возмущений появилась в работах Реллиха: F. Rellich, Störungstheorie der Spektralzerlegung I—V. — *Math. Ann.* 113 (1937), 600—619, 677—685; 116 (1939), 555—570; 117 (1940), 356—382; 118 (1942), 462—484. Упрощения в нее были внесены Надем и Като (см. замечания к § 1). Дополнительные обсуждения можно найти в книгах Реллиха и Като, а также в книге К. Фридрихса, Возмущение спектра операторов в гильбертовом пространстве. — М.: Мир, 1969.

Наше определение аналитического семейства слегка отличается от определения Като, данного в его книге (стр. 458), и Реллиха в третьей статье из его серии. Если $T(\beta)$ замкнут и имеет непустое резольвентное множество, определения совпадают. Определение Като—Реллиха охватывает некоторые случаи, когда $T(\beta)$ может иметь пустое резольвентное множество, но, так как эти случаи редко встречаются в практике, мы воспользовались более узким, но технически более простым определением.

Дальнейшее обсуждение приложений теории возмущений к атомной физике см. в книге Мидзусимы: M. Mizushima, Quantum Mechanics of Atomic Spectra and Atomic Structure. — New York: Benjamin, 1970. В частности, там можно найти все, что нужно, о сверхтонкой структуре атома водорода.

Теорема XII.10 доказана Б. Саймоном и Р. Хег-Кроном (B. Simon, R. Höegh-Krohn, Hypercontractive semigroups and two-dimensional self-coupled Bose fields. — *J. Funct. Anal.* — 9 (1972), 121—180. Другая техника получения оценок снизу для радиуса сходимости ряда Релея — Шредингера в специальных случаях, представляющих интерес для физики, предложена Аткинсоном (D. Atkinson, Bound state perturbation theory: A new approach.— *Nuclear Phys.* **B20** (1970), 125—158).

Теорема XII.12. была впервые доказана Като (T. Kato, On the adiabatic theorem of quantum mechanics.— *J. Phys. Soc. Japan* 5 (1950), 435—439). Более слабая теорема, достаточная для того, чтобы применить ее в теореме XII.13, как мы это сделали, содержится в работе Надя, упомянутой в замечаниях к § 1. Надь дает явную формулу для обратимого оператора $W(\beta)$, определяемого при достаточно малых $|\beta|$ посредством $W(\beta)P(0)W(\beta)^{-1}=P(\beta)$. Именно (см. задачу 19)

$$W(\beta)=[1-(P(\beta)-P(0))^2]^{-1/2}[P(\beta)P(0)+(1-P(\beta))(1-P(0))].$$

Лемму, относящуюся к теореме XII.12, можно также доказать при помощи теорем о неподвижной точке.

§ XII.3. Эвристические аргументы в пользу расходимости ряда теории возмущений для ангармонического осциллятора приводятся в книге Готфрида: K. Gottfried, Quantum Mechanics.—New York: Benjamin, 1966, v. 1, pp. 361—362. Образец всех подобных эвристических рассуждений дан Дайсоном (F. Dyson, Divergence of perturbation theory in quantum electrodynamics.— *Phys. Rev.* **85** (1952), 631—632).

Оценки, нужные для доказательства расходимости ряда теории возмущений ($|a_n|\geqslant AB^n\Gamma(n/2)$), найдены Бендером и Ву (C. Bender, T. T. Wu, Anharmonic oscillator.— *Phys. Rev.* **184** (1969), 1231—1260). Их доказательство построено по образцу аналогичного доказательства для теории поля с $(\varphi^4)_2$-взаимодействием у Джаффе (A. M. Jaffe, Divergence of perturbation theory for bosons.— *Commun. Math. Phys.* **1** (1965), 127—149).

Природа сингулярности собственных значений ангармонического осциллятора при $\beta=0$ изучена весьма подробно. Функция $E(\beta)$ допускает аналитическое продолжение на трехлистную поверхность, на которой точка $\beta=0$ *не является* изолированной особенностью. Этот факт был подсказан приближенными вычислениями Бендера и Ву (см. выше) и был доказан Саймоном (B. Simon, Coupling constant analyticity for the anharmonic oscillator.— *Ann. Phys.* 58 (1970), 76—136).

Особенно ясное обсуждение ряда Гелл-Манна—Лоу и его *формальный* вывод в квантовой теории поля можно найти в книге: Дж. Бьёркен и С. Дрелл, Релятивистская квантовая теория. Т. I.—М.: Наука, 1978. Общая теория асимптотических рядов рассмотрена в книге В. Вазова, Асимптотические разложения решений обыкновенных дифференциальных уравнений.— М.: Мир, 1968. Таблица в примере 1 заимствована из цитированной статьи Саймона в *Annals of Physics*.

Асимптотический характер ряда теории возмущений впервые доказал Титчмарш (E. Titchmarsh, Some theorems on perturbation theory I, II.— *Proc. Roy. Soc.* **A200** (1949), 34—46; **A201** (1950), 473—479). Като обобщил результаты Титчмарша (T. Kato, On the convergence of the perturbation method.— *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo*, Sect. I, **6** (1951), 145—226, и Perturbation theory of semi-bounded operators.— *Math. Ann.* **125** (1953), 435 — 447). См. также V. Kramer, Asymptotic inverse series.— *Proc. Amer. Math. Soc.* 7 (1956), 429—437, и Asymptotic perturbation series.— *Trans. Amer. Math. Soc.* 85 (1957), 88—105.

Некоторое обобщение результатов Титчмарша на несимметрические операторы можно найти в работах Уэ: D. Huet, Phénomènes de perturbation singulière.— *C. R. Acad. Sci. Paris* **244** (1957), 1438—1440; **246** (1958), 2096—2098; **247** (1958), 2273—2276; **248** (1959), 58—60, и Phénomènes de perturbation singulière dans les problèmes aux limites.— *Ann. Inst. Fourier* **10** (1960), 1—96. Другой метод доказательства асимптотического характера рядов теории возмущений, применимый к положительным самосопряженным возмущениям положительных самосопряженных операторов, обсуждается в приложении II к статье Саймона в *Annals of Physics* и в статье Гринли: W. M. Greenlee, Singular perturbation of eigenvalues.—*Arch. Rational Mech. Anal.* **34** (1969), 143—164.

Асимптотической теории возмущений посвящена гл. VIII книги Като. Като подчеркивает, что требуется только устойчивость собственного значения и сильная резольвентная сходимость; см. также наше обсуждение теоремы XII.16$^1/_2$.

Теоремы XII.15 и XII.16 обсуждаются и доказываются в работе Саймона: B. Simon, Determination of eigenvalues by divergent perturbation series.—*Advances in Math.* 7 (1971), 240—253. Асимптотическая природа ряда теории возмущений для теорий поля $(\varphi^{2n})_2$ с пространственным обрезанием в секторах $\{\beta \mid |\arg \beta| \leqslant \theta\}$ при $\theta < \pi/2$ была впервые продемонстрирована в работе Саймона и Хег-Крона, цитированной в замечаниях к § 2. Расширение на случай $\theta < \pi$ для $(\varphi^4)_2$ (с помощью теоремы XII.15) впервые появилось в работе Саймона: B. Simon, Borel summability of the ground state energy in spatially cutoff $(\varphi^4)_2$.—*Phys. Rev. Lett.* **25** (1970), 1583—1586. Расширение на $\theta < \pi$ для общего случая $(\varphi^{2n})_2$-теорий выполнено Розеном и Саймоном (L. Rosen, B. Simon, The $(\varphi^{2n})_2$ Hamiltonian for complex coupling constant.—*Trans. Amer. Math. Soc.* **165** (1972), 365—379). Было также показано, что некоторые величины имеют асимптотические ряды и для теории поля $P(\varphi)_2$ в бесконечном объеме; наиболее ранний результат такого рода см. в работе Димока: J. Dimock, Asymptotic perturbation expansions in the $P(\varphi)_2$ quantum field theory.—*Commun. Math. Phys.* **35** (1974), 347—356.

Существует формальная связь между энергиями вакуума и суммой связных диаграмм Фейнмана без внешних линий (см. указанную выше книгу Бьёркена и Дрелла). Если модифицировать правила Фейнмана, вставляя в каждую «вершину» вместо δ-функции преобразование Фурье функции g, т. е. пространственное обрезание, то после интегрирования по времени мы получим ряд Релея—Шредингера для энергии вакуума.

Потенциал двойной ямы вызвал большой интерес. Укажем работы Каца и Томпсона (M. Kac, C. Thompson, Phase transitions and eigenvalue degeneracy of a one dimensional anharmonic oscillator.—*Stud. Appl. Math.* **48** (1969), 257—264) и Айзексона (D. Isacson, The critical behavior of $(\varphi^4)_1$.—*Commun. Math. Phys.* **53** (1977), 257—275). В частности, Кац и Томпсон доказали, что $E_l' - E_l$ стремится к нулю как $\exp(-b\beta^{-2})$. Были также работы о суммируемости по Борелю для потенциала двойной ямы. Брезан, Паризи и Зинн-Жюстен (E. Brézin, G. Parisi, J. Zinn-Justin, Perturbation Theory at large orders for potentials with degenerate minima.—*Phys. Rev.* **D16** (1977), 408) изучали поведение коэффициентов Релея—Шредингера при больших n как с помощью численных методов, так и с помощью некоторой еще не строгой теории. Их результаты наводят на мысль, что эти ряды не суммируемы по Борелю, и это было доказано Сокалом (A. Sokal, Princeton preprint, 1977).

Существует допускающая точное решение модель, похожая на потенциал двойной ямы, которая рассматривается на стр. 66—77 книги Мерцбахера (E. Merzbacher, Quantum Mechanics.—New York: Wiley, 1961) и в книге В. П. Маслова, Теория возмущений и асимптотические методы.—М.: Изд. МГУ, 1965.

Особый интерес к потенциалу двойной ямы вызван тем, что соответствующая двумерная теория поля обнаруживает совершенно другое поведение. В задаче о двойной яме, хотя разность $E_0' - E_0$ мала, она отлична от нуля и основное состояние симметрично относительно $x = -{}^1/_2\, \beta^{-1}$. В соответствующей теории поля, если выбрать симметричную предельную теорию, вакуум вырожден и (после соответствующего разложения) теории с единственным вакуумом не обладают этой симметрией. Это было доказано Глиммом, Джаффе и Спенсером (J. Glimm, A. Jaffe, T. Spencer, Phase transitions for $(\varphi^4)_2$ quantum fields.—*Commun. Math. Phys.* **45** (1975), 203—216; русский перевод в сб.: Евклидова квантовая теория поля, марковский подход.—М.: Мир, 1978, с. 46—64). Это различие между одним и двумя измерениями аналогично соответствующему поведению модели Изинга, где в двух измерениях есть фазовый переход, а в одном — нет. Мы вернемся еще к этой теме в одном из последующих томов.

§ XII. 4. Теорема Карлемана (теорема XII.17) доказана в его книге: T. Carleman, Les Fonctions Quasianalytiques.—Paris: Gauthier-Villars, 1926. Метод доказательства общего случая совершенно отличен от того, с помощью которого доказан частный случай — теорема XII. 18. При доказательстве этой теоремы мы следовали Харди (Г. Харди, Расходящиеся ряды.— М.: ИЛ, 1951).

Идея применить сильное асимптотическое условие к расходящимся рядам теории возмущений и, в частности, к ангармоническому осциллятору возникла в работе Граффи, Грекки и Саймона (S. Graffi, V. Grecchi, B. Simon, Borel summability: Application to the anharmonic oscillator.—*Phys. Lett.* **32B** (1970), 631—634). Теорема XII. 20 была сформулирована и доказана в статье Саймона в *Advances in Mathematics*, цитированной в замечаниях к § 3, а пример 2 рассмотрен впервые в статье Саймона в *Rhysical Reviev Letters*, также упомянутой выше. Основная литература по двумерным бозонным теориям поля обсуждалась в замечаниях к § X. 7. Пример 3 (осциллятор x^{2n}) рассмотрен в вышеупомянутой статье Граффи и др. Было установлено, что некоторые асимптотические ряды в теории $P(\varphi)_2$ в бесконечном объеме суммируемы по Борелю. См. J.-P. Eckmann, J. Magnen, R. Sénéor, Decay properties and Borel summability for the Schwinger functions in $P(\varphi)_2$ theories.— *Commun. Math. Phys.* **39** (1975), 251—271. Суммируемость по Борелю ряда для эффекта Зеемана (атом в постоянном магнитном поле) была установлена Авроном, Хербстом и Саймоном (J. Avron, I. Herbst, B. Simon, Schrödinger Operators with Magnetic Fields.—Preprint, 1977).

Теорема Ватсона была доказана им в работе: G. Watson, A theory of asymptotic series.—*Philos. Trans. Roy. Soc. London* Ser. A **211** (1912), 279—313. Борель предложил свой метод и показал на многих примерах его эффективность (E. Borel, Mémoire sur les séries divergentes.—*Ann. Sci. Ecole. Norm. Sup.* **16** (1899), 9—136).

Метод Бореля является примером регулярного метода суммирования. Метод суммирования—это процедура, позволяющая определить сумму α некоторого формального ряда Σa_n. Метод называется регулярным, если в случае ряда Σa_n, абсолютно сходящегося к α_0, указанная процедура применима и дает в качестве суммы α_0. Регулярность метода Бореля, следующая из теоремы Ватсона, была впервые доказана Харди (G. Hardy, On differentiation and integration of divergent series.—*Trans. Cambridge Phil. Soc.* **19** (1904), 297—321).

Один из недостатков метода Бореля в непосредственной его форме состоит в том, что он связан с аналитическим продолжением, которое может оказаться затруднительным с вычислительной точки зрения. Эту трудность можно преодолеть, если найти конформное отображение, которое переводит область аналитичности из теоремы Ватсона в область, содержащую единичный круг, причем так, что положительная вещественная полуось отображается внутрь круга. Тогда «продолжение» можно проделать, просто суммируя степенной ряд в этой области. Подробнее см. N.-E. Nörlund, Leçons sur les séries d'interpolation.—Paris: Gauthier-Villars, 1926; G. Doetsch, Handbuch der Laplace-Transformation.—Basel: Birkhäuser, 1955, B. 2, K. 11; B. Hirsbrunner, J. Loeffel, Sur les séries asymptotiques sommables selon Borel.—*Helv. Phys. Acta.* **48** (1975), 546. Последняя работа содержит приложения к осциллятору x^4.

Относительно другого метода суммирования — метода аппроксимантов Паде — известно, что с его помощью правильно суммируются ряды теории возмущений для возмущений типа x^4 и x^6 оператора p^2+x^2. Этот метод рассмотрен в статье Бейкера: G. A. Baker, The theory and application of the Padé approximant method.—*Advances Theor. Phys.* **1** (1966), 1—58. Регулярность метода Паде не установлена. Применимость этого метода к осцилляторам x^4 и x^6 доказана в статье: J. J. Loeffel, A. Martin, R. Simon and A. S. Wightman, Padé approximants and the anharmonic oscillator.—*Phys. Lett.* **30B** (1969), 656—658. Преимущество метода Паде в его расчетной простоте: есть явные формулы для аппроксимантов, и мы можем явно контролировать ошибки. Недостаток его в ограниченной применимости (численные данные показывают, что он не работает для осциллятора x^8) и в трудности доказательства сходимости (не доказано, что этот метод работает для двумерных осцилляторов x^4). Читатель может сравнить частные суммы ряда Релея — Шредингера для основного состояния гамильтониана $p^2+x^2+0{,}2\,x^4$ (точное значение $E_0 = 1{,}118292$), приведенные в § 3, с $[N, N]$-аппроксимантами Паде:

$$\begin{aligned} &E[1,1]=1{,}111111, && E[5,5]=1{,}118288,\\ &E[2,2]=1{,}117541, && E[6,6]=1{,}118292,\\ &E[3,3]=1{,}118183, && E[7,7]=1{,}118292;\\ &E[4,4]=1{,}118272, && \end{aligned}$$

$[N, N]$-аппроксимант Паде находится с помощью только $2N$ коэффициентов Релея — Шредингера $a_0, a_1, \ldots, a_{2N}$.

Существует семейство возмущений дискретного спектра, которые оставляют спектр дискретным, но в то же время более сингулярны, чем другие рассмотренные нами возмущения. Типичный гамильтониан этого класса $H_0 = -d^2/dx^2 + x^2$ на $L^2(\mathbb{R}, dx)$ с $V = x^{-\alpha}$. При $\alpha > 1$ это семейство разрывно в $\lambda = 0$, если $H_0+\lambda V$ определено как сумма форм. Фактически $H_0+\lambda V$ сходится при $\lambda \downarrow 0$ в сильном резольвентном смысле к оператору $\tilde{H}_0$, отличному от H_0. Это явление было открыто Клаудером (J. Klauder, Field structure through models studies.—*Acta Phys. Austriaca Supp.* **11** (1973), 341—387) и рассматривалось далее Саймоном (B. Simon, Quadratic forms and Klauder's phenomenon: A remark on very singular perturbations.— *J. Funct. Anal.* 14 (1973), 295—298), а также Де Фачо и Хаммером (B. De Facio, C. L. Hammer, Remarks on the Klauder phenomenon.— *J. Math. Phys.* **15** (1974) 1071—1077). Если $H(\lambda)$ в точке $\lambda = 0$ приравнять $\tilde{H}_0$, то полученное так семейство будет аналитично в $\lambda = 0$ при $1 \leqslant \alpha < 2$. При $2 \leqslant \alpha < 3$ собственные значения задаются асимптотическим рядом до первого порядка, пока $\lambda > 0$. Но для $\alpha \geqslant 3$ собственные значения приближаются к собственным значениям $\tilde{H}_0$ медленнее, чем линейно по λ. (Именно, при $\alpha > 3$

$$E(\lambda) - E(0) = c\lambda^{1/(\alpha-2)} + o(\lambda^{1/(\alpha-2)}),$$

где $c \neq 0$, и при $\alpha = 3$

$$E(\lambda) - E(0) = c\lambda \ln \lambda + O(\lambda).)$$

Эти явления далее обсуждаются в работах: J. Klauder, L. Detwiler, Supersingular quantum perturbations.—*Phys. Rev.* **D11** (1975), 1436—1441; W. Greenlee, Singular perturbation theory for semi-bounded operators.—*Bull. Amer. Math. Soc.* 82 (1976), 341—344; E. Harrell, II, Singular Perturbation Potentials.— *Ann. Phys.* **105** (1977), 379—406.

§ XII. 5. То, что шредингерова теория эффекта Штарка не совсем удовлетворительна вследствие появления непрерывного спектра в $(-\infty, \infty)$, было впервые отмечено Оппенгеймером (R. Oppenheimer, Three notes on the quantum theory of aperiodic effects.— *Phys. Rev.* 31 (1928), 66—81). Одна из интерпретаций ряда теории возмущений для этого случая, которую мы ниже обсудим, предложена Титчмаршем (E. C. Titchmarsh, Some theorems on perturbation theory, III, IV, V.—*Proc. Roy. Soc.* **A207** (1951), 321—328; **A210** (1951), 30—47; *J. Analyse Math.* 4 (1954/56), 187—208). В последней статье определено понятие «спектральной концентрации».

Выделению понятия спектральной концентрации и его связи с псевдособственными векторами способствовали следующие работы: K. Friedrichs, Über die Spektralzerlegung eines Integraloperators.— *Math. Ann.* 115 (1938), 249—272; On the perturbation of continuous spectra.—*Comm. Pure Appl. Math.* 1 (1948), 361—406; статья Като в *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo*, цитированная в замечаниях к § 3; K. Friedrichs, P. Rejto, On a perturbation through which a discrete spectrum can become continuous.—*Comm. Pure. Appl. Math.* 15 (1962), 219—235. Аналог теоремы XII. 22 для порядка p доказан Ридделем: R. C. Riddell, Spectral concentration for self-adjoint operators.—*Pacific J. Math.* 23 (1967), 377—401. Независимо одна половина расширенной теоремы (о том, что псевдособственный вектор p-го порядка приводит к спектральной концентрации p-го порядка), а также вся теорема XII.22 были доказаны Конли и Рейто (C. C. Conley, P. A. Rejto, Spectral concentration II: General Theory.. In: Perturbation Theory and its Application in Quantum Mechanics (C. H. Wilcox, ed.).— New York: Wiley, 1966). Наше доказательство теоремы XII.23 взято у Конли и Рейто. В их статье также подробно рассмотрен эффект Штарка в порядке $p > 1$. Более подробное обсуждение теории спектральной концентрации и еще некоторые ее применения см. у Веселича: K. Veselič, On spectral concentration for some classes of self-adjoint operators.— *Glasnik Math.* Ser. III 4 (1969), 213—228; The nonrelativistic limit of the Dirac equation and spectral concentration.— *Glasnik Math.* Ser. III 4 (1969), 231—240. В этой последней статье Веселич рассмотрел гамильтониан Дирака $H = H_0+V(x)-mc^2$, где $V(x) \to \infty$ при $|x| \to \infty$. Гамильтониан H имеет непрерывный спектр в $(-\infty, \infty)$ при любых c, так как для состояний с отрицательной энергией эффективный потенциал стремится к $-\infty$ при $|x| \to \infty$. Когда $c \to \infty$, для H наблюдается концентрация спектра вблизи собственных значений $-\Delta+V$.

Спектральные свойства гамильтониана эффекта Штарка рассмотрены в примере 8 § XIII.4 и в замечаниях к этому разделу.

Для класса моделей, тесно связанных с эффектом Штарка, но обладающих сферической симметрией, так что к ним применимы методы обыкновенных дифференциальных уравнений (например, $-d^2/dx^2+|x|-\beta x^2$ или $-\Delta-1/r-\beta|r|$), Титчмарш обнаружил следующее явление: H имеет непрерывный спектр, сконцентрированный вокруг псевдособственных значений (для $\beta > 0$ в двух указанных примерах), но псевдособственные значения имеют более сильный смысл — функция Грина (ядро резольвенты) имеет аналитическое продолжение ниже вещественной оси с полюсом в точке $E(\beta)$ на втором листе. Ряд Релея — Шредингера является асимптотическим для $\operatorname{Re} E(\beta)$, а $\operatorname{Im} E(\beta)$ стремится к нулю скорее, чем любое β^n. Это можно сравнить с явлением, рассмотренным в § 6. Полюсы на втором листе наличествуют в обоих случаях, однако в одном случае (эффект Штарка) ширина есть $o(\beta^n)$ при всех n, а в другом случае (эффект Оже) она есть $O(\beta^2)$. Это отражается на степени концентрации спектра: в одном случае (эффект Штарка) концентрация происходит во всех порядках, а в другом — только во втором порядке, но не в высших порядках (мы рассматриваем спектральную концентрацию в случае Оже в замечаниях к § 6).

Отметим, что в физической литературе мнимую часть полюса на втором листе иногда называют «естественной» шириной. В наблюдаемую ширину дает вклад также взаимодействие с радиационным полем (радиационная ширина) и тепловое движение источников (тепловая ширина, или допплерóва ширина).

Концентрация спектра в эффекте Штарка для гелия изучалась П. Рейто (P. Rejto, Second order concentration near the binding energy of the helium Schrödinger operator.— *Israel J. Math.* 6 (1968), 311—337; Spectral concentration for the helium Schrödinger operator.—*Helv. Phys. Acta* 43 (1970), 652—667). Пользуясь теоремами X.38 и XIII.39, легко проверить выполнение условий теоремы XII.22 в этом случае.

При обсуждении спектральной концентрации в электрических полях полезно иметь в виду, что собственные функции H_0 убывают быстрее, чем обратные полиномы, в том смысле, что $\psi \in D(r^n)$ при всех n. Результаты такого рода доказываются в § XIII.11.

Есть такой случай, когда собственные значения оказываются «поглощенными» непрерывным спектром, который гораздо менее сингулярен, чем все другие примеры, рассмотренные в этом разделе. Это аналитическое семейство типа (А), где дискретное собственное значение приближается к непрерывному спектру, когда β приближается к некоторой критической константе связи. Некоторые сведения об этом случае можно найти у Саймона (B. Simon, On the absorption of eigenvalues by continuous spectrum in regular perturbation problems.— *J. Funct. Anal.* **25** (1977), 338—344).

§ XII.6. Мысль о связи между полюсами на втором листе амплитуды рассеяния и резонансами была высказана в ранние годы квантовой теории Вайскопфом и Вигнером (V. Weisskopf, E. P. Wigner, Berechnung der natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie.— *Z. Phys.* **63** (1930), 54—73). Идея рассматривать вместо полюсов резольвенту есть дальнейшее уточнение этой схемы, которое обсуждается в следующих работах: J. Schwinger, Field theory of unstable particles.— *Ann. Phys.* **9** (1960), 169—193; C. Lovelace, Three particle systems and unstable particles.— In: Strong Interactions and High Energy Physics: 1963 Scottish Universities Summer School (R. C. Moorhouse, ed.).— Oliver and Boyd, 1964; A. Grossman, Nested Hilbert space in quantum mechanics, I.— *J. Math. Phys.* **5** (1964), 1025—1037. Конечно, между этой идеей и работой Титчмарша, описанной в конце замечаний к § 5, существует прямая связь.

Многие ранние попытки понять резонансы со строгой точки зрения приводили к подходящим несамосопряженным моделям, часто с компактным $H^*—H$. Типичный пример — работа М. С. Лившица, Метод несамосопряженных операторов в дисперсионной теории.— *УМН*, **12** (1957), 212—218. Обзор разных попыток такого рода см. в работе: C. L. Dolph, Recent developments in some non-self-adjoint problems of Mathematical Physics.— *Bull. Amer. Math. Soc.* **67** (1961), 1—69.

Попытки обнаружить полюсы на втором листе и связанные с этим явления, такие, как спектральная концентрация в резольвентах самосопряженных операторов, полученных с помощью возмущений операторов с собственными значениями, лежащими в непрерывном спектре, были предприняты Фридрихсом в его статье в *Comm. Pure Appl. Math.* цитированной в замечаниях к § 5, и в серии статей Хауленда: J. S. Howland, Perturbation of embedded eigenvalues by operators of finite rank.— *J. Math. Anal. Appl.* **23** (1968), 575—584; Embedded eigenvalues and virtual poles.—*Pacific J. Math.* **29** (1969), 565—582; Spectral concentration and virtual poles.— *Amer. J. Math.* **91** (1969), 1106—1126; On the Weinstein—Aronszajn formula.— *Arch. Rational Mech. Anal.* **39** (1970), 323—339. Во всех этих статьях рассматриваются компактные (и даже в большинстве случаев конечного ранга) возмущения. Возмущения же в § 6 не являются даже относительно компактными. Недавно (и приблизительно в одно время с работой Саймона, о которой ниже) Хауленд расширил метод Фридрихса на модели, подобные автоионизации. Эта работа обсуждается в статьях: J. S. Howland, Perturbation of embedded eigenvalues.— *Bull. Amer. Math. Soc.* **78** (1972), 380—383; Puiseux Series for Resonances at an Embedded Eigenvalue.— *Pacific J. Math.* **55** (1974), 157—176. В последней статье Хауленд показывает, что теорема Реллиха не распространяется на теорию резонанса, т. е. может случиться, что H_0 и V самосопряжены и вырожденное собственное значение E_0 оператора H_0 погружено в непрерывный спектр, а $H_0+\beta V$ имеет резонанс в $E_n(\beta)$, причем $E_n(\beta)$ не аналитична по β, но имеет ряд Пюизо с дробными степенями. Хауленд показал также, каким образом понятие резонанса, ассоциированного с погруженным собственным значением H_0, внутренне связано с парой $\{H_0, V\}$.

В этом разделе намечены только основы метода. Он развивается дальше в § XIII.10. В замечаниях к этому разделу приводятся подробные ссылки. Наше изложение здесь в значительной мере основано на статье: B. Simon, Resonances in N-body quantum systems with dilatation analytic potentials and the foundations of time-dependent perturbation theory.— *Ann. Math.* 97 (1973), 247—274.

Редукция с помощью симметрии описана в статье Саймона. Основная ее идея состоит в следующем. Оба оператора H_0 и V коммутируют с вращениями и отражением P относительно начала координат. Следовательно, они коммутируют с генераторами J_x, J_y, J_z вращений вокруг осей x, y и z (операторы углового момента). Операторы P, J_z и $J^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ коммутируют друг с другом и все имеют дискретный спектр. Следовательно, $\mathcal{H}$ распадается в прямую сумму $\bigoplus \mathcal{H}_{p, j, m}$, где $p = \pm 1$, $j = 0, 1, 2, \ldots$ и $m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$, так что если $\psi \in \mathcal{H}_{p, j, m}$, то

$$P\psi = p\psi, \quad J^2\psi = j(j+1)\psi, \quad J_z\psi = m\psi;$$

H_0 и V оставляют $\mathcal{H}_{p, j, m}$ инвариантными.

В случае атома гелия, как мы видели, $\sigma_{\text{ess}}(H_0) = [-1, \infty)$. Однако $\sigma_{\text{ess}}(H_0 \upharpoonright \mathcal{H}_{p, j, m}) = [-{}^1/_4, \infty)$, если $p = (-1)^{j+1}$, поэтому некоторые собственные значения H_0, лежащие в $[-1, -{}^1/_4)$ и представляющиеся погруженными, оказываются непогруженными, после того как проделана редукция с помощью симметрии. Эти собственные значения, разумеется, не исчезают, когда включается возмущение. Мы ожидаем, что все остальные собственные значения действительно исчезают; методом этого раздела доказательство этого факта сводится к тому, чтобы сосчитать явно $\operatorname{Im} a_2$ и убедиться в том, что она не равна нулю.

Спектральная концентрация изучалась в ситуациях, когда «виртуальный полюс» (полюс на втором листе) резольвенты $H_0 + \beta V$ появляется при $E(\beta)$, где $E(0)$ — вещественное собственное значение H_0 и $E(\beta)$ аналитична по β. Для семейства моделей Хауленд изучал этот вопрос в статье в *Pacific J. Math.*, цитированной выше. Для задачи Оже этот вопрос рассмотрел Саймон в цитированной выше работе. Результат, связанный с тем, что $\operatorname{Im} E = O(\beta^2)$, состоит в том, что существует спектральная концентрация до первого порядка. Именно, $P^{(H_0+\beta V)}(E_0 + \beta E_1 - f(\beta),\ E_0 + \beta E_1 + f(\beta)) \to P_{\{E_0\}}$ в сильном смысле тогда и только тогда, когда $f(\beta) \to 0$ и $f(\beta)/\beta^2 \to \infty$ (так что в некотором смысле существует концентрация до порядка p для дробных $p < 2$).

Наконец, изложим вкратце «обычную» физическую (*нестрогую*) аргументацию, приводящую к золотому правилу Ферми. Это позволит понять, почему формула

$$\Gamma = 2\pi \frac{d}{dE} (\Omega_0, V\tilde{P}(E) V \Omega_0)$$

есть формула Ферми, которая обычно записывается в несколько более формальном виде. Подробнее об этом см. Л. Ландау и Е. Лифшиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория.— М.: Физматгиз, 1963, с. 169—188. Сначала приходится считать, что пик обязан своим происхождением какому-то «виртуальному процессу». Иначе говоря, мы представляем дело так, как будто действительно существуют «связанные состояния» с энергией, близкой к энергиям E_n оператора H_0, лежащим в континууме. Эти состояния имеют характеристические времена жизни τ_n. Таким образом, процесс рассеяния $e + \mathrm{He}^+ \to e + \mathrm{He}^+$ рассматривается как $e + \mathrm{He}^+ \to \mathrm{He} \to e + \mathrm{He}^+$. Состояние гелия образуется и распадается в течение времени τ_n. Это состояние имеет определенную энергию E_n, но вследствие принципа неопределенности начальная энергия E состояния $e + \mathrm{He}^+$ не обязана быть строго равной E_n, для того чтобы образовалось указанное «связанное состояние». $\Delta E = E - E_n$ должно быть лишь порядка $1/\tau_n$ (мы положили $\hbar = 1$). Следовательно, пик из-за образования возбужденного состояния гелия имеет характеристическую ширину $\Gamma_n \equiv \tau_n^{-1}$. Образовавшееся состояние с энергией E_n распадается с распределением $|P_l(\cos\theta)|^2$, если l — угловой момент этого резонанса и если конечное состояние иона He^+ есть его основное состояние. В результате сечение рассеяния усиливается за счет наличия резонанса.

Пусть теперь φ_n есть связанное состояние оператора H_0 с энергией E_n. Предположим, что H_0 имеет «непрерывные собственные функции» $\varphi(E)$, так что $H_0\varphi(E)=E\varphi(E)$ и $\int dE\varphi(E)(\varphi(E),\eta)=\eta$ для всех $\eta\in\mathcal{H}$. Попробуем решить уравнение Шредингера $i\dot{\psi}=(H_0+V)\psi$ с $\psi(0)=\varphi_n$. Запишем

$$\psi(t)=\int a(E;\ t)\,\varphi(E)\,e^{-iEt}\,dE+\sum a_k(t)\,e^{-iE_kt}\,\varphi_k.$$

Вероятность того, что $\psi(t)$ не находится в состоянии φ_n в момент времени t (т. е. вероятность распада), задается формулой

$$P(t)=\int|a(E;\ t)|^2\,dE+\sum_{k\neq n}|a_k(t)|^2.$$

Формально $a(E;\ t)$ и $a_k(t)$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям

$$i\dot{a}(E;\ t)=\int a(E';\ t)(\varphi(E),\ V\varphi(E'))\,e^{-i(E'-E)t}\,dE'+$$
$$+\sum_k(\varphi(E),\ V\varphi_k)e^{-i(E_m-E)t}\,a_k(t),$$
$$i\dot{a}_m(t)=\int a(E';\ t)(\varphi_m,\ V\varphi(E'))\,e^{-i(E'-E_m)t}dE'+$$
$$+\sum_k(\varphi(E),\ V\varphi_k)\,e^{-i(E_m-E)t}a_k(t).$$

Решим формально эти уравнения в виде разложения «по степеням V». В низшем порядке ($V=0$) получим $a(E;\ t)=0$; $a_m(t)=0$, если $m\neq n$, и $a_n(t)=1$. Следовательно, в первом порядке

$$i\dot{a}^{(1)}(E;\ t)=e^{-i(E_m-E)t}(\varphi(E),\ V\varphi_m)$$

и аналогично для a_k. Таким образом,

$$a^{(1)}(E;\ t)=(\varphi(E),\ V\varphi_n)\left(\frac{e^{-i(E_n-E)t}-1}{E_n-E}\right)$$

или

$$P^{(1)}(t)=t\int(\varphi(E),\ V\varphi_n)^2\left(\frac{4\sin^2[(t/2)(E_n-E)]}{t(E_n-E)^2}\right)dE+\text{дискретная сумма}.$$

Когда $t\to\infty$, $4\sin^2((t/2)x)/2\pi tx^2\to\delta(x)$ в смысле обобщенных функций, так что можно писать

$$\lim_{t\to\infty}\frac{P^{(1)}(t)}{t}=2\pi\,|(\varphi(E),\ V\varphi_n)|^2\,|_{E=E_n}.$$

Но в низшем порядке $\Gamma=\lim_{t\to\infty}t^{-1}P^{(1)}(t)$. Следовательно,

$$\Gamma=2\pi\,|(\varphi(E),\ V\varphi_n)|^2\,|_{E=E_n}.$$

Это и есть золотое правило Ферми в наиболее привычной форме. Иногда, еще более формально, пишут $P_{n\to E}(t)=|a(E;\ t)|^2$, $\Gamma_{n\to E}=\lim_{t\to\infty}t^{-1}|a(E;\ t)|^2$, $\Gamma=\int\Gamma_{n\to E}\,dE$ и

$$\Gamma_{n\to E}=2\pi\,|(\varphi(E),\ V\varphi_n)|^2\,\delta(E-E_n).$$

Чтобы убедиться в том, что это в точности формальный вариант нашего результата § 6, заметим, что, рассуждая формально,

$$\tilde{P}(-\infty,\ E') = \int_{-\infty}^{E'} dE\,(\varphi(E),\ \cdot)\,\varphi(E).$$

Следовательно,

$$\frac{d}{dE'}(V\varphi_n,\ \tilde{P}(-\infty, E')\,V\varphi_n)\,|_{E'=E_n} = (V\varphi_n,\ \varphi(E'))\,(\varphi(E'),\ V\varphi_n)\,|_{E'=E_n} =$$
$$= |\,(V\varphi_n,\ \varphi(E'))\,|^2\,|_{E'=E_n}.$$

ЗАДАЧИ

†*1*. (a) Предположим, что все функции $f_0, f_2, \ldots, f_n$ и f_1^{-1} аналитичны в круге $\{\beta\,|\,|\beta-\beta_0|\leqslant R_0\}$. Пусть α_k определяются последовательными подстановками представления $\lambda=\lambda_0+\sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k(\beta-\beta_0)^k$ в (1). Докажите, что $|\alpha_k|\leqslant AR^k$ для подходящих A и R.

(b) Докажите, что любая аналитическая функция $\lambda(\beta)$, такая, что $\lambda(\beta_0)=\lambda_0$, и удовлетворяющая (1) вблизи $\beta=\beta_0$, равна $\lambda_0+\sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k(\beta-\beta_0)^k$ вблизи $\beta=\beta_0$.

†*2*. Пусть T — матрица, записанная в жордановой нормальной форме, причем λ_0 — ее собственное значение. Предположим, что ε настолько мало, что λ_0 — единственное собственное значение T в $\{\lambda\,|\,|\lambda-\lambda_0|\leqslant\varepsilon\}$. Докажите, что

$$P=-\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_{|\lambda-\lambda_0|=\varepsilon}(T-\lambda)^{-1}\,d\lambda$$

— проектор на множество $\{v\,|\,(T-\lambda_0)^n v=0$ для некоторого $n\}$ и $Pw=0$, если $(T-\lambda_1)^n w=0$ для $\lambda_1\neq\lambda_0$. [*Указание*. Докажите, что $(a^{-1})_{ij}=b_{ij}$, где

$$a_{ij}=(\mu-\lambda)\,\delta_{ij}+\delta_{i+1,j},$$
$$b_{ij}=(\mu-\lambda)^{-1}\delta_{ij}-(\mu-\lambda)^{-2}\delta_{i+1,j}+(\mu-\lambda)^{-3}\delta_{i+2,j}-\ldots.]$$

3. Пусть T — конечная матрица и 0 — ее собственное значение.

(a) Докажите, что $(T-\lambda)^{-1}$ аналитична в $\{\lambda\,|\,0<|\lambda|<R\}$ для некоторого R и существуют операторы A_n, такие, что $(T-\lambda)^{-1}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}A_n\lambda^n$, где ряд сходится, если $0<|\lambda|<R$.

(b) Докажите, что $A_n=\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_{|\lambda|=\varepsilon}\lambda^{-n-1}(T-\lambda)^{-1}\,d\lambda$ для $0<\varepsilon<R$.

*(c) Воспользуйтесь (b) для доказательства того, что $A_nA_m=(\eta_n+\eta_m-1)\,A_{n+m+1}$, где

$$\eta_n=\begin{cases}1, & n\geqslant 0,\\ 0, & n<0.\end{cases}$$

[*Указание.* См. доказательство теоремы XII.5.]

(d) Пусть $P=-A_{-1}$, $N=-A_{-2}$, $S=A_0$. Докажите, что $A_n=S^{n+1}$ при $n\geqslant 0$, $A_{-n}=-N^{n-1}$ при $n\geqslant 2$ и что $P^2=P$, $PN=NP=N$, $PS=SP=0$.

(e) Докажите, что $\sum\limits_{n=0}^{\infty}\zeta^n N^n$ сходится для всех $|\zeta|<\infty$. [*Указание.* Воспользуйтесь (a).]

*(f) Докажите, что $N^k=0$ для некоторого k.

(g) Докажите, что $TP=PT=N$.

4. Пусть T есть $n\times n$-матрица. Пусть $\lambda_1, \ldots, \lambda_l$ — ее собственные значения. Пусть

$$P_i=-\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_{|\lambda-\lambda_i|=\varepsilon_i}(T-\lambda)^{-1}\,d\lambda,$$

$$N_i=-\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_{|\lambda-\lambda_i|=\varepsilon_i}(\lambda-\lambda_i)(T-\lambda)^{-1}\,d\lambda.$$

(a) По аналогии с задачей 3 докажите, что $P_i^2=P_i$, $N_iP_i=P_iN_i=N_i$, $TP_i=P_iT=\lambda_iP_i+N_i$.

*(b) Докажите, что $P_iP_j=0$, если $i\neq j$, и $\sum\limits_{i=1}^{l}P_i=1$.

(c) (абстрактная жорданова нормальная форма). Докажите, что

$$T=\sum_{i=1}^{l}(\lambda_iP_i+N_i).$$

(d) Пусть матрица N нильпотентна, т. е. $N^k=0$ для некоторого k. Покажите, что в соответствующем векторном пространстве существует базис, в котором N имеет вид

$$N=\begin{bmatrix}0 & x & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & x & \cdots & 0\\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & x\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\end{bmatrix}$$

где каждый x равен 1 или 0.

(e) Покажите, что в подходящем базисе T обладает жордановой нормальной формой, рассмотренной в § 1.

Литература к задачам 3, 4: Т. Като, Теория возмущений линейных операторов. — М.; Мир, 1972, с. 54—61.

5. Пусть H_0 — самосопряженная матрица с собственными значениями $E_0<E_1<E_2<\ldots<E_k$. Предположим, что E_0 — невырожденное собственное значение. Пусть V — произвольная самосопряженная матрица, и пусть $E_0+\sum\limits_{n=1}^{\infty}\alpha_n\beta^n$ — ряд Релея—Шредингера для собственного значения оператора $H_0+\beta V$ в окрестности E_0.

(a) Докажите, что все α_n вещественны.

(b) Докажите, что $\alpha_2\leqslant 0$.

(c) Найдите явный пример с $\alpha_4 > 0$.

(d) Докажите, что если $V \geqslant 0$ в смысле матричных неравенств, то $\alpha_1 \geqslant 0$.

(e) Найдите явный пример, для которого $V \geqslant 0$, но $\alpha_8 \leqslant 0$.

[*Указание для* (c) *и* (e). Воспользуйтесь примером 2×2-матриц и решите вековое уравнение для этих матриц явно.]

†*6*. (a) Пусть P—ограниченный оператор на банаховом пространстве X, причем $P^2=P$. Докажите, что множества $E=\operatorname{Ran} P$ и $F=\operatorname{Ker} P$ суть замкнутые подпространства в X и $E\cap F=\{0\}$, $E+F=X$. Докажите, что любое $x\in X$ можно однозначно записать как $x=e+f$, где $e\in E$, $f\in F$.

(b) Обратно, для данных замкнутых подпространств E и F банахова пространства X, таких, что $E\cap F=\{0\}$ и $E+F=X$, докажите, что существует единственный *ограниченный* оператор P на X, удовлетворяющий условиям $P^2=P$ и $F=\operatorname{Ker} P$, $E=\operatorname{Ran} P$. [*Указание*. Воспользуйтесь теоремой о замкнутом графике.]

7. Докажите следующий дополнительный факт, относящийся к ситуации, описанной в теореме XII.6. Если $\dim P=n$ и $\nu_1, \ldots, \nu_k$—собственные значения оператора A в $\{\nu \mid |\nu-\lambda| < r\}$, то $\sum\limits_{i=1}^{k} m_i=n$, где m_i—алгебраическая кратность ν_i как собственного значения.

†*8*. Пусть $T(\beta)$— семейство ограниченных операторов, определенных на области $R\subset \mathbb{C}$ и таких, что $\sup\limits_{\beta\in R} \|T(\beta)\| < \infty$. Докажите, что $T(\beta)$—аналитическая функция в смысле § VI.3 тогда и только тогда, когда $T(\beta)$—аналитическое семейство в смысле Като.

†*9*. Функция F, определенная на открытом множестве D в банаховом пространстве X и принимающая значения в Y—другом банаховом пространстве, называется аналитической тогда и только тогда, когда для всех $x\in D$ существуют функции $f_x^{(1)}, \ldots, f_x^{(n)}, \ldots$, где $f_x^{(j)}$ есть j-линейная функция из $X\times\ldots\times X$ (j раз) в Y, такая, что

(i) для некоторых C и R выполняется неравенство $\|f_x^{(j)}(y_1, \ldots, y_j)\| \leqslant CR^{-j}\|y_1\|\ldots\|y_j\|$;

(ii) если $\|y\| < R$, то $F(x+y)=\sum\limits_{j=0}^{\infty} f_x^{(j)}(y, y, \ldots, y)$, где $f_x^{(0)}=F(x)$.

(a) Пусть $\Omega\subset\mathbb{C}$. Пусть Y—комплексное банахово пространство. Докажите, что функция $F\colon \Omega\to Y$ аналитична в указанном выше смысле тогда и только тогда, когда она аналитична в смысле § VI.3.

(b) Пусть F—аналитическая функция на $D\subset X$, принимающая значения в Y, а g—аналитическая функция на подмножестве $\Omega\subset\mathbb{C}$, принимающая значения в D; положим $F\circ g\colon \Omega\to Y$. Докажите, что $F\circ g$ аналитична в смысле § VI.3.

(c) Пусть $X=\mathscr{L}(Z)$—ограниченные операторы на некотором банаховом пространстве Z. Пусть $D=\{A\in X \mid A$ имеет ограниченный обратный$\}$. Докажите, что $F(A)=A^{-1}$—аналитическая функция на D со значениями в X.

†*10*. Пусть $T(\beta)$—аналитическое семейство типа (A) в окрестности $\beta=0$.

(a) Докажите, что существуют операторы T_n с областями определения $D(T_n)\supset D(T_0)$ и $T_0\equiv T(0)$, такие, что (i) для некоторых a, b и c

и всех $\psi \in D(T(0))$ имеем $\|T_n\psi\| \leqslant c^{n-1}(a\|T(0)\psi\| + b\|\psi\|)$; (ii) для любого $\psi \in D(T(0))$ и β, достаточно малых по модулю, имеем $T(\beta)\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \beta^n T_n \psi$, где ряд сходится равномерно.

(b) Докажите, что в общем случае аналитическое семейство типа (A) есть аналитическое семейство и в смысле Като.

Литература к задаче 10: книга Като (см. задачу 4), стр. 470—477.

†*11*. Предположим, что $V \ll H_0$, $W \ll H_0$. Докажите, что $W \ll H_0 + V$.

†*12*. В контексте теоремы XII.9 докажите, что для малых β оператор $A = (H_0 - \lambda)^{-1}[1 + \beta V(H_0 - \lambda)^{-1}]^{-1}$ обратен к $H_0 + \beta V - \lambda$. Конкретно, покажите, что $\operatorname{Ran} A \subset D(H_0)$ и $(H_0 + \beta V - \lambda) A\psi = \psi$ для всех $\psi \in \mathscr{H}$ и $A(H_0 + \beta V - \lambda)\psi = \psi$ для всех $\psi \in D(H_0)$.

13. Пусть $A(\beta)$ — компактная операторнозначная функция на связном открытом множестве $R \subset \mathbb{C}$. Пусть $f(\beta)$ — аналитическая функция на R. Предположим, что $f(\beta) \neq 0$ для всех $\beta \in R$ и что $f(\beta_i)$ — собственное значение $A(\beta_i)$ для $\beta_1, \ldots, \beta_n, \ldots \in R$, где последовательность $\beta_1, \ldots, \beta_n, \ldots$ обладает в R предельной точкой. Выведите отсюда, что $f(\beta)$ — собственное значение $A(\beta)$ для всех $\beta \in R$. [*Указание*. Примените к $f(\beta)^{-1} A(\beta)$ аналитическую теорему Фредгольма.]

†*14*. Докажите теорему XII.11. *Литература*: книга Като, стр. 116—117, 475—477.

15. Пусть $H(\beta)$ — аналитическое семейство в смысле Като в односвязной области $R \subset \mathbb{C}$. Предположим, что $E(\beta)$ — изолированное невырожденное собственное значение $H(\beta)$ для каждого $\beta \in R$. Докажите, что существует аналитическая векторная функция ψ на R, такая, что $H(\beta)\psi(\beta) = E(\beta)\psi(\beta)$ и $\psi(\beta) \neq 0$ для всех $\beta \in R$. [*Указание*. Воспользуйтесь теоремой XII.12.]

16. Предположим, что $P_i(\beta)$ — аналитическая проекторнозначная функция β при всех $\beta \in R$ — связной односвязной области из $\mathbb{C}$ при $i = 1, \ldots, k$. Предположим, что $P_i(\beta) P_j(\beta) = 0$, если $i \neq j$ и $\beta \in R$, и что $\sum_{i=1}^{k} P_i(\beta) = 1$. Предположим, что $0 \in R$. Найдите аналитические в R и обратимые операторнозначные функции $U(\beta)$, такие, что $U(\beta)P_i(0)U(\beta)^{-1} = P_i(\beta)$ для всех $\beta \in R$, причем $U(\beta)$ унитарны при вещественных β, если все проекторы $P_i(\beta)$ ортогональны при вещественных β. [*Указание*. Воспроизведите доказательство теоремы XII.12, положив $Q(\beta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k} [P_i'(\beta).\ P_i(\beta)]$.]

17. Пусть $T(\beta)$ — аналитическая функция в окрестности нуля, принимающая значения в множестве $n \times n$-матриц. Предположим, что $T(\beta)$ самосопряжена для всех вещественных β.

(a) Предположим, что E_0 — собственное значение кратности m матрицы $T(0)$ и что $E_1(\beta), \ldots, E_k(\beta)$ суть различные собственные значения $T(\beta)$ вблизи E_0. Докажите сначала, что проекторы $P_i(\beta)$ и собственные значения $E_i(\beta)$ мероморфны в $\beta = 0$. Затем, пользуясь самосопряженностью, докажите, что $P_i(\beta)$ аналитичны при $\beta = 0$.

(b) Докажите, что существуют аналитические векторнозначные функции $\psi_1(\beta), \ldots, \psi_n(\beta)$ в окрестности нуля, такие, что $\psi_i(\beta)$ — собственные векторы и $(\psi_i(\beta), \psi_j(\beta)) = \delta_{ij}$ для всех вещественных β. [*Указание*. Воспользуйтесь задачей 16.]

†*18*. Завершите доказательство леммы из доказательства теоремы XII.12.

19. Пусть P и Q — (не обязательно ортогональные) проекторы на гильбертовом пространстве, причем $\|P-Q\| < 1$. Пусть $A=(1-P)(1-Q)+PQ$; $B=(1-Q)(1-P)+QP$; $C=[1-(P-Q)^2]$.

(a) Докажите, что $AB=BA=C$.

(b) Пусть $\sum\limits_{n=0}^{\infty} \alpha_n x^n$ — ряд Тейлора для $(1-x)^{-1/2}$ около $x=0$, и пусть
$$D=\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n (P-Q)^n;$$ последний ряд сходится, поскольку $\|P-Q\| < 1$. Докажите, что $D^2C=CD^2=DCD=1$.

(c) Докажите, что $P(P-Q)^2=(P-Q)^2P$ и $Q(P-Q)^2=(P-Q)^2Q$. Выведите отсюда, что $DP=PD$, $QD=DQ$.

(d) Пусть $W=DA$. Докажите, что W^{-1} существует и $W^{-1}=BD$.

(e) Докажите, что $WQ=PW$.

(f) Докажите, что в случае, когда P и Q самосопряжены, W унитарен.

20. Пусть $A(\beta)$ — аналитическая функция, определенная вблизи $\beta=0$, со значениями в множестве конечных матриц. Пусть E_0 — собственное значение при $\beta=0$ кратности m. Пусть $g_1(\beta), \ldots, g_k(\beta)$ — многозначные аналитические функции, определенные вблизи $\beta=0$, значения которых суть все собственные значения $A(\beta)$ вблизи E_0. Пусть $P_j(\beta)$ — проектор на собственное подпространство:
$$-\frac{1}{2\pi i}\int_{|\mu-g_j(\beta)|=\varepsilon} (A(\beta)-\mu)^{-1}\,d\mu.$$

(a) Докажите, что $P_j(\beta)$ — многозначная аналитическая функция вблизи $\beta=0$ и величина $|\beta|^k\|P_j(\beta)\|$ ограничена при $\beta\to 0$ для некоторого k.

(b) Докажите, что если $A(\beta)$ самосопряжена для вещественных β, то $P_j(\beta)$ — однозначная аналитическая функция вблизи точки $\beta=0$ и в самой этой точке.

21. Цель данной задачи — доказательство теоремы Батлера: если некоторое собственное значение $g_j(\beta)$ (см. задачу (20)) не является однозначной функцией, то $\|P_j(\beta)\|\to\infty$ при $\beta\to 0$.

(a) Воспользуйтесь задачей 20, чтобы доказать, что если $\|P_j(\beta)\|$ не стремится к ∞, то $P_j(\beta)$ обладает разложением Пюизо
$$P_j(\beta)=A_0+\beta^{1/m}A_1+\ldots.$$

(b) Докажите, что $A_0^2=A_0$. [*Указание*: $P_j(\beta)^2=P_j(\beta)$.]

(c) Докажите, что $A_0^2=0$. [*Указание*: $P_j(\beta e^{2\pi i})\,P_j(\beta)=0$.]

(d) Выведите отсюда, что $P_j(\beta)\to 0$ при $\beta\to 0$.

(e) Докажите, что норма любого ненулевого проектора Q удовлетворяет неравенству $\|Q\|\geqslant 1$.

(f) Обоснуйте заключение, что $\|P_j(\beta)\|\to\infty$.

Литература: работа Батлера, указанная в замечаниях к § 1.

22. Воспользуйтесь теоремой Батлера для доказательства теоремы Реллиха (теорема XII.3.)

23. Пусть $A(\beta)$ — аналитическая функция вблизи $\beta=0$, принимающая значения в множестве конечных матриц. Предположим, что E_0 — собственное значение $A(0)$ с ассоциированной собственной нильпотентной матрицей $N \neq 0$ (см. задачи 3, 4). Предположим, что при β вблизи 0 собственные значения матриц $A(\beta)$ около E_0 имеют нулевые ассоциированные собственные нильпотентные матрицы. Докажите, что проекторы $P_j(\beta)$ из задачи 20 имеют особенность при $\beta=0$.

24. В предположениях теоремы XII.14 докажите, что существует векторно-значная функция $\Omega(\beta)$, аналитическая в области $\{\beta \mid |\arg\beta| < \theta, |\beta| < B\}$ для некоторого $B > 0$, такая, что (i) $H(\beta)\Omega(\beta) = E(\beta)\Omega(\beta)$; (ii) $(\Omega_0, \Omega(\beta)) \equiv 1$, (iii) $\Omega(\beta)$ обладает асимптотическим рядом $\sum \varphi_n\beta^n$ при $|\beta| \downarrow 0$, $|\arg\beta| < \theta$, члены которого даются выражениями, содержащими только V, $(H_0-\lambda)^{-1}$ и Ω_0.

†25. В условиях теоремы XII.14 докажите, что для любого вектора $\Omega \in C^\infty(H_0)$ и любого компактного множества $K \subset \rho(H_0)$ выражение $[V(H_0-E)^{-1}]^N\Omega$ есть непрерывная по норме функция E в K. [*Указание*: введите топологию в пространстве $C^\infty(H_0)$, соответствующую нормам $\|\Omega\|_n = \|(|H_0|+1)^n\Omega\|$, и докажите, что V непрерывно отображает $C^\infty(H_0)$ в себя.]

†26. Последовательность $(a_0, a_1, \ldots)$ комплексных чисел можно рассматривать как **формальный ряд** $\sum a_n z^n$. В множестве F формальных рядов можно ввести операции сложения: $(a_0, \ldots)+(b_0, \ldots) = (c_0, \ldots)$, где $c_n = a_n + b_n$, и умножения: $(a_0, \ldots)\cdot(b_0, \ldots) = (d_0, \ldots)$, где $d_n = \sum_{m=0}^{n} a_m b_{n-m}$.

(a) Докажите, что F с этими операциями есть область целостности, причем $(1, 0, \ldots)$ — мультипликативная единица.

(b) Докажите, что элемент $(b_0, b_1, \ldots)$ имеет обратный в смысле умножения тогда и только тогда, когда $b_0 \neq 0$.

(c) Пусть A и B — формальные ряды, причем $b_0 \neq 0$. Пусть C — формальный ряд $C = AB^{-1}$ Докажите, что C — асимптотический ряд для f/g, если A — асимптотический ряд для f, а B — асимптотический ряд для g.

(d) Докажите аналог (c), заменив везде «асимптотический» на «сильно асимптотический».

†27. Пусть A и B — замкнутые операторы, причем пересечение $D(A) \cap D(B)$ плотно. Докажите, что $C = A + B$ замкнут на $D(A) \cap D(B)$ тогда и только тогда, когда $A^*A + B^*B \leqslant \alpha(C^*C+1)$ с некоторой константой α.

†28. Пользуясь операторами рождения и уничтожения $A^\dagger$, A из § V.3, докажите выполнение оценок (iii), (iv), (v) из теоремы XII.16 для случая, рассмотренного в примере 3 из § 3.

†29. (a) Докажите, что любая функция $g(z)$, аналитическая в области $R = \{z \mid 0 < |z| < B, |\arg z| < k\pi/2 + \varepsilon\}$ и такая, что для всех N и всех $z \in R$ выполняется неравенство $|g(z)| \leqslant A\sigma^N[k(N+1)]! \, |z|^N$, тождественно равна нулю. [*Указание*: положите $h(w) = g(w^k)$ и воспользуйтесь для h теоремой XII.18.]

(b) Распространите метод суммирования по Борелю и теорему Ватсона на функции f, аналитические во введенной выше области R и удовлетворяющие сильному асимптотическому условию порядка k.

30. Пусть задан замкнутый оператор V, такой, что для некоторого самосопряженного оператора H_0 имеем $C^\infty(H_0) \subset D(V)$. Пусть K — компактное подмножество в $\rho(H_0)$ и $H(\beta)$ — замкнутые операторы, определенные в области $0 < |\beta| < B$, $|\arg\beta| \leqslant \theta$ и такие, что (i) $H(\beta) \upharpoonright C^\infty(H_0) = H_0 + \beta V$; (ii) $K \subset \rho(H(\beta))$ для всех β с $|\beta| < B$. Докажите, что

$$(H(\beta)-z)^{-1} \underset{\substack{|\beta|\to 0\\ |\arg\beta|\leqslant\theta}}{\longrightarrow} (H_0-z)^{-1}$$

сильно для всех $z \in K$ тогда и только тогда, когда для каждого $z \in K$

$$\limsup_{\substack{|\beta|\to 0\\ |\arg\beta|\leqslant\theta}} \|(H(\beta)-z)^{-1}\| < \infty.$$

†*31.* Пусть $P^{(n)}$ — последовательность проекторнозначных мер, таких, что

$$P^{(n)}(a_0+a_1\beta-f(\beta),\ a_0+a_1\beta+f(\beta)) \xrightarrow{s} P_\infty$$

и

$$P^{(n)}(b_0+b_1\beta-g(\beta),\ b_0+b_1\beta+g(\beta)) \xrightarrow{s} P_\infty,$$

где P_∞ — ненулевой проектор и $f(\beta)/\beta \longrightarrow 0$, $g(\beta)/\beta \longrightarrow 0$. Докажите, что $a_0 = b_0$ и $a_1 = b_1$. [*Указание*: $P^{(n)}(\Omega)P^{(n)}(\Omega') = 0$, если $\Omega \cap \Omega' = \varnothing$.]

†*32.* В условиях (i) и (ii) теоремы XII.23 докажите, что
(a) область $(H_0+i) \times [D(H_0) \cap D(V)]$ плотна в $\mathscr{H}$;
(b) $(H_0+i)^{-1} - (H_0+\beta V+i)^{-1} \longrightarrow 0$ сильно при $\beta \longrightarrow 0$.

†*33.* Докажите формулу

$$a_2 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|E-E_0|=\varepsilon} (\overline{\Omega(\theta;\,0)},\ V[H_0(\theta)-E]^{-1} V\Omega(\theta;\,0)) \frac{dE}{E-E_0}$$

для ситуации, описанной в § 6. [*Указание*: воспользуйтесь методами § 1, принимая во внимание тот факт, что $H_0(\theta)$ не самосопряжен, но что $H_0^*(\theta)\bar{f} = \overline{H_0(\theta) f}$.]

†*34.* Рассмотрим ситуацию, описанную в § 6, где $H(\theta)$ — аналитическое семейство по θ, причем $H(\theta) = U(\theta) H U(\theta)^{-1}$ для вещественных θ и

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(H(\theta)) = \{\lambda + xe^{-2\theta} \mid \lambda \in \Sigma,\ x \in \mathbb{R}_+\},$$

где $\Sigma = \{-1/n^2\}$. Предположим, что $H(\theta)$ обладает вещественным собственным значением $E_0 \notin \Sigma$ при всех θ с $\operatorname{Im}\theta > 0$. Положим $H(0) \equiv H$.

(a) Найдите такие векторы $\psi \in \mathscr{H}$, что функция $(\psi, (H-z)^{-1}\psi)$ имеет аналитическое продолжение в область ниже вещественной оси вблизи E_0 с полюсом в E_0 с ненулевым вычетом.

(b) Для $\psi \in \mathscr{H}$ докажите, что $\lim\limits_{\varepsilon\downarrow 0}(z-E_0)(\psi, (H-z)^{-1}\psi)|_{z=E_0+i\varepsilon} \neq 0$.

(c) Докажите, что для любого самосопряженного оператора A

$$\underset{\varepsilon\downarrow 0}{\text{s-lim}}\,(z-E_0)(A-z)^{-1}|_{z=E_0+i\varepsilon} = P_{\{E_0\}}$$

— спектральный проектор на собственное подпространство точки E_0. [*Указание*: воспользуйтесь функциональным исчислением.]

(d) Выведите отсюда, что E_0 — собственное значение H.

(e) Докажите, что функция $(\psi, (H-z)^{-1}\psi)$ не может иметь в E_0 полюс второго порядка ни при каком $\psi \in \mathcal{H}$.

(f) Пусть $\varphi = P(\theta)\varphi$ для некоторого θ с $\operatorname{Im}\theta > 0$, где

$$P(\theta) = -\frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{|E-E_0|=\varepsilon(\theta)} (H(\theta)-E)^{-1}\, dE.$$

Докажите, что $H(\theta)\varphi = E_0\varphi$.

Примечание: вообще говоря, согласно задаче 4, $(H(\theta)-E_0)^n\varphi = 0$ для некоторого n, однако, пользуясь (e), можно доказать (f).

(g) Докажите, что $\dim \operatorname{Ran}(P(\theta)) = \dim \operatorname{Ran}(P_{\{E_0\}})$.

(h) Докажите, что если E_0' — собственное значение H, то оно и собственное значение $H(\theta)$ при $\operatorname{Im}\theta > 0$.

†*35*. Пусть выполнены условия задачи 34.

*(a) Докажите, что $P(\theta) \to P_{\{E_0\}}$ сильно, если $\operatorname{Im}\theta > 0$ и $\theta \to 0$.

(b) Докажите, что $P(\theta)$ продолжается до функции, аналитической в полосе $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant b$. [*Указание*: воспользуйтесь принципом симметрии Шварца.]

(c) Докажите, что при вещественном θ будет $P(\theta) = U(\theta) P_{\{E_0\}} U(\theta)^{-1}$.

(d) Для $\Omega_0 \in \operatorname{Ran} P_{\{E_0\}}$ докажите, что $U(\theta)\Omega_0$ обладает аналитическим продолжением в полосу $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant b$, причем $U(\theta)\Omega_0 \in D(H(\theta))$ при всех θ.

Литература к задачам 34 и 35: статья Балслева и Комба, указанная в замечаниях к § XIII.10.

†*36*. Восполните детали примера 6 из § 3.

XIII. СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Если атом может колебаться более чем одним способом, то, несомненно, между периодами этих колебаний должны существовать какие-то связи, и мы можем попытаться открыть эти связи при помощи экспериментов. Мы можем также подумать о причинах, приводящих к столь большим различиям в химических свойствах одних элементов, в то время как другие обладают свойствами столь же замечательно схожими. Эти размышления, возможно, заставят нас проследить, нет ли сходства в периодах колебаний тех молекул, которые имеют похожие химические свойства, или, иначе, мы можем попытаться классифицировать элементы в соответствии с их спектрами и посмотреть, не приведет ли эта классификация к разделению элементов на те же самые группы, на которые они были разделены по их химическому поведению.

А. ШУСТЕР, 1882

XIII.1. Принцип минимакса

В этой главе мы опишем методы определения спектральных свойств заданного самосопряженного оператора H. Нам потребуются сведения не только о $\sigma(H)$ — спектре оператора H, но также о подмножествах $\sigma_{ess}(H)$, $\sigma_{disc}(H)$, $\sigma_{ac}(H)$, $\sigma_{sing}(H)$, $\sigma_{pp}(H)$, которые мы определили в § VII.2 и VII.3. Нас будут интересовать количественные сведения, такие, как точное определение некоторых или всех этих подмножеств, а также качественные сведения вроде «$\sigma_{disc}(H)$ конечен» или «$\sigma_{pp} \subset (\sigma_{disc} \cup \partial\sigma_{ess})$».

В этом разделе мы построим метод, позволяющий извлекать сведения о $\sigma_{disc}(H)$ и $\sigma_{ess}(H)$ из средних значений $(\psi, H\psi)$. Этот метод особенно полезен в том случае, когда H имеет существенный спектр $[a, \infty)$ с некоторым $a > -\infty$ и какие-то собственные значения в $(-\infty, a)$. Это как раз обычный случай для гамильтонианов, встречающихся в квантовой теории.

Чтобы понять, какого рода результаты мы хотим получить, предположим, что A и B — две самосопряженные 3×3-матрицы, причем $A \leqslant B$ в том смысле, что $(\psi, A\psi) \leqslant (\psi, B\psi)$ при всех $\psi \in \mathbb{C}^3$. Пусть $\lambda_1(A)$, $\lambda_2(A)$, $\lambda_3(A)$ — три собственных значения A, занумерованных так, что $\lambda_1(A) \leqslant \lambda_2(A) \leqslant \lambda_3(A)$, и аналогично для $\lambda_i(B)$, $i = 1, 2, 3$. Так как $A \leqslant B$, то мы ожидаем, что $\lambda_i(A) \leqslant \lambda_i(B)$ для $i = 1, 2, 3$. Можно ли доказать это? Пусть ψ_1, ψ_2, ψ_3 — три ортонормированных собственных вектора матрицы A. Записав $\psi=\alpha_1\psi_1+a_2\psi_2+\alpha_3\psi_3$, мы увидим, что

$$\frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)}=\frac{|\alpha_1|^2\lambda_1(A)+|\alpha_2|^2\lambda_2(A)+|\alpha_3|^2\lambda_3(A)}{|\alpha_1|^2+|\alpha_2|^2+|\alpha_3|^2},$$

откуда $\lambda_1(A)=\min\limits_{\psi\neq 0}(\psi, A\psi)/(\psi, \psi)$ и $\lambda_3(A)=\max\limits_{\psi\neq 0}(\psi, A\psi)/(\psi, \psi)$. Эти формулы вместе с аналогичными формулами для $\lambda_1(B)$, $\lambda_3(B)$ приводят к неравенствам $\lambda_1(A)\leqslant\lambda_1(B)$ и $\lambda_3(A)\leqslant\lambda_3(B)$, если $A\leqslant B$. Остается только показать, что $\lambda_2(A)\leqslant\lambda_2(B)$. Итак, нам нужна формула для $\lambda_2(A)$, аналогичная выражению для $\lambda_1(A)$ через $(\psi, A\psi)$. Заметим прежде всего, что

$$\lambda_2=\min_{\substack{\{\alpha_1,\, \alpha_2,\, \alpha_3\}\neq 0\\ \alpha_1=0}}\frac{\alpha_1^2\lambda_1+\alpha_2^2\lambda_2+\alpha_3^2\lambda_3}{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2},$$

или, эквивалентным образом,

$$\lambda_2(A)=U_A(\psi_1),$$

где

$$U_A(\psi)=\min_{\{\varphi\mid(\varphi,\, \psi)=0,\ \varphi\neq 0\}}(\varphi, A\varphi)/(\varphi, \varphi).$$

Это не совсем то, что нам нужно, так как $U_A(\psi_1)$ зависит не только от $(\varphi, A\varphi)$ при всех φ, но также и от ψ_1. Однако заметим, что для произвольного ψ можно найти некоторое $\varphi=\alpha_1\psi_1+\alpha_2\psi_2$ с $\langle\alpha_1, \alpha_2\rangle\neq\langle 0, 0\rangle$, ортогональное ψ. Значит, существует такое φ, что $(\varphi, \psi)=0$ и $(\varphi, A\varphi)/(\varphi, \varphi)\leqslant\lambda_2(A)$. Поэтому $U_A(\psi)\leqslant\lambda_2(A)$ при всех ψ. Итак, мы заключаем, что

$$\lambda_2(A)=\max_{\psi}\min_{\substack{\varphi\in[\psi]^{\perp}\\ \varphi\neq 0}}(\varphi, A\varphi)/(\varphi, \varphi). \tag{1}$$

Таким образом, мы выразили $\lambda_2(A)$ только через $(\varphi, A\varphi)$ и можем этим воспользоваться для доказательства того, что $\lambda_2(A)\leqslant\lambda_2(B)$ (задача 1).

Мы хотим теперь распространить (1) на n-е собственное значение самосопряженного оператора в бесконечномерном пространстве. При этом возникают два осложнения: (1) появление неточечного спектра; (2) проблемы области определения. Эти затруднения преодолеваются при аккуратной формулировке следующего основного результата этого раздела:

Теорема XIII.1 (принцип минимакса в операторной форме). Пусть H — самосопряженный оператор, ограниченный снизу, т. е. $H\geqslant cI$ с некоторым c. Определим

$$\mu_n(H)=\sup_{\varphi_1,\, \ldots,\, \varphi_{n-1}}U_H(\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}),$$

где

$$U_H(\varphi_1, \ldots, \varphi_m) = \inf_{\substack{\psi \in D(H);\ \|\psi\|=1 \\ \psi \in [\varphi_1, \ldots, \varphi_m]^\perp}} (\psi, H\psi),$$

$[\varphi_1, \ldots, \varphi_m]^\perp$ — краткое обозначение для $\{\psi \mid (\psi, \varphi_i) = 0,\ i = 1, \ldots \ldots, m\}$. Заметим, что φ_i не обязательно независимы.

Тогда для каждого фиксированного n *либо*:

(a) существуют n собственных значений (считая вырожденные собственные значения столько раз, какова их кратность), лежащих ниже края существенного спектра, а $\mu_n(H)$ есть n-е собственное значение (с учетом кратности);

либо

(b) μ_n — нижний край существенного спектра, т. е. $\mu_n = \inf\{\lambda \mid \lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H)\}$, и в этом случае $\mu_n = \mu_{n+1} = \mu_{n+2} = \ldots$ и существует самое большее $n-1$ собственных значений (с учетом кратностей) ниже μ_n.

Доказательство. Пусть P_Ω — проекторнозначная мера для H. Мы сначала докажем, что

$$\dim[\operatorname{Ran}(P_{(-\infty, a)})] < n, \quad \text{если } a < \mu_n, \tag{2a}$$

$$\dim[\operatorname{Ran}(P_{(-\infty, a)})] \geqslant n, \quad \text{если } a > \mu_n. \tag{2b}$$

В самом деле, допустим, что (2a) несправедливо. Тогда можно найти n-мерное пространство $V \subset D(H)$, такое, что $(\psi, H\psi) \leqslant \leqslant a\|\psi\|^2$ для любого $\psi \in V$. То, что V лежит в $D(H)$, есть следствие ограниченности H снизу, откуда вытекает, что $\operatorname{Ran}(P_{(-\infty, a)}) \subset \subset D(H)$, если $a < \infty$. Но тогда для любых заданных $\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}$ можно найти $\psi \in V \cap [\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}]^\perp$. Следовательно, $U(\varphi_1, \ldots \ldots, \varphi_{n-1}) \leqslant a$ при любых $\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}$, так что $\mu_n(H) \leqslant a$ вопреки основному предположению. Это доказывает (2a).

Допустим теперь, что несправедливо (2b). Тогда $\dim(\operatorname{Ran}(P_{(-\infty, a)})) \leqslant n-1$, так что можно найти такие $\varphi_1^{(0)}, \ldots \ldots, \varphi_{n-1}^{(0)}$, что $[\varphi_1^{(0)}, \ldots, \varphi_{n-1}^{(0)}] = \operatorname{Ran}(P_{(-\infty, a)})$; тогда любое $\psi \in [\varphi_1^{(0)}, \ldots, \varphi_{n-1}^{(0)}]^\perp \cap D(H)$ лежит в $\operatorname{Ran} P_{[a, \infty)}$, так что $(\psi, H\psi) \geqslant a\|\psi\|^2$. Следовательно, $U(\varphi_1^{(0)}, \ldots, \varphi_{n-1}^{(0)}) \geqslant a$ и $\mu_n \geqslant a$, вопреки основному предположению. Это доказывает (2b).

Заметим, что вследствие (2) и ограниченности H снизу μ_n конечно. Мы должны рассмотреть два разных случая:

Случай 1: $\dim(\operatorname{Ran} P_{(-\infty, \mu_n+\varepsilon)}) = \infty$ для всех $\varepsilon > 0$. Мы утверждаем, что тогда имеет место утверждение (b) теоремы. В самом деле, согласно (2a), $\dim(\operatorname{Ran} P_{(-\infty, \mu_n-\varepsilon]}) \leqslant n-1$, и, следовательно, $\dim P_{(\mu_n-\varepsilon, \mu_n+\varepsilon)} = \infty$ для всех $\varepsilon > 0$. Значит, по определению σ_{ess}, $\mu_n \in \sigma_{\text{ess}}(H)$. С другой стороны, если $a < \mu_n$ и $0 < \varepsilon < \mu_n - a$, то опять-таки из (2a) вытекает, что $\dim P_{(a-\varepsilon, a+\varepsilon)} < n < \infty$, и потому $a \notin \sigma_{\text{ess}}(H)$. Следовательно, $\mu_n = \inf\{\lambda \mid \lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H)\}$. Заметим далее, что, вообще говоря, $\mu_{n+1} \geqslant \mu_n$, так как можно выбрать $\varphi_{n+1} = \varphi_n$. Следовательно, $\mu_{n+1} = \mu_n$, ибо, если $\mu_{n+1} > \mu_n$, то $\dim P_{(-\infty, \, ^1/_2\mu_n + ^1/_2\mu_{n+1})} \leqslant n$ в силу (2a), что противоречит предположению $\dim P_{(-\infty, \, \mu_n+\varepsilon)} = \infty$. Наконец, заметим, что если бы строго ниже μ_n лежало n собственных значений и a было бы n-м собственным значением, то выполнялось бы неравенство $\dim P_{(-\infty, \, ^1/_2 a + ^1/_2\mu_n)} \geqslant n$, которое противоречит (2a). Следовательно, справедливо утверждение (b).

Случай 2: $\dim P_{(-\infty, \, \mu_n+\varepsilon_0)} < \infty$ для некоторого $\varepsilon_0 > 0$. Мы утверждаем, что тогда справедливо утверждение (a) теоремы. Поскольку, согласно (2), $\dim P_{(\mu_n-\varepsilon, \, \mu_n+\varepsilon)} \geqslant 1$ для всех ε, то $\mu_n \in \sigma(H)$ по предложению из § VII.3. Однако $\dim P_{(\mu_n-\varepsilon_0, \, \mu_n+\varepsilon_0)} < \infty$, так что $\mu_n \in \sigma_{\text{disc}}(H)$ по определению. Следовательно, μ_n есть собственное значение, и можно найти такое δ, что $(\mu_n - \delta, \, \mu_n + \delta) \cap \sigma(H) = \{\mu_n\}$. Значит, $\dim P_{(-\infty, \, \mu_n]} = \dim P_{(-\infty, \, \mu_n+\delta)} \geqslant n$, так что существуют по крайней мере n собственных значений $E_1 \leqslant \ldots \leqslant E_n \leqslant \mu_n$. Если бы E_n было меньше μ_n, то $\dim P_{(-\infty, \, E_n)}$ равнялась бы n в нарушение (2a). Следовательно, $E_n = \mu_n$, т. е. μ_n есть n-е собственное значение. Это показывает, что справедливо (a). ∎

Существует другая полезная формулировка принципа минимакса, отличающаяся одной технической деталью:

Теорема XIII.2. Если H самосопряжен и ограничен снизу, то

$$\mu_n = \sup_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}} \inf_{\substack{\psi \in [\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}]^\perp \\ \|\psi\| = 1, \; \psi \in Q(H)}} (\psi, H\psi), \tag{3}$$

где $Q(H)$ — область определения формы H.

Доказательство. Обозначим правую часть (3) через $\tilde{\mu}_n$. Следуя доказательству теоремы XIII.1, можно убедиться, что каждое $\tilde{\mu}_n$ удовлетворяет либо условию (a), либо условию (b) теоремы XIII.1. Эти условия определяют μ_n, так что $\tilde{\mu}_n = \mu_n$. ∎

Применения принципа минимакса мы рассмотрим в следующих трех разделах. Пока же сделаем несколько общих замечаний.

(1) Как мы видели в наводящем примере, принцип минимакса — идеальное средство для сравнения собственных значений операторов. Из него можно выводить и количественные, и качественные следствия.

(2) Этот метод может быть полезен для определения места, где начинается σ_{ess}. В частности, как мы увидим, в некоторых случаях он позволяет установить, что σ_{ess} пуст (см. § 4 и 14).

(3) В § 4 и 5 мы докажем, что в некоторых случаях $\sigma_{\text{ess}}(H) = [a, \infty)$ с некоторым определенным a. Допустим, нам, кроме того, известно, что $\mu_n < a$. Тогда мы можем заключить, что H

имеет по крайней мере n собственных значений! Значит, принцип минимакса позволяет в некоторых случаях установить существование дискретного спектра.

Следующее предложение показывает, как применяется принцип минимакса.

Предложение. Пусть $A \geqslant 0$ и B — самосопряженные операторы. Предположим, что $Q(A) \cap Q(B)$ плотно и что B_- — отрицательная часть B — относительно ограничена как форма по отношению к A с нулевой относительной гранью. Пусть $A + \beta B$ при $\beta \geqslant 0$ определяет оператор, отвечающий очевидной сумме форм. Предположим, что $\sigma_{ess}(A+\beta B) = [0, \infty)$ при всех $\beta \geqslant 0$. Тогда $\mu_n(A+\beta B)$ — монотонно невозрастающая функция на $[0, \infty)$.

Доказательство. Поскольку $\mu_n(A+\beta B) \leqslant 0$ при всех n, по предположению о $\sigma_{ess}(A+\beta B)$ имеем

$$\mu_n(A+\beta B) = \max_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}} \min_{\substack{\psi \in Q(A) \cap Q(B) \\ \|\psi\|=1:\ \psi \in [\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}]^\perp}} [\min\{0, (\psi, (A+\beta B)\psi)\}].$$

Так как $A \geqslant 0$, легко видеть, что $\min\{0, (\psi, (A+\beta B)\psi)\}$ монотонно не возрастает с β. ■

Пример. В § 4 мы докажем, что $\sigma_{ess}(-\Delta+\beta V) = [0, \infty)$ для широкого класса операторов V. Предложение показывает, что для таких V отрицательные собственные значения и, в частности, $\inf \sigma(-\Delta+\beta V)$ монотонно убывают одновременно с β, а число отрицательных собственных значений монотонно возрастает.

XIII.2. Связанные состояния операторов Шредингера I: количественные методы

Принцип минимакса оказывается полезным при изучении самых разных аспектов теории точечных спектров. В этом и в следующем разделах мы опишем свойства дискретного спектра операторов вида $-\Delta+V$, т. е. гамильтонианов нерелятивистской квантовой механики. Эти операторы часто называют **операторами Шредингера**, а их собственные векторы, отвечающие точкам дискретного спектра,— **связанными состояниями**. Сами точки дискретного спектра называются **энергиями связанных состояний** (или **энергетическими уровнями**). В этом разделе мы опишем метод Релея — Ритца, позволяющий находить энергии связанных состояний с очень большой точностью. В следующем разделе будут рассмотрены качественные характеристики спектра. Читатель, которого интересует в первую очередь принцип минимакса, должен прочитать этот раздел и первую часть следующего.

Гамильтониан элементарной модели атома гелия есть

$$H = -\Delta_1 - \Delta_2 - \frac{2}{|r_1|} - \frac{2}{|r_2|} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

на $L^2(\mathbb{R}^6)$. Мы пользуемся атомными единицами, т. е. единицами, в которых $\hbar = e^2 = 2\mu_e = 1$, где μ_e — приведенная масса системы электрон — ядро гелия. В отличие от модели атома водорода здесь нельзя точно решить задачу на собственные значения $H\psi = E\psi$. Мы опишем метод нахождения с высокой точностью низшего собственного значения H, объяснив сначала, в чем физическая важность именно этого собственного значения. Тот же метод позволяет приближенно находить и высшие собственные значения.

Энергия, необходимая для ионизации атома гелия, может быть измерена. В простейшей модели эта энергия ионизации есть в точности разность между низшим собственным значением H и энергией основного состояния иона гелия. Последняя в этой модели вычисляется точно, так как она сводится к точно решаемой кулоновой задаче для одного тела. На заре квантовой теории «грубое» (т. е. примерно до 0,01%) согласие этого модельного расчета с измеренной энергией ионизации послужило важным экспериментальным подтверждением квантовой механики.

Если мы хотим сравнивать эксперимент и теорию с большей точностью, то необходимо выбирать более «хитрый» модельный гамильтониан. Поскольку становится существенным спин электрона, приходится в качестве основного гильбертова пространства выбирать $L^2(\mathbb{R}^6) \otimes \mathbb{C}^4$, где $\mathbb{C}^4 = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ описывает спины двух электронов. Мы обозначим $H \otimes I$ через H. Усовершенствованный гамильтониан отличается от гамильтониана H несколькими членами, которые называются поправками. Ниже мы кратко опишем физическое обоснование каждой из этих поправок. Каждой из них соответствует некоторый оператор A_α, так что в усложненной модели гамильтониан имеет вид $H + \sum_{(\alpha)} A_\alpha$. Хотя мы не будем останавливаться на точном виде каждого A_α, заметим, что существуют хорошо обоснованные физические теории, которые приводят к явным операторным поправкам (ссылки на соответствующую литературу см. в Замечаниях). Эти операторные поправки таковы:

(1) *Член **Юза — Эккарта**, описанный в § XI.5.* Изменение в наинизшем собственном значении за счет этой поправки должно быть порядка m_e/m_α, где m_e — масса электрона, а m_α — масса ядра гелия. Это число имеет порядок $1{,}3 \cdot 10^{-4}$.

(2) *Поправки тонкой структуры.* Сюда входят несколько простых релятивистских поправок: **зоммерфельдова поправка** — разность между релятивистской кинетической энергией $\sqrt{(m_e c^2)^2 + (pc)^2} - m_e c^2$ и нерелятивистской кинетической энергией $^1/_2\,(p^2/m_e)$; **спин-орби-**

тальная поправка, возникающая вследствие того, что электрон обладает магнитным моментом, который взаимодействует с магнитным полем, создаваемым током, обусловленным относительным движением ядра и этого электрона; **дарвинова поправка**, которая физически связана с тем, что релятивистский электрон не может быть локализован в областях размера меньше $\hbar/mc$, так что взаимодействие электрона описывается не прямо потенциалом $V(r)$, а его усреднением по сфере радиуса порядка $\hbar/mc$; **запаздывающий член**, связанный с тем, что воздействие второго электрона на первый не есть просто $\text{grad}_1|r_1-r_2|^{-1}$, где r_2 — мгновенное положение второго электрона, но, поскольку скорость света конечна, это воздействие определяется положением электрона в некоторый момент времени в прошлом; **спин-спиновая поправка**, вызванная взаимодействием магнитных моментов электронов. Спин-орбитальные и спин-спиновые поправки можно интерпретировать как релятивистские поправки, поскольку магнитный момент электрона есть релятивистский эффект. Все эти релятивистские поправки имеют порядок $(e^2/\hbar c)^2 \sim 5\cdot 10^{-5}$.

Пусть мы знаем наименьшее собственное значение E гамильтониана H и соответствующую собственную функцию. Поскольку поправочный член $\sum A_\alpha$ нам известен в явном виде, мы можем попытаться оценить сдвиг наименьшего собственного значения, пользуясь низшими порядками теории возмущений. В первом порядке каждый A_α вносит свой отдельный вклад. В высших порядках, разумеется, появляются перекрестные члены, однако по порядку величины они находятся за пределами точности вычислений, которые мы ниже будем обсуждать. Поэтому можно оценить сдвиг E, вызываемый $\sum A_\alpha$, как сумму членов, отвечающих каждому α. Подчеркнем, что обычно A_α берутся в достаточно сингулярном виде, так что теоремы о сходимости из гл. XII к ним неприменимы; фактически даже неизвестно, что $H+\sum\limits_{(\alpha)} A_\alpha$ в существенном самосопряжен! Поэтому проводимые далее вычисления не могут считаться строго обоснованными. Эта трудность может быть частично преодолена заменой δ-образного распределения ядерного заряда распределением класса C^∞, сильно сконцентрированным около начала координат.

В дополнение к этим операторным поправкам считается, что существует сдвиг энергии ионизации благодаря взаимодействиям с квантованным электромагнитным полем. Этот **лембов сдвиг** можно сосчитать в рамках квантовой электродинамики (КЭД). Эта теория не приводит к простым операторным поправкам в H, но она позволяет приближенно рассчитать этот сдвиг, который, по предсказанию, составляет около одной миллионной доли энергии ионизации в простой модели.

Квантовая электродинамика — это теория, внутренняя структура которой не до конца понятна и для проверки которой существует мало опытов. Поэтому физики рассматривают энергию ионизации гелия как некие грубые данные для проверки КЭД. Поскольку лембов сдвиг составляет величину порядка лишь 10^{-6}, экспериментальные данные должны быть получены с высокой точностью; кроме того, остальные вклады в энергию ионизации должны быть *сосчитаны* тоже с большой точностью. Несмотря на сомнения в строгости вычислений по теории возмущений сдвигов, связанных с A_α, физики готовы поверить предсказаниям теории Релея — Шредингера.

Таким образом, главная задача теории состоит в подсчете низшего собственного значения H с точностью до восьмого знака! Можно попробовать начать с точно диагонализуемого оператора $-\Delta_1-2|r_1|^{-1}-\Delta_2-2|r_2|^{-1}$ и считать $|r_1-r_2|^{-1}$ возмущением. Но, как мы видели в § XII.2, член первого порядка ряда теории возмущений отличается от экспериментальных данных на 15%. Поскольку все поправки вносят менее одного процента в сдвиг уровня, то E предположительно должно отличаться от первого порядка теории возмущений более чем на 10%. Поэтому получить численный ответ с точностью до 10^{-8} с помощью теории возмущений практически невозможно. Однако техника, основанная на принципе минимакса, позволяет сосчитать E.

Теорема XIII.3 (метод Релея — Ритца). Пусть H — полуограниченный самосопряженный оператор. Пусть V есть n-мерное подпространство, $V\subset D(H)$ и P — ортогональный проектор на V. Положим $H_V=PHP$. Пусть $\hat\mu_1, \ldots, \hat\mu_n$ — собственные значения $H_V\restriction V$, упорядоченные так, что $\hat\mu_1\leqslant\hat\mu_2\leqslant\ldots\leqslant\hat\mu_n$. Тогда

$$\mu_m(H)\leqslant\hat\mu_m, \quad m=1, \ldots n.$$

В частности, если H имеет собственные значения (с учетом кратностей) $E_1, \ldots, E_k$ на дне спектра причем $E_1\leqslant\ldots\leqslant E_k$, то

$$E_m\leqslant\hat\mu_m, \quad m=1, \ldots, \min(k, n).$$

Доказательство. В силу принципа минимакса, $H_V\restriction V$ имеет следующие собственные значения:

$$\begin{aligned}\hat\mu_m &= \sup_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}\in V}\ \inf_{\substack{\psi\in V:\ \|\psi\|=1\\ \psi\in[\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}]^\perp}} (\psi H\psi) = \\ &= \sup_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}\in \mathscr{H}}\ \inf_{\substack{\psi\in V:\ \|\psi\|=1\\ \psi\in[P\varphi_1, \ldots, P\varphi_{m-1}]^\perp}} (\psi, H\psi) = \\ &= \sup_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}\in \mathscr{H}}\ \inf_{\substack{\psi\in V:\ \|\psi\|=1\\ \psi\in[\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}]^\perp}} (\psi, H\psi) \geqslant \\ &\geqslant \sup_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}\in \mathscr{H}}\ \inf_{\substack{\psi\in D(H):\ \|\psi\|=1\\ \psi\in[\varphi_1, \ldots, \varphi_{m-1}]^\perp}} (\psi, H\psi) = \mu_m(H).\end{aligned}$$

На третьем шаге мы воспользовались тем, что $(\psi, P\varphi) = (\psi, \varphi)$ для $\psi \in V$. ∎

Таким образом, чтобы получить оценки сверху для собственных значений и, в частности, для низшего собственного значения E_1, мы должны выбрать ортонормированный набор $\eta_1, \ldots, \eta_n \in D(H)$ и диагонализовать $n \times n$-матрицу $(\eta_i, H\eta_j)$ с помощью ЭВМ. Прежде чем обсуждать применения этого метода к атому гелия, рассмотрим два естественных и важных вопроса.

(i) Мы выбираем ортонормированный базис $\{\eta_i\}_{i=1}^{\infty}$ и получаем верхнюю границу $\hat{\mu}_1^{(n)}$ величины E_1, диагонализуя $\{(\eta_i, H\eta_j)\}_{1 \leqslant i, j \leqslant n}$. Сходится ли $\hat{\mu}_1^{(n)}$ к E_1, когда $n \to \infty$?

(ii) Есть ли какой-либо способ получить нижнюю оценку собственных значений, с тем чтобы можно было определить точность верхней оценки?

Чтобы ответить на вопрос (i), заметим следующее.

Теорема XIII.4. Пусть $\{\eta_i\}_{i=1}^{\infty}$ — ортонормированный базис в $\mathscr{H}$, причем каждый $\eta_i \in D(H)$, где $D(H)$ — область определения полуограниченного самосопряженного оператора H. Допустим, что $\mu_1(H)$ есть собственное значение E_1 оператора H с нормированным собственным вектором $\psi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \eta_i$. Допустим, что

$$\lim_{N \to \infty} \left(\sum_{i=1}^{N} a_i \eta_i,\ H\left(\sum_{i=1}^{N} a_i \eta_i \right) \right) = \mu_1(H).$$

Тогда $\hat{\mu}_1^{(n)} \to E_1$, где $\hat{\mu}_1^{(n)}$ есть низшее собственное значение $\{(\eta_i, H\eta_j)\}_{1 \leqslant i, j \leqslant n}$.

Доказательство. См. задачу 3.

Важность этой теоремы в том, что сходимость $\left(\sum_{i=1}^{N} a_i \eta_i,\ H\left(\sum_{i=1}^{N} a_i \eta_i \right) \right)$ при $N \to \infty$ к $\mu_1(H) = (\psi, H\psi)$ иногда может быть доказана на основе общих соображений. Например, это справедливо всегда, когда H ограничен, так как в этом случае $\sum_{i=1}^{N} a_i \eta_i \to \psi$ по норме. Метод доказательства в том случае, когда H не ограничен, хорошо иллюстрирует следующий

Пример 1. Допустим, что $H = H_0 + V$, $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + (L^{\infty}(\mathbb{R}^3))_{\varepsilon}$ и что $\mu_1(H) < 0$. Тогда, как известно, $\mu_1(H)$ есть собственное значение (см. § 4), оно невырожденно (см. § 12) и соответствующая собственная функция принадлежит $D(|x|^2)$ (см. § 11).

Так как $\psi \in D(H_0)$, то $\psi \in D(H_0 + x^2) = D(H_0) \cap D(x^2)$. Пусть $\{\varphi_i\}$ — собственные функции трехмерного гармонического осциллятора (см. дополнение к § V.3). Тогда

$$\lim_{N\to\infty}\left(\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i - \psi\right),\ (H_0 + x^2)\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i - \psi\right)\right) = 0.$$

Но $V \in L^2 + L^\infty$, поэтому $|V| \leqslant H_0 + b$ с некоторым b, так что

$$H_0 + |V| \leqslant 2H_0 + b \leqslant 2(H_0 + x^2) + b.$$

Следовательно,

$$\lim_{N\to\infty}\left(\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i - \psi\right),\ (H_0 + V)\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i - \psi\right)\right) = 0,$$

откуда вытекает, что

$$\lim_{N\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i,\ (H_0 + V)\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i\right) = \mu_1.$$

По теореме XIII.4, $\hat{\mu}_1^{(n)} \to \mu_1$.

Пример 2. Пусть $H = p^2 + x^2 + \beta x^4$ в $L^2(\mathbb{R})$ при $\beta > 0$. Пусть φ_i — собственные функции гармонического осциллятора, и пусть ψ — низший собственный вектор H. Положим $\psi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i\varphi_i$. Пользуясь оценками для форм

$$0 \leqslant (p^2 + x^2 + \beta x^4) \leqslant C_1(p^2 + x^2)^2 \leqslant C_2(p^2 + x^2 + \beta x^4)^2,$$

можно показать, что

$$\lim_{N\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i,\ H\sum_{i=1}^{N} a_i\varphi_i\right) = \mu_1(H),$$

так что опять $\hat{\mu}_1^{(n)} \to \mu_1$. Детали мы оставляем читателю в качестве задачи 4.

Заметим, что в действительности нет никакой необходимости считать $\{\eta_i\}_{i=1}^{\infty}$ ортонормированным базисом. В действительности важно лишь, чтобы ψ лежал в пространстве, порожденном набором $\{\eta_i\}_{i=1}^{\infty}$, и чтобы выполнялись условия сходимости в теореме XIII.4. Привлечение симметрии и это замечание часто упрощают вычисления. Так, в рассмотренном выше примере 2 ψ — четная функция x, и потому $\psi = \sum_{i=1}^{\infty} a_{2i-1}\varphi_{2i-1}$ и надо только диагонализовать $\{(\varphi_{2i-1}, H\varphi_{2j-1})\}_{1 \leqslant i,j \leqslant N}$, чтобы оценить $\mu_1(H)$ или любое из $\mu_{2k+1}(H)$.

Второй из указанных выше вопросов интереснее. Есть несколько разных способов отыскания нижних оценок; мы рассмотрим простейший из них, а другие кратко упомянем в Замечаниях.

Теорема XIII.5 (неравенство Темпля). Пусть H — ограниченный снизу самосопряженный оператор. Предположим, что $\mu_1 < \mu_2$ и $(\psi, H\psi) < \breve{\mu}_2$, где $\psi \in D(H)$, $\|\psi\| = 1$ и $\breve{\mu}_2$ — некоторое число, меньшее μ_2. Тогда

$$\mu_1 \geqslant (\psi, H\psi) - \frac{(\psi, H^2\psi) - (\psi, H\psi)^2}{\breve{\mu}_2 - (\psi, H\psi)}.$$

Доказательство. Поскольку μ_1 — дискретное собственное значение и $\sigma(H) \setminus \{\mu_1\} \subset [\breve{\mu}_2, \infty)$, то $(H - \mu_1)(H - \breve{\mu}_2) \geqslant 0$. Следовательно,

$$(\psi, (H - \breve{\mu}_2) H\psi) \geqslant \mu_1 (\psi, (H - \breve{\mu}_2)\psi).$$

По предположению, $(\psi, (H - \breve{\mu}_2)\psi) < 0$, так что

$$\mu_1 \geqslant \frac{\breve{\mu}_2 (\psi, H\psi) - (\psi, H^2\psi)}{\breve{\mu}_2 - (\psi, H\psi)} = (\psi, H\psi) - \frac{(\psi, H^2\psi) - (\psi, H\psi)^2}{\breve{\mu}_2 - (\psi, H\psi)}. \blacksquare$$

Отметим, что нижняя граница для μ_1, даваемая неравенством Темпля, близка к верхней границе, даваемой методом Релея — Ритца, если ψ есть «почти» собственный вектор в том смысле, что $(\psi, (H - \langle H \rangle)^2 \psi)$ мало, где $\langle H \rangle = (\psi, H\psi)$.

Для неравенства Темпля требуется грубая нижняя оценка второго собственного значения. Эта оценка часто может быть найдена следующим образом.

Определение. Пусть A и B — ограниченные снизу самосопряженные операторы. Будем говорить, что $A \leqslant B$, тогда и только тогда, когда $Q(B) \subset Q(A)$ и $(\varphi, A\varphi) \leqslant (\varphi, B\varphi)$ при всех $\varphi \in Q(B)$.

В задаче 1 читатель должен доказать, что если $A \leqslant B$, то $\mu_n(A) \leqslant \mu_n(B)$.

Пример 3. Пусть H — гамильтониан атома гелия, и пусть

$$A = -\Delta_1 - \Delta_2 - \frac{2}{|r_1|} - \frac{2}{|r_2|}.$$

Тогда $A \leqslant H$, так что $\mu_2(H) \geqslant \mu_2(A) = -5/4$.

Применение метода Релея — Ритца к основному состоянию гелия восходит к самому зарождению квантовой теории, когда Хиллераас проделал вручную простые вариационные вычисления Релея—Ритца. Эта работа была нужна в то время для подтверждения элементарной квантовой механики, и достаточно было вычисления с $n = 6$. Появление быстродействующих ЭВМ и нужда в точном вычислении $\mu_1(H)$ для проверки лембова сдвига способствовали проведению гораздо более изощренных вычислений. Киносита проделал вычисления, потребовавшие диагонализации матрицы размера 39×39, а позже Перкерис провел вычисления с 1078 параметрами! Результаты Перкериса приведены в следующей таблице:

Вклад в энергию ионизации (в $см^{-1}$)	
ΔE (чисто кулонова модель)	198 317,374
Сдвиг Юза—Эккарта	—4,785
Релятивистские поправки	—0,562
Лембов сдвиг (теория)	—1,351 $\pm$0,02
Теоретическое значение	198 310,676$\pm$0,02
Экспериментальное значение	198 310,82 $\pm$0,15

Ошибка, указанная для лембова сдвига, отражает неопределенности счета и небольшие расхождения в вычислениях разных авторов. Отметим, что неравенство Темпля в качестве оценки сверху для $\Delta E=E_{\text{ion}}-E_{\text{atom}}$ дает 198 317,866.

Итак, мы видим, что в пределах ошибки эксперимента лембов сдвиг совпадает с экспериментом с точностью до 1%. Эта проверка предсказаний квантовой электродинамики была бы невозможна без точных вычислений низшего собственного значения, которые позволяет проделать метод Релея—Ритца.

XIII.3. Связанные состояния операторов Шредингера II: качественная теория

В этом разделе мы рассмотрим некоторые качественные характеристики $N(V)$—числа связанных состояний оператора $-\Delta+V$ с учетом кратностей. В первой части мы обсудим, конечно или бесконечно число $N(V)$. В следующих частях будут получены оценки величины $N(V)$. Везде используется принцип минимакса, но для нахождения оценок потребуются и другие аналитические методы.

А. Конечен или бесконечен $\sigma_{\text{disc}}(H)$?

Принцип минимакса полезен при доказательстве существования собственных значений и, в частности, для демонстрации того, что в некоторых случаях дискретный спектр H_0+V бесконечен. Мы сначала докажем один результат для двух частиц. Интуитивно кажется, что при наличии бесконечного числа связанных состояний те из них, для которых энергия связи мала, должны быть пространственно растянуты и потому более чувствительны к поведению $V(x)$ при больших x, а не при малых. Поэтому мы ожидаем, что ответ на вопрос, имеет ли H_0+V бесконечное число связанных состояний, зависит от поведения V при больших x. Мы увидим, что пограничное поведение отвечает функции $|x|^{-2}$. Доказательство будет опираться помимо принципа минимакса на следующие три факта: (1) лемму (принцип неопределенности) из § X.2, т. е. неравенство $-\Delta-{}^1/_4r^{-2}\geqslant 0$; (2) соотношение $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0, \infty)$ для $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$, где R обозначает класс Рольника (мы докажем его в следующем разделе); (3) то, что $-\Delta+V$ имеет лишь конечное число связанных состояний, если $V\in R$ (это будет доказано ниже в части С).

Теорема XIII.6. Рассмотрим оператор $-\Delta+V$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$.

(a) Предположим, что $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$ и что V удовлетворяет условию

$$V(x)\leqslant -ar^{-2+\varepsilon}, \quad \text{если } r\equiv|x|>R_0,$$

с некоторым R_0 и некоторыми $a>0$, $\varepsilon>0$. Тогда $\sigma_{\text{disc}}(-\Delta+V)$ бесконечен.

(b) Предположим, что $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$ и что V удовлетворяет условию

$$V(x)\geqslant -{}^1/_4br^{-2}, \quad \text{если } r>R_0,$$

с некоторым R_0 и некоторым $b<1$. Тогда $\sigma_{\text{disc}}(-\Delta+V)$ конечен.

Доказательство. (a) Так как $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0, \infty)$, достаточно показать, что $\mu_n<0$ при каждом n. Выберем неотрицательную C^∞-функцию ψ с носителем в $\{x\mid 1<|x|<2\}$ и нормой $\|\psi\|=1$. Пусть $\psi_R(x)=R^{-3/2}\psi(xR^{-1})$, так что $\|\psi_R\|=1$ и $\operatorname{supp}\psi_R\subset\{x\mid R<r<2R\}$. Если $R>R_0$, то заключаем, что

$$\begin{aligned}(\psi_R, H\psi_R)&=(\psi_R, -\Delta\psi_R)+(\psi_R, V\psi_R)\leqslant\\ &\leqslant(\psi_R, -\Delta\psi_R)-a(\psi_R, r^{-2+\varepsilon}\psi_R)=\\ &=R^{-2}(\psi, -\Delta\psi)-aR^{-2+\varepsilon}(\psi, r^{-2+\varepsilon}\psi).\end{aligned}$$

Так как $\varepsilon>0$, последнее выражение при больших R отрицательно. Значит, можно найти такое Q, что $(\psi_R, H\psi_R)<0$, если $R>Q$. Положим теперь $\varphi_n=\psi_{2^nQ}$, $n=1, 2, \ldots$. Векторы φ_n ортонормальны и $(\varphi_n, H\varphi_m)=0$, если $n\neq m$, так как φ_n и φ_m имеют непересекающиеся носители, если $n\neq m$. Поэтому, полагая (при данном N) $V_N=\operatorname{span}\{\varphi_1, \ldots, \varphi_N\}$, мы видим, что $P_NHP_N\restriction V_N$ имеет собственные значения $\{(\varphi_n, H\varphi_n)\}_{n=1}^N$. В силу принципа Релея—Ритца

$$\mu_N(H)\leqslant\sup_{1\leqslant m\leqslant N}\{(\varphi_m, H\varphi_m)\}<0.$$

Так как N произвольно и $\sigma_{\text{ess}}=[0, \infty)$, то $-\Delta+V$ имеет бесконечно много собственных значений.

(b) Пусть $W = V + {}^1/_4 br^{-2}$. Тогда в смысле форм на $Q(H_0)$

$$-\Delta + V = -(1-b)\Delta + W + b(-\Delta - {}^1/_4 r^{-2}) \geqslant$$
$$\geqslant -(1-b)\Delta + W \geqslant -(1-b)\Delta + \tilde{W},$$

где $\tilde{W} = \min(W, 0)$. Следовательно, по принципу минимакса $\mu_n(-\Delta+V) \geqslant \mu_n(-(1-b)\Delta + \tilde{W}) = (1-b)\mu_n(-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W})$. По предположению, $\tilde{W}$ обладает компактным носителем и принадлежит $R + (L^\infty)_\varepsilon$. Простое упражнение (задача 70 к гл. XI) показывает, что если потенциал из $R + (L^\infty)_\varepsilon$ имеет компактный носитель, то он принадлежит R. Следовательно, $-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W}$ имеет лишь конечное число связанных состояний, так что $\mu_n(-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W}) = 0$ при $n \geqslant N_0$ для некоторого N_0. Значит,

$$0 \geqslant \mu_n(-\Delta+V) \geqslant (1-b)\mu_n(-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W}) = 0,$$

если $n \geqslant N_0$. Следовательно, $-\Delta + V$ имеет не более N_0 собственных значений в $(-\infty, 0)$. ∎

Возвращаясь к этому доказательству, можно понять, почему именно r^{-2} характеризует критическое пограничное поведение потенциала. При масштабном преобразовании $\psi \mapsto \psi_R$ оператор $-\Delta$ преобразуется как однородная функция степени -2. Стало быть, если степень однородности V на больших расстояниях равна $-2+\varepsilon$, то он пересиливает; если же она равна $-2-\varepsilon$, пересиливает кинетическая энергия и состояния с большими расстояниями между составляющими их частицами не могут иметь отрицательных энергий.

Для систем из N частиц положение более сложное и зависит уже не только от поведения V на больших расстояниях. Например, существует система из трех частиц с парными потенциалами: $V = V_{01}(r_1) + V_{02}(r_2) + V_{12}(r_1 - r_2)$, такая, что число $N(\lambda)$ связанных состояний гамильтониана $H_\lambda = -\Delta_1 - \Delta_2 + \lambda V$ ведет себя следующим образом. При $\lambda = 0$ оно равно 0; затем, когда λ возрастает от нуля, $N(\lambda)$ тоже растет, становясь равным $1, 2, \ldots$, пока вдруг при $\lambda = \lambda_1$ оно не становится бесконечным: $N(\lambda) = \infty$. При дальнейшем возрастании λ появляется следующее критическое значение λ_2: $N(\lambda) = \infty$ при $\lambda_1 \leqslant \lambda \leqslant \lambda_2$. Затем появляются новые критические значения $\lambda_3, \lambda_4, \ldots$, так что в результате $N(\lambda) = \infty$, если $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \cup [\lambda_3, \lambda_4] \cup [\lambda_5, \lambda_6] \cup \ldots$, и $N(\lambda) < \infty$, если $\lambda \in [0, \lambda_1) \cup (\lambda_2, \lambda_3) \cup (\lambda_4, \lambda_5) \cup \ldots$. Ссылки, касающиеся этого примера, можно найти в Замечаниях.

Усложняющее обстоятельство в системах N частиц состоит в том, что их существенный спектр есть $[\Sigma, \infty)$, где, возможно, $\Sigma < 0$ (см. § 5). Так, в указанном выше примере $\mu_n(H_{\lambda_2}) < \Sigma_{\lambda_2}$ при всех n. Когда λ, возрастая, проходит λ_2, $\mu_n(H_\lambda)$ убывает и становится меньше $\mu_n(H_{\lambda_2})$; но Σ_λ тоже убывает и может обогнать $\mu_n(H_\lambda)$, так что $\mu_n(H_\lambda)=\Sigma_\lambda$ при $\lambda>\lambda_2$ для больших n.

Рассмотрим гамильтониан атома гелия. Эвристически состояния существенного спектра не обязаны быть связанными, и потому должны описывать конфигурации частиц, находящихся вдали друг от друга. Например, первый электрон остается связанным, а второй удаляется на ∞. Спектр энергии этих состояний начинается от -1 — энергии основного состояния оператора $-\Delta_1-2|r_1|^{-1}$. Рассматривая другие возможности, мы видим, что с физической точки зрения следует ожидать, что $\sigma_{\rm ess}(H)=[-1,\infty)$. И в самом деле, мы докажем это в § 5. Зная это, можно показать, как применяется принцип минимакса в многочастичном случае:

Предложение (Като).

$$H=-\Delta_1-2|r_1|^{-1}-\Delta_2-2|r_2|^{-1}+|r_1-r_2|^{-1}$$

имеет бесконечный дискретный спектр.

Доказательство. Мы должны установить только, что $\mu_n(H)<-1$ при всех n, поскольку $\sigma_{\rm ess}(H)=[-1,\infty)$. По методу Релея — Ритца следует лишь найти для каждого n некоторое n-мерное пространство V_n со свойством $\sup(\psi, H\psi)<-\|\psi\|^2$ для всех $\psi\in V_n$. Интуитивно кажется, что для построения V_n нужно поместить первый электрон в его основное состояние, а второй электрон брать в другом подходящем состоянии. Пусть $\psi_1(r_1)$ — нормированное основное состояние оператора $-\Delta_1-2|r_1|^{-1}$, т. е. $(-\Delta_1-2|r_1|^{-1})\psi_1=-\psi_1$, и пусть $\varphi_n(r_2)$ — нормированная n-я собственная функция оператора $-\Delta_2-|r_2|^{-1}$, т. е. $(-\Delta_2-|r_2|^{-1})\varphi_n=E_n\varphi_n$, где $E_1, E_2, \ldots=-{}^1/_4, -{}^1/_{16}, -{}^1/_{16}, \ldots$, причем значение $-(4n^2)^{-1}$ повторяется n^2 раз. Пусть, далее, $\psi=\sum_{i=1}^n \alpha_i\psi_1(r_1)\varphi_i(r_2)$, причем $\sum_{i=1}^n|\alpha_i|^2=1$. Тогда $(\psi, H\psi)=t_1+t_2+t_3$, где

$$t_1=(\psi, (-\Delta_1-2|r_1|^{-1})\psi)=(\psi, -\psi)=-1,$$

$$t_2=(\psi, (-\Delta_2-|r_2|^{-1})\psi)=\sum_{i=1}^n|\alpha_i|^2E_i\leqslant E_n,$$

$$t_3=(\psi, (|r_1-r_2|^{-1}-|r_2|^{-1})\psi)\leqslant 0.$$

Последнее неравенство $t_3\leqslant 0$ следует из того, что $\psi_1(r_1)$ сферически симметрична, и потому

$$\int|r_1-r_2|^{-1}|\psi_1(r_1)|^2dr_1=\int\min\{|r_1|^{-1}, |r_2|^{-1}\}|\psi_1(r_1)|^2dr_1\leqslant$$
$$\leqslant|r_2|^{-1}.$$

Таким образом, положив $V_n = \operatorname{span}\{\psi_1\varphi_1, \ldots, \psi_1\varphi_n\}$, мы видим, что

$$(\psi, H\psi) \leqslant -1 + E_n,$$

если $\psi \in V_n$. Следовательно, $\mu_n(H) \leqslant -1 + E_n < -1$. Это показывает, что $\sigma_{\mathrm{disc}}(H)$ есть бесконечное множество. ∎

Эта аргументация была обобщена в разных направлениях. Вот один из типичных результатов:

Теорема XIII.7 (Жислин). Пусть H — гамильтониан атома — имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{\Delta_i}{2\mu_i} - \frac{n}{|r_i|}\right) + \sum_{i<j}\left(\frac{\nabla_i \cdot \nabla_j}{M} + \frac{1}{|r_i - r_j|}\right)$$

и рассматривается как оператор в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, где M и $\{\mu_i\}_{i=1}^n$ — произвольные положительные числа. Тогда $\sigma_{\mathrm{disc}}(H)$ бесконечен.

Такой вид приобретает гамильтониан системы, состоящей из ядра с массой M и n электронов с массами $\mu_1, \ldots, \mu_n$, после отделения движения центра масс.

В. Оценки $N(V)$ в центрально-симметричном случае

Напомним, что **центрально-симметричный** (или **центральный**) **потенциал** — это вещественнозначная функция, зависящая только от $r = |x|$. В этом случае, если E — собственное значение оператора $H = -\Delta + V$, то $\{\psi \mid H\psi = E\psi\}$ есть подпространство $L^2(\mathbb{R}^3)$, инвариантное относительно вращений, и потому оно порождается функциями вида $\psi(x) = r^{-1} f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где Y_{lm} — сферические гармоники и $\int_0^\infty |f(r)|^2\, dr < \infty$. Квантовое число l называется **угловым моментом** функции ψ. Если $\psi \in D(H_0)$, то она ограничена и непрерывна, поэтому $f(r)$ непрерывна и $f(0) = 0$. Далее, f удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right) f(r) = Ef(r), \tag{4}$$

причем (4) выполняется в смысле дифференциального оператора на $L^2(0, \infty)$ с граничным условием $f(0) = 0$, а не в смысле классического дифференциального уравнения. Чтобы избежать связанных с этим трудностей, мы будем предполагать, что V принадлежит классу C^∞ и имеет компактный носитель. Тогда из теоремы о регулярности решения эллиптических уравнений следует, что решения (4) тоже принадлежат C^∞. Как отказаться от условия принадлежности C_0^∞, мы увидим позднее, когда перейдем к различным оценкам. С другой стороны, можно исходить из аппарата функций Йоста, изложенного в § XI.8, и допустить V достаточно общего вида.

Для каждого целого l и $E \leqslant 0$ пусть $u_l(r; E)$ — решение уравнения (4), удовлетворяющее условиям $u_l(0; E) = 0$ и $\lim\limits_{r \downarrow 0} r^{-l-1} u_l(r; E) = 1$. Существование и единственность таких решений в случае $V \in C_0^\infty$ довольно очевидны (см. § XI.8). Нас интересует число уровней $E < 0$, для которых $u_l(r; E)$ квадратично интегрируема. Оно в точности равно $n_l(V)$ — «числу» дискретных связанных состояний оператора $-\Delta + V$ с угловым моментом l, в том смысле, что при фиксированных l и m это число дискретных связанных состояний вида $r^{-1} f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Так как m может быть равно $-l, -l+1, \ldots, l$, это означает, что есть $(2l+1) n_l(V)$ дискретных собственных функций с угловым моментом l, так что $N(V) = \sum\limits_l (2l+1) n_l(V)$. Существует классическая теорема о $n_l(V)$:

Теорема XIII.8. Предположим, что $V \in C_0^\infty(0, \infty)$, и пусть $N_l(E; V)$ есть число нулей функции $u_l(r; E)$, отличных от нуля в $r = 0$. Тогда:

(a) Если $E < 0$, то $N_l(E; V) < \infty$.

(b) $N_l(E; V)$ есть монотонно возрастающая функция E и монотонно убывающая функция l.

(c) Если $E_0 \leqslant 0$, то $N_l(E_0; V)$ совпадает с числом квадратично интегрируемых решений уравнения (4) с $E < E_0$. В частности,

$$n_l(V) = N_l(0; V) \quad \text{и} \quad \dim P_{(-\infty, E)} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) N_l(E; V) \quad \text{с } E \leqslant 0,$$

где $\{P_\Omega\}$ — спектральные проекторы оператора $-\Delta + V(|x|)$.

Мы докажем эту теорему с помощью последовательности лемм. В то время как классическое доказательство опирается на понятия теории дифференциальных уравнений, нам удается по большей части избежать этого аппарата, привлекая несколько раз принцип минимакса. Прежде чем перейти к доказательству, поясним, почему между N_l и n_l должна существовать связь. Допустим, что E настолько отрицательно, что разность $E - V$ всюду отрицательна. В силу дифференциального уравнения, u и u'' имеют одинаковый знак. Поэтому, если u и u' вначале положительны, они и останутся положительными. Таким образом, $N_l(E; V) = 0$, если E «очень отрицательно». Мы увидим, что, когда E убывает от $E = 0$, нули $u_l(r; E)$ двигаются в направлении больших r и исчезают, уходя к $r = \infty$. Так как $N_l(E; V) = 0$ для очень отрицательных E, то $N_l(0; V)$ есть число тех нулей, которые ушли на бесконечность. Суть в том, что те энергии, при которых нули уходят на бесконечность, это, интуитивно, как раз те самые энергии, для которых $\lim_{r\to\infty} u_l(r; E)=0$. Так как V имеет компактный носитель, то $u_l(r; E)\sim a\exp(-\sqrt{-E}r)+ +b\exp(+\sqrt{-E}r)$ при больших r. Если

$$\lim_{r\to\infty} u_l(r; E)=0,$$

то $u_l(r; E)\sim a\exp(-\sqrt{-E}r)$ при больших r, так что u_l квадратично интегрируема. Поэтому число собственных значений должно быть равно числу нулей.

Лемма 1. Пусть $E_0\leqslant 0$. Если $N_l(E_0; V)\geqslant m_0$, то (4) имеет по меньшей мере m_0 квадратично интегрируемых решений с $E<E_0$. В частности, поскольку $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0, \infty)$, то $N_l(E_0; V)<\infty$, если $E_0<0$.

Доказательство. Пусть

$$H_l=-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)$$

— оператор на $L^2(0, \infty)$. Этот оператор самосопряжен в существенном на области определения $\{u \mid u\in C_0^\infty[0, \infty),\ u(0)=0\}$, если $l=0$ и на $\{u \mid u\in C_0^\infty(0, \infty)\}$, если $l\neq 0$ (задача 16). Мы покажем сначала, что если $N_l(E_0; V)\geqslant m_0$, то $\mu_{m_0}(H_l)\leqslant E_0$. В самом деле, пусть $r_0=0<r_1<r_2<\ldots<r_{m_0}<\infty$ суть нули $u_l(r; E_0)$. Определим ψ_i, полагая

$$\psi_i(r)=\begin{cases} u_l(r; E_0) & \text{при } r_{i-1}\leqslant r\leqslant r_i, \\ 0 & \text{в противном случае.}\end{cases}$$

Тогда ψ_i непрерывны и кусочно принадлежат C^1. Хотя $\psi_i\notin \notin D(-d^2/dr^2)$, но она принадлежит $Q(-d^2/dr^2)$, а значит, и $Q(H_l)$ (см. задачу 17). Более того,

$$\begin{aligned}\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i,\ H_l\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right)&=\left(\frac{d}{dr}\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right),\ \frac{d}{dr}\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right)\right)+\\ &\qquad+\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i,\ \left(\frac{l(l+1)}{r^2}+V\right)\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right)=\\ &=\sum_{i=1}^{m_0}|a_i|^2\int_{r_{i-1}}^{r_i}\left[|\psi_i'|^2+\left(\frac{l(l+1)}{r^2}+V\right)|\psi_i|^2\right]dr=\\ &=\sum_{i=1}^{m_0}|a_i|^2\int_{r_{i-1}}^{r_i}\bar{\psi}_i\left[-\psi_i''+\left(\frac{l(l+1)}{r^2}+V\right)\psi_i\right]dr=\\ &=E_0\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i,\ \sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right).\end{aligned}$$

Таким образом, мы имеем m_0-мерное подпространство в $Q(H_l)$, на котором среднее значение H_l меньше или равно E_0, так что $\mu_{m_0}(H_l) \leqslant E_0$ согласно теореме XIII.2.

Затем мы замечаем, что если $E_n \to E_\infty$, то $u_l(r; E_n)$ сходится к $u_l(r; E_\infty)$ равномерно на компактных подмножествах из $[0, \infty)$. Это следствие непрерывной зависимости решений обыкновенного дифференциального уравнения от коэффициентов. Значит, $u_l(r; E_0 - 1/n)$ равномерно сходится на компактах к $u_l(r; E_0)$. Отсюда следует, что если $u_l(r; E_0)$ имеет по меньшей мере m_0 нулей, то $u_l(r; E_0 - 1/n)$ при некотором n имеет по меньшей мере m_0 нулей, так что $\mu_{m_0}(H_l) \leqslant E_0 - 1/n < E_0$. Так как $\sigma_{\text{ess}}(H_l) \subset \sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, \infty)$, то утверждение леммы следует из принципа минимакса. ∎

Лемма 2 (осцилляционная теорема Штурма). $N_l(E; V)$ есть монотонно возрастающая функция E. Если $E_0 < 0$ — собственное значение H_l, то $N_l(E; V) \geqslant N_l(E_0; V) + 1$ при $E > E_0$.

Доказательство. Пусть $V_l = l(l+1)r^{-2} + V$, и пусть $r_0 = 0 < r_1 < \ldots < r_n < \infty$ суть нули $u_l(r; E_0)$. Пусть $E > E_0$. Мы покажем, что $u_l(r; E)$ имеет по меньшей мере по одному нулю в каждом из интервалов $(0, r_1)$, (r_1, r_2), ..., (r_{n-1}, r_n), а если E_0 есть собственное значение, то также и в интервале (r_n, ∞). Действительно, допустим, что $u_l(r; E)$ не имеет нуля в интервале (r_i, r_{i+1}). Заменяя, если надо, u_l на $-u_l$, мы можем предположить, что и $u_l(r; E)$ и $u_l(r; E_0)$ неотрицательны в (r_i, r_{i+1}). В частности, $u_l'(r_i; E_0) \geqslant 0$ и $u_l'(r_{i+1}; E_0) \leqslant 0$. Вычислим

$$I = \int_{r_i}^{r_{i+1}} [u_l'(r; E_0)\, u_l(r; E) - u_l(r; E_0)\, u_l'(r; E)]'\, dr.$$

С одной стороны,

$$\begin{aligned} I &= [u_l'(r; E_0)\, u_l(r; E) - u_l(r; E_0)\, u_l'(r; E)]\Big|_{r_i}^{r_{i+1}} = \\ &= u_l'(r_{i+1}; E_0)\, u_l(r_{i+1}; E) - u_l(r_i; E_0)\, u_l'(r_i; E) \leqslant 0. \end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} I &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} [u_l''(r; E_0)\, u_l(r; E) - u_l(r; E_0)\, u_l''(r; E)]\, dr = \\ &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} u_l(r; E_0)\, u_l(r; E)\, [(V_l - E_0) - (V_l - E)]\, dr = \\ &= (E - E_0) \int_{r_i}^{r_{i+1}} u_l(r; E_0)\, u_l(r; E)\, dr > 0. \end{aligned}$$

Полученное противоречие доказывает, что $u_l(r; E)$ обязана иметь нуль в (r_i, r_{i+1}). Допустим теперь, что E_0 есть собственное значение и $l=0$. Так как V имеет компактный носитель, то $u_0(r; E_0) = a\exp(-\sqrt{-E_0}r)$ при больших r и $|u_0(r; E)| + |u_0'(r; E)| \leqslant b\exp(+\sqrt{-E}r)$ при больших r. Следовательно, I и остальные интегралы, которые мы выписали, сходятся, если заменить r_{i+1} на ∞, а r_i на r_n. Значит, в силу тех же аргументов, $u_0(r; E)$ имеет нуль в (r_n, ∞). Подобное рассуждение справедливо и для общего l, если мы заменим экспоненту подходящими функциями Бесселя. Таким образом, лемма справедлива. ∎

Лемма 3. $N_l(\mu_n(H_l); V) = n-1$, если $\mu_n(H_l) < 0$.

Доказательство. Если $N_l(\mu_n(H_l); V) > n-1$, по то лемме 1 в $(-\infty, \mu_n)$ лежат по крайней мере n собственных значений, так что $N_l(\mu_n(H_l); V) \leqslant n-1$ в силу принципа минимакса. С другой стороны, докажем по индукции, что $N_l(\mu_n(H_l); V) \geqslant n-1$. Очевидно, что $N_l(\mu_1(H_l)) \geqslant 0$. Допустим, что $\mu_n < 0$ и $N_l(\mu_{n-1}(H_l)) \geqslant n-2$. Так как $\mu_{n-1} \leqslant \mu_n < 0$, μ_{n-1} — собственное значение и μ_n тоже собственное значение, то $\mu_n > \mu_{n-1}$, ибо уравнение (4) может иметь не более одного решения с $f(0)=0$. Следовательно, по лемме 2

$$N_l(\mu_n(H_l)) \geqslant N_l(\mu_{n-1}(H_l)) + 1 = n-1. \quad ∎$$

Теперь мы готовы к доказательству теоремы.

Доказательство теоремы XIII.8. Мы доказали уже пункт (а) и то, что $N_l(E; V)$ монотонно по E. С одной стороны, по лемме 1 число связанных состояний с энергией $<E$ не меньше $N_l(E; V)$. Допустим, с другой стороны, что оно больше $N_l(E; V)$. Если $E=0$ и $N_l=\infty$, то это невозможно, поэтому предположим, что $N_l(E; V) = n < \infty$. Мы предполагаем, что существует $n+1$ собственных значений ниже E, так что $\mu_{n+1}(H_l) < E$. Но $N_l(\mu_{n+1}(H_l)) = n$ и μ_{n+1} есть собственное значение, так что, по лемме 2, $N_l(E; V) \geqslant n+1$. Это противоречие доказывает, что $N_l(E; V)$ есть число собственных значений H_l в $(-\infty, E)$. Так как $H_{l+1} \geqslant H_l$, то мы заключаем, что $N_l(E; V) \geqslant N_{l+1}(E; V)$. ∎

С помощью теоремы XIII.8 можно вывести большое число оценок для $n_l(V)$ и $l_{\max}(V) = \max\{l \mid n_l(V) > 0\}$ — наибольшего углового момента, для которого существуют связанные состояния.

Теорема XIII.9. Пусть V — центрально-симметричный потенциал и $V \in R + L^\infty(\mathbb{R}^3)_\varepsilon$. Тогда:

(a) (оценка Баргмана)

$$n_l(V) \leqslant (2l+1)^{-1} \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr;$$

(b) (оценка Калоджеро) если V монотонно убывает и отрицателен, то

$$n_l(V) \leqslant \frac{2}{\pi} \int_0^\infty |V(r)|^{1/2}\,dr;$$

(c) (оценка ГМГТ) для любого $p \geqslant 1$

$$n_l(V) \leqslant c_p (2l+1)^{-(2p-1)} \int_0^\infty r^{2p-1} |V(r)|^p\,dr,$$

где $c_p = (p-1)^{p-1}\,\Gamma(2p)/p^p\,\Gamma(p)^2$, а Γ — гамма-функция Эйлера;

(d) если $\int_0^\infty |V(r)|^{1/2}\,dr < \infty$ и $V(r) < 0$ на некотором открытом множестве, то для каждого l существуют такие Λ, a и b, что $0 < a < b < \infty$ и при $\lambda > \Lambda$

$$a\lambda^{1/2} \leqslant n_l(\lambda V) \leqslant b\lambda^{1/2};$$

(e) если $\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr < \infty$ и $V(r) < 0$ на некотором открытом множестве, то существуют такие c, d и Λ, что $0 < c < d < \infty$ и при $\lambda > \Lambda$

$$c\lambda^{1/2} \leqslant l_{\max}(\lambda V) \leqslant d\lambda^{1/2}.$$

Доказательство. Мы выведем лишь оценку Баргмана, причем для случая $l = 0$ (по поводу остальных доказательств см. задачу 19 и литературные указания в Замечаниях). Отметим прежде всего, что нужную оценку достаточно доказать при $V \leqslant 0$. В самом деле, пусть V произвольно, и пусть $V_- = \min\{V, 0\}$. Тогда, по принципу минимакса, $n_l(V_-) \geqslant n_l(V)$, так как $-\Delta + V_- \leqslant -\Delta + V$. Следовательно, если мы знаем, что $n_0(V_-) \leqslant \int_0^\infty r\,|V_-(r)|\,dr$, то можем заключить, что

$$n_0(V) \leqslant n_0(V_-) \leqslant \int_0^\infty r\,|V_-(r)|\,dr \leqslant \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr. \tag{5}$$

Заметим далее, что достаточно доказать это предложение для неположительного $V \in C_0^\infty$, так как произвольный $V \in R + (L^\infty)_\varepsilon$, для которого $V \leqslant 0$ и $\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr < \infty$, может быть аппроксимирован неположительным $V_n \in C_0^\infty$ таким образом, что $\int_0^\infty r\,|V_n(r)|\,dr \uparrow$ $\uparrow \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr$ и $V_n - V \to 0$ в $R + L^\infty$. Так как $V_n - V \to 0$ в $R + L^\infty$, то $-\Delta + V_n \to -\Delta + V$ в равномерном резольвентном смысле. Таким образом, $P^{(n)}_{(-\infty,\,E)} \to P_{(-\infty,\,E)}$ при любом $E < 0$, не являющемся собственным значением $-\Delta + V$. Вводя $P^{(l)}$ — проектор на состояния с угловым моментом l, мы заключаем, что

$$\lim_{E \uparrow 0} \operatorname{Tr}\left[P^{(n)}_{(-\infty,\,E)} P^{(l)}\right] = (2l+1)\, n_l(V_n),$$

где левая часть монотонно сходится и

$$\lim_{E \uparrow 0} \operatorname{Tr}\left[P_{(-\infty,\,E)} P^{(l)}\right] = (2l+1)\, n_l(V_n).$$

Если мы знаем, что $n_0(V_n) \leqslant \int_0^\infty r\,|V_n(r)|\,dr$, то можем заключить, что

$$n_0(V) = \lim_{E \uparrow 0} \operatorname{Tr}\left[P_{(-\infty,\,E)} P^{(0)}\right] \leqslant \sup_{n,\,E<0} \operatorname{Tr}\left[P^{(n)}_{(-\infty,\,E)} P^{(0)}\right] \leqslant$$
$$\leqslant \sup_n n_0(V_n) \leqslant \sup_n \int_0^\infty r\,|V_n(r)|\,dr = \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr.$$

Именно эти рассуждения позволяют нам ограничиться $V \in C_0^\infty$ в теореме XIII.8. Итак, мы предполагаем, что $V \in C_0^\infty$ и $V \leqslant 0$.

Пусть u — решение уравнения $-u'' + Vu = 0$ с $u(0) = 0$. Определим

$$a(r) = \frac{u(r)}{u'(r)} - r,$$

где $u'(r) \neq 0$. Тогда $u(r) = (a(r) + r)\, u'(r)$, так что

$$\begin{aligned} u'(r) &= (a'(r) + 1)\, u'(r) + (a(r) + r)\, u''(r) = \\ &= u'(r) + a'(r)\, u'(r) + V(r)\,(a(r) + r)\, u(r) = \\ &= u'(r) + a'(r)\, u'(r) + V(r)\,(a(r) + r)^2\, u'(r). \end{aligned}$$

Следовательно, когда $u'(r) \neq 0$, имеем

$$a'(r) = -V(r)\,(a(r) + r)^2, \tag{6}$$

так называемое **уравнение Риккати**. Переход от линейного уравнения второго порядка $-u'' + Vu = 0$ к нелинейному дифферен-

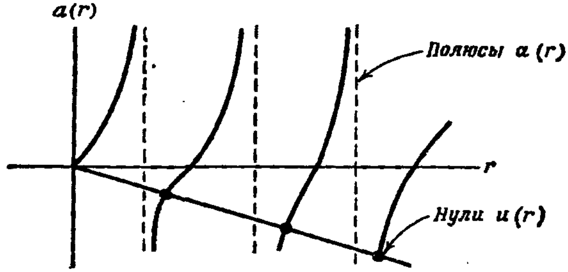


Рис. XIII.1. Функция Риккати $a(r)$.

циальному уравнению первого порядка, подобному (6),— это первый важный элемент доказательства. Ценность таких уравнений в том, что, если отбросить положительные члены, они становятся дифференциальными неравенствами первого порядка. Эти неравенства можно проинтегрировать и получить оценку числа нулей функции $u(r)$.

Так как $V \leqslant 0$, то вследствие (6) a монотонно возрастает и обращается в бесконечность в каждом нуле $u'(r)$. А так как a монотонна, то число полюсов $a(r)$ в точности равно числу нулей $a(r)+r$ (см. рис. XIII.1). По теореме XIII.8 число нулей $u(r)$, равное числу нулей $a(r)+r$, есть в точности $n_0(V)$. Мы воспользовались тем, что u удовлетворяет уравнению второго порядка, так что u и u' не могут одновременно обращаться в нуль в точке $r \neq 0$.

Прием, с помощью которого доказываются обе оценки — Баргмана и Калоджеро, сводится к введению вспомогательной функции от переменной a; для нее записывается соответствующее дифференциальное уравнение, которое затем переделывается в интегрируемое дифференциальное неравенство (см. задачу 18, относящуюся к оценке Калоджеро). Пусть $b(r)=a(r)/r$. Тогда из (6) следует, что

$$b'(r) = -rV(r)(b(r)+1)^2 - r^{-1}b(r).$$

Далее, $b(0)=0$, так как $a(0)=\lim\limits_{r\to 0}(u(r)/u'(r)-r)=0$, и поэтому $\lim\limits_{r\to 0} b(r)=\lim\limits_{r\to 0} a'(r)=0$ в силу (6). Наконец, полюсы $b(r)$ совпадают в точности с полюсами $a(r)$, так что число полюсов b есть $n_0(V)$. Предположим, что b имеет нули $z_1=0<z_2<\ldots<z_n$ и полюсы $p_1<p_2<\ldots<p_n$, причем $z_i<p_i<z_{i+1}$. Тогда $b(r)>0$ в каждом интервале (z_i, p_i), так что $b'(r)\leqslant -rV(r)(b(r)+1)^2$, или

$$-[(1+b(r))^{-1}]' \leqslant -rV(r) = r\,|V(r)|,$$

так как $V \leqslant 0$. Интегрируя от z_i до p_i, получим

$$1 = \int_{z_i}^{p_i} -\frac{d}{dr}\left(\frac{1}{1+b(r)}\right) dr \leqslant \int_{z_i}^{p_i} r\,|V(r)|\,dr.$$

Суммируя далее по i, найдем

$$n_0(V) \leqslant \sum_{i=1}^{n} \int_{z_i}^{p_i} r\,|V(r)|\,dr \leqslant \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr,$$

что и доказывает нужную оценку. ∎

Остается сделать еще несколько замечаний об оценках теоремы XIII.9. Во-первых, то же рассуждение, с помощью которого было получено неравенство (5), приводит к оценкам

$$n_l(V) \leqslant (2l+1)^{-1} \int_0^\infty r\,|V_-(r)|\,dr,$$

$$n_l(V) \leqslant \frac{2}{\pi} \int_0^\infty |V_-(r)|^{1/2}\,dr.$$

Во-вторых, из оценки Баргмана можно получить, что если $\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr < \infty$, то $n_l(V) = 0$ для больших l, так как $n_l(V) = 0$, если оно меньше единицы. Точнее, из оценки Баргмана следует, что

$$l_{\max}(V) \leqslant \frac{1}{2}\left[\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr - 1\right]. \tag{7}$$

Заметим далее, что оценки Баргмана, Калоджеро и (7) суть «наилучшие» в том смысле, что существуют потенциалы, для которых $n_l(V)$ (или $l_{\max}(V)$) принимают любые наперед заданные целые значения, а интегралы в правой части произвольно близки к $n_l(V)$ (или $l_{\max}(V)$). Таким образом, константы $(2l+1)^{-1}$, $2/\pi$ и $1/2$ нельзя заменить никакими меньшими константами. С другой стороны, оценки Баргмана и (7) очень слабы для сильных потенциалов в том смысле, что их правые части растут как λ, когда $\lambda \to \infty$, в то время как $n_l(\lambda V)$ и $l_{\max}(\lambda V)$ растут лишь как $\lambda^{1/2}$. Наконец, еще заметим, что (d) и (e) для ограниченных классов потенциалов могут быть усилены:

$$\lim_{\lambda\to\infty} \frac{n_l(\lambda V)}{\lambda^{1/2}} = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty |V_-(r)|^{1/2}\,dr \tag{8}$$

при любом l;

$$\lim_{\lambda\to\infty}\frac{l_{\max}(\lambda V)}{\lambda^{1/2}}=-\min_r\{r^2V(r)\}$$

и

$$\lim_{\lambda\to\infty}\frac{N(\lambda V)}{\lambda^{3/2}}=\frac{1}{6\pi^2}\int|V_-(r)|^{3/2}d^3r. \tag{9}$$

Мы докажем (8) и (9) при весьма общих предположениях в § 15.

C. Оценки $N(V)$ в общем двухчастичном случае

Обратимся теперь к нахождению оценок $N(V)$ — полного числа связанных состояний — без предположения о центральной симметричности V. Отметим сначала два полезных факта:

Лемма. Пусть H_0 самосопряжен и положителен. Пусть V — ограниченное в смысле форм возмущение H_0 с нулевой относительной гранью. Пусть $H_0+\lambda V$ определен как оператор, возникающий из суммы форм ($\lambda\in\mathbb{R}$). Предположим, что $[0, \infty)\subset\sigma(H_0+\lambda V)$ при всех $\lambda\in\mathbb{R}$. Тогда:

(a) $\mu_n(H_0+\lambda V)$ непрерывна по λ при $\lambda\in\mathbb{R}$;

(b) $\mu_n(H_0+\lambda V)$ монотонно убывает по λ при $\lambda\in[0, \infty)$ и строго монотонна, если μ_n отрицательно.

Эта лемма вытекает из принципа минимакса (задача 25a). В интересном случае, когда $H_0=-\Delta$, $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$, можно воспользоваться также теорией возмущений гл. XII (задача 25b). Здесь R — класс Рольника, определенный в т. 2.

Теорема XIII.10 (оценка Бирмана—Швингера). Пусть $V\in R$. Тогда

$$N(V)\leqslant\left(\frac{1}{4\pi}\right)^2\int\frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2}d^3x\,d^3y.$$

В частности, $N(V)<\infty$.

Доказательство. Как и при доказательстве теоремы XIII.9, достаточно доказать эту оценку, когда V принадлежит C_0^∞ и $V\leqslant 0$. Пусть $E<0$, и пусть $N_E(V)=\dim(\operatorname{Ran}P_{(-\infty,\,E)})$. Для упрощения обозначений будем писать $\mu_n(\lambda)$ вместо $\mu_n(-\Delta+\lambda V)$. Тогда

$$N_E(V)=\#\{n\,|\,\mu_n(1)<E\},$$

где $\#(A)$ — мощность множества A. Так как $\mu_n(\lambda)$ монотонна и непрерывна и $\mu_n(0)=0$, то $\mu_n(1)<E$ тогда и только тогда, когда $\mu_n(\lambda)=E$ для некоторого $0<\lambda<1$, и в этом случае $\mu_n(\lambda)=E$

в точности для одного λ. Следовательно,

$$N_E(V) = \#\{n \mid \mu_n(\lambda) = E \quad \text{для некоторого} \quad \lambda \in (0, 1)\} \leqslant$$
$$\leqslant \sum_{\{\lambda \mid \mu_k(\lambda) = E;\ k = 1, \ldots, N_E(V)\}} \lambda^{-2} \leqslant \sum_{\{\lambda \mid \mu_k(\lambda) = E;\ k = 1, 2, \ldots\}} \lambda^{-2}.$$

Заметим далее, что $(H_0 + \lambda V - E)\psi = 0$ тогда и только тогда, когда (задача 26)

$$\lambda (|V|^{1/2} (H_0 - E)^{-1} |V|^{1/2}) (|V|^{1/2}\psi) = (|V|^{1/2} \psi),$$

а это верно тогда и только тогда, когда уравнение

$$\lambda \int \frac{|V(x)|^{1/2} e^{-\sqrt{-E}\,|x-y|} |V(y)|^{1/2}}{4\pi |x-y|} \varphi(y)\, dy = \varphi(x)$$

имеет ненулевое решение $\varphi \in L^2$. Пусть K — оператор с интегральным ядром $|V(x)|^{1/2} \exp\left(-\sqrt{-E}\,|x-y|\right) |V(y)|^{1/2}/4\pi |x-y|$. Так как $V \in R$, то K — оператор Гильберта — Шмидта, причем он самосопряжен, поскольку его ядро вещественно и симметрично. В результате

$$\sum_{\{\mu \mid \mu - \text{собственное значение } K\}} \mu^2 = \operatorname{Tr}(K^*K) =$$
$$= \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int e^{-2\sqrt{-E}\,|x-y|} \frac{|V(x)|\,|V(y)|}{|x-y|^2}\, dx\, dy.$$

Однако ненулевое μ будет собственным значением K в том и только том случае, если $\mu^{-1}K\varphi = \varphi$ имеет решение, что, в силу предыдущего, верно тогда и только тогда, когда $\mu_n(\lambda) = E$, причем $\lambda = \mu^{-1}$. Следовательно,

$$\sum_{\{\lambda \mid \mu_k(\lambda) = E\}} \lambda^{-2} = \sum_{\{\mu \mid \mu - \text{собственное значение } K\}} \mu^2,$$

так что

$$N_E(V) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int e^{-2\sqrt{-E}\,|x-y|} \frac{|V(x)|\,|V(y)|}{|x-y|^2}\, dx\, dy.$$

Так как $N(V) = \lim\limits_{E \uparrow 0} N_E(V)$, то теорема доказана. ∎

Так же как в центрально-симметричном случае, если мы определим $V_- = \min(V, 0)$, то получим

$$N(V) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int \frac{V_-(x)\, V_-(y)}{|x-y|^2}\, dx\, dy.$$

Заметим еще, что неравенство Бирмана — Швингера можно обобщить так, чтобы включить и связанные состояния с нулевой энергией. т. е. можно доказать (см. задачу 28), что

$$\dim(\operatorname{Ran} P_{(-\infty,\,0]}) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int \frac{|V(x)|\,|V(y)|}{|x-y|^2}\,dx\,dy.$$

Использованный выше метод доказательства можно применить и для доказательства оценки Баргмана.

Одно из следствий оценки Бирмана—Швингера состоит в том, что если $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ то $N(\lambda V)=0$ при достаточно малом λ. Скоро мы увидим, что это справедливо также и при $n>3$. Фактически мы докажем в § 7, что если $V \in L^{1/2n-\varepsilon}(\mathbb{R}^n) \cap L^{1/2n+\varepsilon}(\mathbb{R}^n)$, то $-\Delta+\lambda V$ и $-\Delta$ унитарно эквивалентны при малых λ. Однако если $n=1, 2$, то положение меняется.

Теорема XIII.11. Пусть V—всюду неположительная функция из $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ при $n=1$ или 2, не равная тождественно нулю. Тогда $-\Delta+\lambda V$ имеет отрицательное собственное значение при всех $\lambda>0$.

Доказательство. Как видно из доказательства теоремы XIII.10, достаточно убедиться, что для любого $\lambda>0$ существует такое $\varkappa$, для которого $|V|^{1/2}(-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}$ имеет собственное значение, большее чем λ^{-1}. Так как $|V|^{1/2}(-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}$—компактный оператор (на самом деле даже оператор Гильберта—Шмидта), положительный и самосопряженный. то достаточно доказать, что

$$\lim_{\varkappa^2 \to 0} \| |V|^{1/2}(-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}\| = \infty.$$

Для этого надо только найти такое $\eta \in L^2(\mathbb{R}^n)$, что

$$\lim_{\varkappa^2 \downarrow 0} (|V|^{1/2}\eta,\ (-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}\eta) = \infty.$$

Выберем любое ненулевое η в L^2, такое, что $\varphi(x) \equiv |V(x)|^{1/2} \times \eta(x) \geqslant 0$ и не обращается в нуль почти всюду. Тогда

$$(|V|^{1/2}\eta,\ (-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}\eta) = \int |\hat{\varphi}(p)|^2 (p^2+\varkappa^2)^{-1}\,d^n p.$$

Так как $\hat{\varphi}(p) \neq 0$ вблизи нулевого p и так как $n=1$ или 2, то этот интеграл расходится при $\varkappa^2 \to 0$. ∎

Мы обсудим снова это явление в § 17. Подробнее об этом см. задачи 20—22. В частности, для только что рассмотренного случая можно показать, что оператор $-\Delta+\lambda V$ имеет при малых λ одно отрицательное собственное значение.

Мы уже отмечали, что оценка Баргмана имеет неправильное поведение при больших константах связи в том смысле, что $n_l(\lambda V)$ растет как $c\lambda^{1/2}$, а оценка растет как $c\lambda$. То же самое относится и к оценке Бирмана—Швингера: $N(V)$ растет как $c\lambda^{3/2}$, а граница растет как $c\lambda^2$. Этот дефект исправляется следующим результатом, который особенно интересен в связи с классической картиной фазового пространства, которая будет рассмотрена в § 15.

Теорема XIII.12 (оценка Цвикеля — Либа — Розенблюма). Пусть $n \geqslant 3$, и пусть $N(V)$ — число связанных состояний оператора $-\Delta + V$ на $L^2(\mathbb{R}^n)$. Тогда

$$N(V) \leqslant c_n \int |V_-(x)|^{n/2} d^n x \tag{10}$$

с подходящей константой c_n.

Доказательство. Мы рассмотрим случай $n = 3$, а затем опишем модификации, необходимые для $n \geqslant 4$. Первое замечание состоит в том, что, как и при доказательстве неравенства Бирмана — Швингера, мы можем предположить, что $V \leqslant 0$ и что $V \in C_0^\infty$. Поэтому положим $W = -V \geqslant 0$.

При $E < 0$ пусть $N_E(V)$ есть число собственных значений оператора $-\Delta - W = -\Delta + V$, меньших E. Пусть $H_0 = -\Delta$ и $E = -\varkappa^2$. Утверждается, что

$$N_E(V) \leqslant 2\mathrm{Tr}\,(W[(H_0+\varkappa^2)^{-1} - (H_0 + W + \varkappa^2)^{-1}]). \tag{11}$$

В самом деле, предположим, что φ удовлетворяет равенству $(H_0 - \lambda W)\varphi = E\varphi$; тогда $\psi = W^{1/2}\varphi$ удовлетворяет условиям

$$W^{1/2}(H_0+\varkappa^2)^{-1} W^{1/2}\psi = \lambda^{-1}\psi,$$
$$W^{1/2}(H_0 + W + \varkappa^2)^{-1} W^{1/2}\psi = (1+\lambda)^{-1}\psi,$$

и потому, положив $K = W^{1/2}[(H_0+\varkappa^2)^{-1} - (H_0 + W + \varkappa^2)^{-1}]\, W^{1/2}$, получим

$$K\psi = [\lambda^{-1} - (1+\lambda)^{-1}]\,\psi.$$

Как и при выводе оценки Бирмана — Швингера, мы видим, что $N_E(V)$ — число значений λ в $(0, 1]$, при которых $(H_0 - \lambda W)\varphi = E\varphi$ имеет решение (с учетом кратностей), — ограничено числом собственных значений K, бо́льших $1/2$. Так как K — положительный оператор, это число ограничено величиной $2\mathrm{Tr}\,K$, которую можно получить из (11), пользуясь цикличностью следа.

Воспользовавшись соотношением (X.98), связывающим резольвенты с полугруппами, мы видим, что

$$N_E(V) \leqslant 2\int_0^\infty \mathrm{Tr}\,(W[e^{-tH_0} - e^{-t(H_0+W)}])\, e^{Et}\, dt,$$

где перемена порядка интегрирования и взятия следа может быть обоснована при помощи оценок, которые мы докажем ниже. Мы убедимся также, что $\mathrm{Tr}\,(W[e^{-tH_0} - e^{-t(H_0+W)}])$ положителен, и поскольку $N(V)=\lim\limits_{E\uparrow 0} N_E(V)$, то

$$N(V)\leqslant 2\int\limits_0^\infty \operatorname{Tr}\left(W\left[e^{-tH_0}-e^{-t(H_0+W)}\right]\right)dt \tag{12}$$

в силу теоремы о монотонной сходимости.

Ключевая идея доказательства состоит в том, чтобы представить $e^{-tH_0}-e^{-t(H_0+W)}$ в виде интегрального оператора, воспользовавшись интегралами Винера. Для этого мы должны слегка расширить то рассмотрение интегралов Винера, которое было проведено в § X.11. Сделаем это для произвольного n, а не только для $n=3$. Основу конструкции составляет ядро

$$p(x,\ y;\ t)=(4\pi t)^{-n/2}\,e^{-(x-y)^2/4t}$$

интегрального оператора e^{-tH_0}. В § X.11 мы построили меру μ_x на непрерывных путях ω на $[0,\ \infty)$ с $\omega(0)=x$, такую, что при $0<t_1<\ldots<t_m$

$$\mu_x\{\omega|\,\omega(t_1)\in A_1,\ \ldots,\ \omega(t_m)\in A_m\}=$$
$$=\int\prod_{i=1}^m p(x_{i-1},\ x_i;\ t_i-t_{i-1})\,\chi_{A_i}(x_i)\,d^nx_i,$$

где χ_A — характеристическая функция A и $x_0=x$, $t_0=0$. Вследствие полугруппового свойства μ_x оказывается мерой с полной массой 1. Тем же методом, что в § X.11, можно построить меру $\mu_{x,\,y;\,t}$ на непрерывных путях на $[0,\ t]$ с $\omega(0)=x$, $\omega(t)=y$, так что при $0<t_1<\ldots<t_m<t$

$$\mu_{x,\,y;\,t}\{\omega|\,\omega(t_1)\in A_1,\ \ldots,\ \omega(t_m)\in A_m\}=$$
$$=\int\left(\prod_{i=1}^m p(x_{i-1},\ x_i;\ t_i-t_{i-1})\,\chi_{A_i}(x_i)\right)p(x_m,\ y;\ t-t_m)\,d^nx_i.$$

Эта мера $\mu_{x,\,y;\,t}$ называется **условной мерой Винера.** Она связана с μ_x. Действительно, если $f(\omega)$ есть функция значений, которые путь принимает на интервале $[0,\ t]$, то

$$\int f(\omega)\,d\mu_x=\int dy\left[\int f(\omega)\,d\mu_{x,\,y;\,t}\right],$$

что очевидно для функций от $\omega(t_1),\ \ldots,\ \omega(t_n)$. Полная масса $d\mu_{x,\,y;\,t}$ есть $p(x,\ y;\ t)$.

Смысл условной меры Винера в том, что теперь формула Фейнмана — Каца утверждает, что $e^{-t(H_0+W)}$ есть интегральный оператор с ядром

$$e^{-t(H_0+W)}(x,\ y)=\int d\mu_{x,\,y;\,t}\exp\left(-\int\limits_0^t W(\omega(s))\,ds\right). \tag{13}$$

A priori (13) выполнено лишь почти всюду по x, y; однако если $W \in C_0^\infty$, то нетрудно показать, что правая часть (13) непрерывна по x и по y (см. задачу 29). С помощью основного метода, которым доказывалась формула Фейнмана—Каца, легко показать, что

$$(e^{-s(H_0+W)}We^{-(t-s)(H_0+W)})(x, y) = \\ = \int d\mu_{x, y; t} W(\omega(s)) \exp\left(-\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right).$$

Пользуясь тем, что ядро в правой части этого выражения непрерывно, и тем, что оператор имеет след, можно показать (см. задачу 30), что

$$\operatorname{Tr}(e^{-s(H_0+W)}We^{-(t-s)(H_0+W)}) = \\ = \int dx \int d\mu_{x, x; t} W(\omega(s)) \exp\left(-\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right).$$

Но $\operatorname{Tr}(e^{-s(H_0+W)}We^{-(t-s)(H_0+W)})$ не зависит от s вследствие цикличности следа, так что мы имеем

$$\operatorname{Tr}(We^{-t(H_0+W)}) = \frac{1}{t}\int_0^t \operatorname{Tr}(e^{-s(H_0+W)}We^{-(t-s)(H_0+W)})\, ds = \\ = \frac{1}{t}\int dx \int d\mu_{x, x; t} F\left(\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right), \tag{14}$$

где $F(u) = ue^{-u}$.

Вооружившись формулой (14), мы можем переписать неравенство (12) в виде

$$N(V) \leqslant 2\int_0^\infty dt \int dx \int d\mu_{0, 0; t} t^{-1} G\left(\int_0^t W(x+\omega(s))ds\right), \tag{15}$$

где $G(u) = u(1-e^{-u})$ и где мы воспользовались ковариантностью относительно сдвигов:

$$\int d\mu_{x+a, y+a; t} f(\omega(s)) = \int d\mu_{x, y; t} f(\omega(s)+a).$$

Теперь легко видеть, что G'' положительна на $(0, 2)$ и отрицательна на $(2, \infty)$. Поэтому если функция φ задана посредством

$$\varphi(u) = \begin{cases} u(1-e^{-u}), & 0 < u \leqslant 2, \\ G(2) + (u-2)G'(2), & 2 \leqslant u < \infty, \end{cases}$$

то она удовлетворяет условиям

$$G(u) \leqslant \varphi(u); \tag{16a}$$

$$\varphi(u) \sim \begin{cases} u^2 & \text{при} \quad u=0, \\ u & \text{при} \quad u=\infty; \end{cases} \tag{16b}$$

$$\varphi(u) \text{ выпукла.} \tag{16c}$$

Функция $\varphi(u)$ называется **выпуклой**, если $\varphi(tu+(1-t)v) \leqslant \leqslant t\varphi(u)+(1-t)\varphi(v)$ для u, $v \geqslant 0$, $0 \leqslant t \leqslant 1$. Выпуклость φ следует из того, что $\varphi'' \geqslant 0$. По индукции

$$\varphi\left(\sum_{i=1}^{n} t_i u_i\right) \leqslant \sum_{i=1}^{n} t_i \varphi(u_i),$$

если $\sum t_i = 1$ и u_i, $t_i \geqslant 0$. С помощью простого предельного перехода находим, что

$$\varphi\left(\int f(x)\, d\mu(x)\right) \leqslant \int \varphi(f(x))\, d\mu(x) \tag{17}$$

для любой положительной функции f и меры $d\mu$ с полной массой 1. Вследствие (16a) и (17)

$$G\left(\int_0^t W(x+\omega(s))\, ds\right) \leqslant t^{-1} \int_0^t ds\, \varphi(tW(x+\omega(s))).$$

С помощью теоремы Фубини мы можем теперь вывести из (15), что

$$N(V) \leqslant 2 \int_0^\infty dt\, t^{-2} \int_0^t ds \int d\mu_{0,\,0;\,t} \int dx\, \varphi(tW(x+\omega(s))) =$$

$$= 2 \int_0^\infty dt\, t^{-2} \int_0^t ds \int d\mu_{0,\,0;\,t} \int dx\, \varphi(tW(x)) =$$

$$= 2 \int_0^\infty dt\, (4\pi t)^{-3/2}\, t^{-1} \int dx\, \varphi(tW(x)) = c \int W(x)^{3/2}\, dx,$$

где $c = 2(4\pi)^{-3/2} \int_0^\infty u^{-5/2} \varphi(u)\, du$ конечна вследствие (16b). Первое равенство следует из инвариантности лебеговой меры dx; второе — из того, что подынтегральное выражение не зависит теперь от ω и s и $\int_0^t ds = t$, $\int d\mu_{0,\,0;\,t} = p(0,\ 0;\ t) = (4\pi t)^{-3/2}$; третье — из замены переменных $(t,\ x)$ на $(u,\ x)$, причем $u = tW(x)$.

Итак, результат для $n=3$ доказан. При $n>3$ рассуждение не проходит, так как $\int\limits_0^\infty u^{-5/2}\varphi(u)\,du$ заменяется на $\int\limits_0^\infty u^{-n/2-1}\times$ $\times\varphi(u)\,du$, который расходится при $u=0$. Чтобы преодолеть эту трудность, мы введем следующие изменения. Для каждого m рассмотрим функцию

$$H_m(y)=\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(1+yj)^{-1}.$$

Полезно заметить, что

$$H_m(y)=m!\,y^m/(1+y)(1+2y)\ldots(1+my);$$

это следует из того, что разность этих двух функций есть целая функция y, стремящаяся к нулю на бесконечности. Повторяя рассуждение, которое привело к (11), получим

$$N_B(V)\leqslant(m+1)\operatorname{Tr}\left(W\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(H_0+mW+\varkappa^2)^{-1}\right). \quad (11')$$

При выводе (11′) мы заменили K на

$$K'=W^{1/2}\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(H_0+mW+\varkappa^2)^{-1}W^{1/2}=$$
$$=W^{1/2}(H_0+\varkappa^2)^{-1/2}H_m(W^{1/2}(H_0+\varkappa^2)^{-1}W^{1/2})(H_0+\varkappa^2)^{-1/2}W^{1/2},$$

который положителен вследствие положительности H_m. Далее, $K\psi=(\lambda^{-1}-(1+\lambda)^{-1})\psi$ заменяется на

$$K'\psi=\left(\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(j+\lambda)^{-1}\right)\psi=\lambda^{-1}H_m(\lambda^{-1})\,\psi.$$

Так как

$$H_m(y)=\int\limits_0^\infty e^{-t}(1-e^{-yt})^m\,dt,$$

то $H_m(y)$ монотонна по y. Следовательно, когда λ меняется от 0 до 1, $\lambda^{-1}H_m(\lambda^{-1})$ меняется от ∞ до $H(1)=m!/(m+1)!=$ $=1/(m+1)$, так что (11′) выполняется.

Переписав (11′) таким образом, как мы это сделали, чтобы получить (15), мы придем к неравенству

$$N(V)\leqslant(m+1)\int\limits_0^\infty dt\int dx\int d\mu_{0,0;t}\,t^{-1}G_m\left(\int\limits_0^t W(x+\omega(s))\,ds\right),$$

где $G_m(u)=u(1-e^{-u})^m$. Легко видеть, что G_m'' положительна на $(0,\ y_m)$ и отрицательна на $(y_m,\ \infty)$ при соответствующем выборе y_m, поэтому φ_m, заданная как

$$\varphi_m(u)=\begin{cases} G_m(u), & 0<u\leqslant y_m,\\ G_m(y_m)+(u-y_m)G'(y_m), & y_m\leqslant u<\infty,\end{cases}$$

удовлетворяет условиям

$$G_m(u)\leqslant\varphi_m(u),\quad \varphi_m(u)\sim\begin{cases} u^{m+1} & \text{при}\quad u=0,\\ u & \text{при}\quad u=\infty,\end{cases}\quad \varphi_m(u)\ \text{выпукла.}$$

Тогда находим, что для любых n, m

$$N(V)\leqslant C_{nm}\int W(x)^{m/2}\,d^nx,$$

где $C_{nm}=2(4\pi)^{-n/2}\int\limits_0^\infty u^{-n/2-1}\varphi_m(u)\,du$. До тех пор пока $m>(n/2)-1$, $C_{nm}<\infty$, так что, выбирая соответствующее m, мы убеждаемся в том, что теорема доказана для произвольных $n\geqslant 3$. ∎

Эта теорема может быть доказана также с помощью теоремы XI.22.

XIII.4. Местоположение существенного спектра I: теорема Вейля

В этом и в следующем разделах мы рассмотрим методы определения $\sigma_{\text{ess}}(A)$ для различных операторов A. Сначала мы докажем один общий результат теории возмущений, утверждающий, что $\sigma_{\text{ess}}(A+C)=\sigma_{\text{ess}}(A)$, если C компактен, или, более общо, если он «почти компактен» в смысле, который уточняется ниже. Это позволит нам найти σ_{ess} для двухчастичных операторов Шредингера с исключенным движением центра масс. В следующем разделе мы опишем специальный метод обращения с существенным спектром шредингеровых операторов N частиц.

Нас прежде всего интересует $\sigma_{\text{ess}}(A)$ в случае, когда A самосопряжен, однако в естественной для этих результатов постановке задачи рассматривается общий замкнутый оператор. В § XII.2 был определен $\sigma_{\text{disc}}(A)$, а также σ_{ess} как $\sigma_{\text{ess}}(A)=\sigma(A)\setminus\sigma_{\text{disc}}(A)$. Следует предупредить читателя, что в литературе встречаются и другие определения существенного спектра.

Естественный путь изучения $\sigma_{\text{ess}}(A)$ состоит в рассмотрении $(A-z)^{-1}$ с некоторым $z\notin\sigma(A)$. Для общего самосопряженного оператора надо брать z невещественным, так что мы приходим к необходимости рассматривать несамосопряженные операторы. Если интересоваться только полуограниченными самосопряженными операторами, то можно рассматривать только вещественные z и, таким образом, иметь дело лишь с самосопряженными операторами. В этом случае приводимые ниже доказательства несколько упрощаются.

Результаты этого раздела основаны на применении аналитической теоремы Фредгольма (теорема VI.14). Доказательство окончательного результата содержит некоторые усложняющие моменты, так что сначала мы получим очень специальный случай этого результата:

Предложение. Пусть A и B — два ограниченных самосопряженных оператора с пустыми дискретными спектрами и с компактной разностью $B-A$. Тогда $\sigma_{\text{ess}}(A)=\sigma_{\text{ess}}(B)$.

Доказательство. Запишем $A=B+C$, где C компактен. Положим $F(z)=C(A-z)^{-1}$ для $z\in\mathbb{C}\diagdown\sigma(A)$. Тогда $F(z)$ — аналитическая операторнозначная функция z, всюду компактная, так как C компактен по предположению. Так как A ограничен, то

$$\|F(z)\|\leqslant\|C\|\|(A-z)^{-1}\|\to 0$$

при $z\to\infty$. В частности, $(1-F(z))^{-1}$ существует, если $|z|$ велик. По аналитической теореме Фредгольма, $(1-F(z))^{-1}$ существует при $z\in\mathbb{C}\diagdown(\sigma(A)\cup D)$, где D — дискретное подмножество $\mathbb{C}\diagdown\sigma(A)$. Далее, $(1-F(z))^{-1}$ мероморфна в $\mathbb{C}\diagdown\sigma(A)$ с вычетами конечного ранга в точках из D. Если $z\notin\sigma(A)$, то $B-z=$ $=(1-C(A-z)^{-1})(A-z)$, так что если $1-F(z)$ обратим, то $z\notin\sigma(B)$ и $(B-z)^{-1}=(A-z)^{-1}(1-F(z))^{-1}$. Следовательно, $\sigma(B)\subset$ $\subset D\cup\sigma(A)$. Более того, $(B-z)^{-1}$ имеет вычеты конечного ранга в точках D. Следовательно, точки D принадлежат $\sigma_{\text{disc}}(B)$, так что $\sigma_{\text{ess}}(B)\subset\sigma(A)$. Аналогично, $\sigma_{\text{ess}}(A)\subset\sigma(B)$. По предположению, $\sigma_{\text{ess}}(A)=\sigma(A)$ и $\sigma_{\text{ess}}(B)=\sigma(B)$, откуда мы заключаем, что $\sigma_{\text{ess}}(B)=\sigma_{\text{ess}}(A)$. ∎

Теперь мы хотим обобщить это предложение в разных направлениях. Во-первых, мы допустим неограниченные операторы. Но, самое главное, мы должны отказаться от условия $\sigma_{\text{disc}}(A)=\varnothing$. Для этого нам потребуется усиление аналитической теоремы Фредгольма, которое интересно и само по себе:

Теорема XIII.13 (мероморфная теорема Фредгольма). Пусть Ω — связное открытое подмножество в $\mathbb{C}$. Пусть $A(z)$ — операторнозначная мероморфная функция z, т. е. A аналитична в $\Omega\diagdown D$, где D — дискретное подмножество в Ω (множество, не имеющее предельных точек в Ω), и вблизи каждой точки $z_0\in D$

$$A(z)=A_{-k}(z-z_0)^{-k}+\ldots+A_{-1}(z-z_0)^{-1}+\sum_{n=0}^{\infty}A_n(z-z_0)^n.$$

Кроме того, предположим, что

(1) $A(z)$ компактен, если $z\in\Omega\diagdown D$;

(2) коэффициенты $A_{-k}, \ldots, A_{-1}$ при отрицательных степенях ряда Лорана для $A(z)$ в точках $z_0 \in D$ суть операторы конечного ранга.

Тогда либо

(a) $1 - A(z)$ не обратим ни для какого $z \in \Omega \setminus D$,

либо

(b) найдется дискретное множество $D' \subset \Omega$, такое, что $(1 - A(z))^{-1}$ существует, если $z \notin D \cup D'$, и может быть расширена до такой функции, аналитической в $\Omega \setminus D'$ и мероморфной в Ω, что ее коэффициенты Лорана при отрицательных степенях в точках $z_0 \in D'$ суть операторы конечного ранга.

Доказательство. Это доказательство основано, главным образом, на тех же идеях, что и доказательство теоремы VI.14, так что мы будем постоянно ссылаться на последнее. Как и там, достаточно показать, что каждая точка $z_0 \in \Omega$ имеет такую окрестность N, в которой выполняется или (a), или (b). Для $z_0 \in \Omega \setminus D$ это доказывается точно так же, как в теореме VI.14. Поэтому допустим, что $z_0 \in D$. Мы знаем, что вблизи z_0

$$A(z) = A_{-k}(z - z_0)^{-k} + \ldots + A_{-1}(z - z_0)^{-1} + G(z),$$

где $G(z)$ аналитична в z_0 и компактна для z, близких к z_0 или равных z_0. Поскольку G непрерывна по норме в z_0, то $G(z_0)$ тоже компактен как предел последовательности компактных операторов. Далее, пусть F — оператор конечного ранга и N — открытый диск вокруг z_0, так что $\|G(z_0) - F\| < 1/2$ и $\|G(z) - G(z_0)\| < 1/2$ при $z \in N$. Пусть

$$F(z) = A_{-k}(z - z_0)^{-k} + \ldots + A_{-1}(z - z_0)^{-1} + F.$$

Тогда $\|A(z) - F(z)\| < 1$ в N, так что $C(z) = [1 - (A(z) - F(z))]^{-1}$ существует и аналитична в N. Следовательно, $(1 - A(z))^{-1}$ существует тогда и только тогда, когда существует $[1 - F(z)C(z)]^{-1}$, поскольку

$$1 - A(z) = (1 - F(z)C(z))[1 - (A(z) - F(z))].$$

Поскольку область значений $F(z)$ содержится в $\operatorname{Ran} A_{-k} + \ldots + \operatorname{Ran} A_{-1} + \operatorname{Ran} F \equiv R$ — некотором фиксированном конечномерном пространстве, то область значений $F(z)C(z)$ тоже содержится в R. Следовательно, в силу уравнения (VI.5b) из § VI.5, оператор $1 - F(z)C(z)$ обратим тогда и только тогда, когда некий детерминант из матричных элементов $1 - C(z)F(z)$ отличен от нуля. Этот детерминант есть мероморфная функция в N, так что он имеет в N дискретные нули, если только он не равен нулю тождественно. Более того, в этом случае $(1 - C(z)F(z))^{-1}$ выражается в виде $1 +$ (конечное алгебраическое дополнение/

детерминант), так что $(1-C(z)F(z))^{-1}$ мероморфна и имеет вычеты конечного ранга в N. Таким образом, мы попадаем в условия случая (b) в N. Если же детерминант есть тождественный нуль, то мы локально попадаем в условия случая (a). ∎

Условие, что операторы $A_{-k}, \ldots, A_{-1}$ имеют конечный ранг, существенно. Теорема не справедлива, если предполагается лишь компактность $A_{-k}, \ldots, A_{-1}$ (задача 34). Отказаться от условия $\sigma(A)=\sigma_{\text{ess}}(A)$ в предыдущем предложении позволяет метод теоремы XIII.13.

Лемма 1. Пусть A — замкнутый оператор. Тогда $(A-z)^{-1}$ — мероморфная функция на $\mathbb{C}\setminus\sigma_{\text{ess}}(A)$ с особенностями лишь в точках $z\in\sigma_{\text{disc}}(A)$. Коэффициенты при отрицательных степенях в разложении Лорана в точках $z_0\in\sigma_{\text{disc}}(A)$ суть операторы конечного ранга.

Доказательство. Мы знаем уже, что $(A-z)^{-1}$ аналитична в $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$. Пусть z_0 — изолированная точка $\sigma(A)$. Тогда $(A-z)^{-1}$ аналитична на множестве $\{z \mid 0<|z-z_0|<r\}$, и потому на этом множестве

$$(A-z)^{-1}=\sum_{n=-\infty}^{\infty} R_n(z-z_0)^n,$$

где

$$R_n=\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_{|z-z_0|=r/2}(z-z_0)^{-n-1}(A-z)^{-1}\,dz.$$

В § XII.2 мы воспользовались резольвентным тождеством, чтобы доказать, что $(-R_{-1})^2=-R_{-1}$. Таким же образом доказывается (см. задачу 3 к гл. XII), что

$$R_{-n}=-(N)^{n-1}\qquad(n\geqslant 2),\tag{18a}$$

где $N=-R_{-2}$, и что

$$NP=PN=N,\tag{18b}$$

где $P=-R_{-1}$ — проектор, ассоциированный с z_0. Наконец, так как $\sum\limits_{n=-\infty}^{0}R_n\mu^n$ абсолютно сходится при всех $\mu\neq 0$, то $\sum\limits_{n=0}^{\infty}\lambda^nN^n$ сходится при всех λ, так что $(1-\lambda N)^{-1}$ существует при всех λ. Следовательно,

$$\sigma(N)=\{0\}.\tag{18c}$$

Предположим теперь, что точка спектра z_0 лежит в $\sigma_{\text{disc}}(A)$ и изолирована. Тогда P по определению имеет конечный ранг. Из (18b) видно, что $\operatorname{Ran} N\subset\operatorname{Ran} P$, так что каждый R_{-n} конечного ранга. Далее, согласно (18c), $N\restriction\operatorname{Ran}P$ есть конечномерный оператор со спектром $\{0\}$. Следовательно, $(NP)^k=0$ при некотором k. Так как, в силу (18b), $(NP)^k=N^k$, то $N^k=0$

при некотором k. Отсюда заключаем, что $R_{-n}=0$, если $n \geqslant k+1$. Следовательно, $(A-z)^{-1}$ мероморфна в z_0 с вычетами конечного ранга. ∎

Мы уже располагаем главными средствами для обобщения предложения, доказанного в начале этого раздела, на случай, когда $\sigma_{\rm disc}(A) \cup \sigma_{\rm disc}(B) \neq \varnothing$. Читатель мог бы остановиться здесь и попробовать сделать такое обобщение с помощью теоремы XIII.13. Мы же введем средство распространения этого предложения на неограниченные операторы.

Лемма 2 (теорема о сильном спектральном отображении). Пусть A — замкнутый оператор на гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$. Пусть $z_0 \notin \sigma(A)$ и $B=(A-z_0)^{-1}$. Тогда:

(a) если $z \neq 0$, то $z \in \sigma(B)$ в том и только том случае, когда $z_0+z^{-1} \in \sigma(A)$; $z \in \sigma_{\rm ess}(B)$ в том и только том случае, когда $z^{-1}+z_0 \in \sigma_{\rm ess}(A)$; $z \in \sigma_{\rm disc}(B)$ в том и только том случае, когда $z^{-1}+z_0 \in \sigma_{\rm disc}(A)$;

(b) $0 \in \sigma(B)$ в том и только том случае, когда A не ограничен; 0 никогда не принадлежит $\sigma_{\rm disc}(B)$, так что если $0 \in \sigma(B)$, то $0 \in \sigma_{\rm ess}(B)$.

Доказательство. Так как мы не будем применять утверждение (b), мы отнесем его доказательство к задачам (см. задачу 36). Для доказательства (a) прежде всего заметим, что если $z \neq 0$, то

$$(B-z)=(A-z_0)^{-1}-z=[1-z(A-z_0)](A-z_0)^{-1}=$$
$$=-z[A-(z^{-1}+z_0)](A-z_0)^{-1}.$$

Если $z \notin \sigma(B)$, то $[A-(z^{-1}+z_0)]^{-1}=-z(A-z_0)^{-1}(B-z)^{-1}$, так что $z^{-1}+z_0 \notin \sigma(A)$. Если $z^{-1}+z_0 \notin \sigma(A)$, то $-z^{-1}(A-z_0)[A-(z^{-1}+z_0)]^{-1}=-z^{-1}-z^{-2}[A-(z^{-1}+z_0)]^{-1}$ ограничен и является обратным к $B-z$, так что $z \notin \sigma(B)$. Следовательно, $z \in \sigma(B)$ тогда и только тогда, когда $z^{-1}+z_0 \in \sigma(A)$ и изолированные точки спектра отображаются одна в другую посредством $z \mapsto z^{-1}+z_0$. Пусть $z_1 \in \sigma_{\rm disc}(B)$. Тогда вблизи $z=z_1$ функция $(B-z)^{-1}$ мероморфна с вычетами конечного ранга. Поэтому при z вблизи z_1 функция $[A-(z^{-1}+z_0)]^{-1}=-z(A-z_0)^{-1}(B-z)^{-1}$ тоже мероморфна с вычетами конечного ранга. Следовательно, при λ вблизи $z_1^{-1}+z_0$ функция $(A-\lambda)^{-1}$ мероморфна с вычетами конечного ранга и, значит, $z_1^{-1}+z_0 \in \sigma_{\rm disc}(A)$. Подобным же образом, если $\lambda \in \sigma_{\rm disc}(A)$, можно показать, что $z=(\lambda-z_0)^{-1} \in \sigma_{\rm disc}(B)$. ∎

Если бы мы хотели установить окончательную теорему лишь для полуограниченных самосопряженных операторов, можно было бы применить предложение, которым открывается этот раздел, к $(A+c)^{-1}$ с подходящим вещественным числом c. Но нам надо рассмотреть самосопряженные операторы со спектром $\mathbb{R}$, и нам придется ввести $(A+i)^{-1}$, который более не самосопряжен. Следовательно, нужно распространить указанное предложение на некоторые ограниченные несамосопряженные операторы.

Следующий пример показывает что равенство $\sigma_{ess}(A)=\sigma_{ess}(B)$ совсем не обязательно выполняется, если $B-A$ компактен.

Пример 1. Пусть $\mathscr{H}=l_2(-\infty, \infty)$. Пусть A — оператор левого сдвига, т. е. $(A\varphi)_n=\varphi_{n+1}$. Пусть C: $\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ определено посредством $(C\varphi)_n=\delta_{n,0}\varphi_1$. Следовательно, C есть возмущение ранга один. Пусть $B=A-C$. Мы покажем, что $\sigma(A)=\sigma_{ess}(A)=\{z\,|\,|z|=1\}$, в то время как $\sigma(B)=\sigma_{ess}(B)=\{z\,|\,|z|\leqslant 1\}$. Чтобы найти $\sigma(A)$, отобразим $l_2(-\infty, \infty)$ на $L^2(0, 2\pi)$ посредством $U\{\varphi_n\}=$ $=\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty}(2\pi)^{-1/2}\varphi_n e^{inx}$. Оператор U унитарен и UAU^{-1} есть умножение на e^{-ix}, так что $\sigma(A)=\sigma(UAU^{-1})=\{z\,|\,|z|=1\}$. Обратимся теперь к B. Если $z\notin\sigma(A)$, то $(B-z)^{-1}$ существует тогда и только тогда, когда существует $(1-C(A-z)^{-1})^{-1}$. Так как $C(A-z)^{-1}$ компактен, то $(1-C(A-z)^{-1})^{-1}$ существует, за исключением случая, когда $C(A-z)^{-1}$ имеет собственное значение 1, который равносилен тому, что z есть собственное значение B. Пусть $(B-z)\varphi=0$. Тогда $\varphi_{n+1}-\delta_{n,0}\varphi_1-z\varphi_n=0$. Предположим, что $z\neq 0$. Положив $n=0$, мы видим, что $\varphi_0=0$, а затем, полагая $n=-1, -2, \ldots,$ — что $\varphi_n=0$ при $n<0$. Полагая $n=1, 2, \ldots$, мы видим, что $\varphi_n=z^{n-1}\varphi_1$, если $n\geqslant 1$. Следовательно, если $|z|>1$, таких собственных значений не существует и $B-z$ обратим, т. е. $z\in\rho(B)$. Если $|z|<1$, то

$$\langle 0, \varphi_1, z\varphi_1, \ldots, z^{n-1}\varphi_1, \ldots\rangle$$

есть собственный вектор, так что $z\in\sigma(B)$.

Интересно отметить, в каком месте не проходит доказательство того, что $\sigma_{ess}(B)=\sigma_{ess}(A)$. Функция $C(A-z)^{-1}$ по-прежнему аналитична в $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$. На той компоненте $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$, которая простирается до бесконечности, $\|C(A-z)^{-1}\|$ кое-где меньше единицы, так что $(1-C(A-z)^{-1})^{-1}$ существует на этой компоненте. На другой компоненте нам a priori неизвестно, что $(1-$ $-C(A-z)^{-1})^{-1}$ существует хотя бы в одной точке, так что мы попадаем в условия пункта (a) аналитической теоремы Фредгольма, когда мало что можно сказать.

Пример 1 показывает, что нужны такие предположения о B, которые гарантировали бы нам невозможность оказаться в том положении, когда обратный оператор не существует нигде на некоторой компоненте $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$. Если мы обратим пример 1 и будем рассматривать A как возмущение B, то увидим, что внутренность $\sigma_{ess}(A)$ может исчезать под действием возмущения, поэтому мы будем предполагать, что $\sigma_{ess}(A)$ нигде не плотно.

Лемма 3. Пусть A и B — ограниченные операторы с компактной разностью $A-B$, такие, что

(a) $\sigma(A)$ имеет пустую внутренность как подмножество $\mathbb{C}$;

(b) каждая компонента $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$ содержит точку из $\rho(B)$.

Тогда $\sigma_{ess}(A)=\sigma_{ess}(B)$.

Доказательство. Пусть $C=A-B$. Вследствие компактности C функция $C(A-z)^{-1}$ аналитична и имеет компактные значения в $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$, а вследствие леммы 1 она мероморфна в $\mathbb{C}\setminus\sigma_{ess}(A)$ с вычетами конечного ранга в точках $\sigma_{disc}(A)$. Если $z\notin\sigma(A)$, то $(B-z)^{-1}$ существует тогда и только тогда, когда существует $(1-C(A-z)^{-1})^{-1}$. Итак, в силу (b), заключаем, что в каждой компоненте $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$ оператор $(1-C(A-z)^{-1})^{-1}$ где-либо обратим. Компоненты $\mathbb{C}\setminus\sigma(A)$ и $\mathbb{C}\setminus\sigma_{ess}(A)$ совпадают вследствие дискретности $\sigma_{disc}(A)$. По мероморфной теореме Фредгольма заключаем, что $(1-C(A-z)^{-1})^{-1}$ существует на $\mathbb{C}\setminus\sigma_{ess}(A)$ всюду, кроме дискретного множества D', где она имеет вычеты конечного ранга. Отсюда следует, что B может иметь лишь дискретный спектр в $\mathbb{C}\setminus\sigma_{ess}(A)$, так что $\sigma_{ess}(B)\subset\sigma_{ess}(A)$. Так как $\sigma(A)$ не имеет внутренних точек, каждая компонента $\mathbb{C}\setminus\sigma_{ess}(B)$ имеет точки, не лежащие ни в $\sigma(A)$, ни в $\sigma(B)$. Теперь мы можем обратить проведенное рассуждение и заключить, что $\sigma_{ess}(A)\subset\subset\sigma_{ess}(B)$. ∎

Теперь уже можно доказать основную теорему. Однако, поскольку главное условие состоит в том, что $(A-z)^{-1}-(B-z)^{-1}$ компактен, полезно отметить следующее:

Лемма 4. Пусть A и B — замкнутые операторы. Если $(A-z)^{-1}-(B-z)^{-1}$ компактен при некотором $z_0\in\rho(A)\cap\rho(B)$, то он компактен при всех $z\in\rho(A)\cap\rho(B)$.

Доказательство. С помощью первой резольвентной формулы выражение $(A-z)^{-1}-(B-z)^{-1}$ можно записать в виде конечной суммы членов вида $C[(A-z_0)^{-1}-(B-z_0)^{-1}]D$ с ограниченными C и D. ∎

Теперь мы готовы к доказательству основной теоремы этого раздела.

Теорема XIII.14 (теорема Вейля о существенном спектре). Пусть A — самосопряженный, а B — ограниченный операторы, такие, что

(a) при некотором (а следовательно, при всех) $z\in\rho(B)\cap\rho(A)$ оператор $(A-z)^{-1}-(B-z)^{-1}$ компактен

и *либо*

(b_1) $\sigma(A)\neq\mathbb{R}$ и $\rho(B)\neq\varnothing$, *либо*

(b_2) точки $\rho(B)$ имеются и в верхней, и в нижней полуплоскостях.

Тогда $\sigma_{ess}(B) = \sigma_{ess}(A)$.

Доказательство. Согласно предположению, некоторое z_0 вне вещественной оси принадлежит $\rho(B)$. Пусть $D = (A - z_0)^{-1}$ и $E = (B - z_0)^{-1}$. По лемме 2, достаточно доказать, что $\sigma_{ess}(D) = \sigma_{ess}(E)$, ибо тогда можно сделать вывод, что $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$. Так как A самосопряжен, то $\sigma_{ess}(A) \subset \mathbb{R}$ и потому $\sigma_{ess}(D) \subset \{\lambda \mid \lambda^{-1} + z_0 \in \mathbb{R}\} \cup \cup \{0\}$. Вследствие этого $\sigma_{ess}(D)$ имеет пустую внутренность и либо $\sigma_{ess}(A) = \mathbb{R}$, и тогда $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(D)$ имеет две компоненты, либо $\sigma_{ess}(A) \neq \mathbb{R}$, и тогда $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(D)$ связно. В любом случае из (b) и леммы 2 следует, что каждая компонента $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(D)$ пересекается с $\rho(E)$. Так как D и E ограничены, а их разность $D - E$ компактна вследствие леммы 4, то можно применить лемму 3 и заключить, что $\sigma_{ess}(D) = \sigma_{ess}(E)$. Это доказывает теорему. ▮

Заметим, что теорему XIII.14 можно распространить на некоторые случаи, когда A не является ни самосопряженным, ни нормальным, однако это потребует довольно сложных дополнительных предположений. Так как в приложениях A почти всегда самосопряжен, мы доказали теорему для этого простого случая. Следующий пример показывает необходимость какого-то условия типа (b).

Пример 2. Пусть A и B — операторы из примера 1, так что $\sigma(A) = \{z \mid |z| = 1\}$ и $\sigma(B) = \{z \mid |z| \leqslant 1\}$. Заметим, что 1 не есть собственное значение A, A^*, B, B^*, поэтому $A - 1$ и $B - 1$ суть инъективные отображения l_2 на плотные подмножества в l_2. Следовательно, $(A - 1)^{-1}$ и $(B - 1)^{-1}$ — неограниченные плотно определенные замкнутые операторы. Пусть

$$D = i(A + 1)(A - 1)^{-1} = i[1 + 2(A - 1)^{-1}],$$
$$E = i(B + 1)(B - 1)^{-1} = i[1 + 2(B - 1)^{-1}].$$

Тогда D самосопряжен, так как при отображении U, рассмотренном в примере 1, D есть умножение на $i(e^{-i\theta} + 1)/(e^{-i\theta} - 1) = -\operatorname{ctg}(\theta/2)$. Заметим что $(D - i)^{-1} = {}^1/_2 A - {}^1/_2$ и $(E - i)^{-1} = {}^1/_2 B - {}^1/_2$. Следовательно, по теореме о сильном спектральном отображении (лемма 2 выше), $\sigma(D) = \mathbb{R}$ и $\sigma(E) = \{z \mid \operatorname{Im} z \leqslant 0\}$. Более того, $(D - i)^{-1} - (E - i)^{-1}$ компактен однако $\sigma_{ess}(D) \neq \sigma_{ess}(E)$. Этот пример связан с примером 1 при помощи обратного преобразования Кэли (см. замечания к § X.1).

При применении теоремы XIII.14 полезно заменить (b) более простыми условиями. Для этой цели приведем два следствия.

Следствие 1. Пусть A и B — самосопряженные операторы с компактным $(A+i)^{-1}-(B+i)^{-1}$. Тогда

$$\sigma_{ess}(A)=\sigma_{ess}(B).$$

Доказательство. Поскольку B самосопряжен, $\rho(B)$ содержит точки обеих полуплоскостей. ▮

Чтобы сформулировать следствие 2, нам потребуется новое понятие.

Определение. Пусть A самосопряжен. Оператор C, такой, что $D(A)\subset D(C)$, называется **относительно компактным** по отношению к A тогда и только тогда, когда $C(A+i)^{-1}$ компактен.

Отметим, что если C относительно компактен, то $C(A-z)^{-1}$ компактен при всех $z\in\rho(A)$, а если $C(A-z)^{-1}$ компактен при некотором $z\in\rho(A)$, то C относительно компактен (задача 38а). Свойство относительной компактности можно также сформулировать в терминах гильбертова пространства $D(A)$ с нормой $\|\varphi\|_A^2=\|\varphi\|^2+\|A\varphi\|^2$: C относительно компактен тогда и только тогда, когда он компактен как отображение из $\langle D(A), \|\cdot\|_A\rangle$ в $\langle\mathscr{H}, \|\cdot\|\rangle$.

Следствие 2. Пусть A — самосопряженный оператор, и пусть C — его относительно компактное возмущение. Тогда:

(a) $B=A+C$, определенный так, что $D(B)=D(A)$, есть замкнутый оператор;

(b) если C симметричен, то B самосопряжен;

(c) $\sigma_{ess}(A)=\sigma_{ess}(B)$.

Доказательство. При вещественных и положительных λ имеем $C(A+i\lambda)^{-1}=[C(A+i)^{-1}][(A+i)(A+i\lambda)^{-1}]$. Если перейти к спектральному представлению для A, то $(A\pm i)(A\pm i\lambda)^{-1}$ есть умножение на $(x\pm i)(x\pm i\lambda)^{-1}$, так что $\operatorname{s-lim}_{\lambda\to\infty}(A\pm i)(A\pm i\lambda)^{-1}=0$. Так как $C(A+i)^{-1}$ компактен и $[(A+i)(A+i\lambda)^{-1}]^*$ в сильном смысле стремится к нулю, то $C(A+i)^{-1}[(A+i)(A+i\lambda)^{-1}]$ стремится к нулю по норме. Значит,

$$\lim_{\lambda\to\infty}\|C(A+i\lambda)^{-1}\|=0.$$

Отсюда следует, что C A-ограничен с относительной гранью нуль, а из этого немедленно вытекают (a) и (b) (см. § X.2). Далее, при больших λ существуют и $[1+C(A+i\lambda)^{-1}]^{-1}$, и $[1+C(A-i\lambda)^{-1}]^{-1}$, так что $(B+i\lambda)^{-1}$ и $(B-i\lambda)^{-1}$ существуют при больших λ. Следовательно, $\rho(B)$ содержит точки из каждой полуплоскости. Наконец, при больших λ

$$(B+i\lambda)^{-1}-(A+i\lambda)^{-1}=(A+i\lambda)^{-1}[(1+C(A+i\lambda)^{-1})^{-1}-1]=$$
$$=-(B+i\lambda)^{-1}C(A+i\lambda)^{-1}.$$

Так как $C(A+i\lambda)^{-1}$ компактен, разность $(B+i\lambda)^{-1}-(A+i\lambda)^{-1}$ тоже компактна и применима теорема XIII.14. Следовательно, $\sigma_{ess}(B)=\sigma_{ess}(A)$. ∎

Свойство относительной компактности можно сформулировать в терминах квадратичных форм и доказать соответствующий аналог следствия 2 (задача 39).

Проделав некоторую дополнительную работу, можно усилить следствие 2.

Следствие 3. Пусть A — самосопряженный оператор, и пусть C — симметрический оператор, представляющий собой относительно компактное возмущение оператора A^n с некоторым положительным целым n. Допустим, что $B=A+C$ самосопряжен на $D(A)$. Тогда $\sigma_{ess}(A)=\sigma_{ess}(B)$.

Доказательство. Заметим, что так как $D(A)\subset D(C)$, то C A-ограничен по теореме о замкнутом графике. Предположим сначала, что $n=2$. При φ и η из $C^\infty(A)$ функция $(\varphi, (A^2+1)^{-z}C(A^2+1)^{-1+z}\eta)$ аналитична в полосе $0<\operatorname{Re} z<1$ и непрерывна в ее замыкании, а $C(A^2+1)^{-1+iy}$ компактен, так что по доказанной ниже лемме $(A^2+1)^{-1/2}C(A^2+1)^{-1/2}$ тоже компактен. Значит, $(A+i)^{-1}C(A+$ $+i)^{-1}$ компактен. Так как $D(A)=D(B)$, оператор $(A-i)(B-i)^{-1}$ ограничен, поэтому $(A+C+i)^{-1}C(A+i)^{-1}$ компактен. Поскольку

$$(A+i)^{-1}-(B+i)^{-1}=(B+i)^{-1}C(A+i)^{-1},$$

мы можем применить теорему XIII.14 и убедиться, что $\sigma_{ess}(A)=$ $=\sigma_{ess}(B)$.

Теперь докажем следствие для случая произвольного n, показав, что если все ее предположения выполняются для некоторого $n>2$, то они выполнены и при $n=2$. Действительно, пусть $\varphi, \eta\in C^\infty(A)$. Тогда функция $(\varphi, C(A^2+1)^{-g(z)}\eta)$, где $g(z)={}^1/_2 z+{}^1/_2 n(1-z)$, аналитична в полосе $0<\operatorname{Re} z<1$ и непрерывна в ее замыкании. Так как $C(A^2+1)^{-g(iy)}$ компактен при вещественных y и $C(A^2+1)^{-g(1+iy)}$ ограничен, то $C(A^2+1)^{-g(t)}$ компактен при $t=(n-2)/(n-1)$ в силу леммы, приведенной ниже. Следовательно, C A^2-компактен. ∎

Заметим, что следствие 3 неверно, если потребовать лишь самосопряженности в существенном на $D(A)$. Предположим, например, что A имеет компактную резольвенту и $C=-A$. Тогда $\sigma_{ess}(A)=\varnothing$, а $\sigma_{ess}(B)=\{0\}$. В доказательстве мы опирались на следующую лемму:

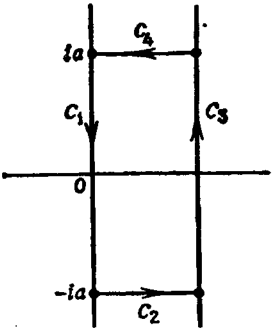


Рис. XIII.2.

Лемма. Пусть D плотна в некотором гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$, и предположим, что при каждом $z \in S = \{z \mid 0 \leqslant \operatorname{Re} z \leqslant 1\}$ мы имеем такую квадратичную форму $a(z)$ на $D \times D$, что

(1) $(\eta, a(z)\varphi)$ аналитична в S^{int} и непрерывна на S при всех η, $\varphi \in D$;

(2) при $z = iy$ (соответственно $1 + iy$) $a(z)$ — квадратичная форма компактного (соответственно ограниченного) оператора $A(z)$;

(3) $\sup\limits_{y} \{\|A(iy)\|, \|A(1+iy)\|\} \equiv M < \infty$.

Тогда $a(z)$ при любом $z \in S^{\text{int}}$ есть квадратичная форма компактного оператора.

Доказательство. По теореме Адамара о трех прямых (см. дополнение к § IX.4), $|(\eta, a(z)\varphi)| \leqslant M\|\eta\| \cdot \|\varphi\|$ при любом z, так что $a(z)$ есть квадратичная форма ограниченного оператора $A(z)$. Отображение $z \mapsto A(z)$ аналитично в S^{int} и слабо непрерывно в S. Остается доказать, что $A(z)$ компактен в S^{int}. Мы дадим доказательство для $z = {}^1/_2$; доказательство для других z такое же. Чтобы показать, что A компактен, достаточно убедиться в том, что $\||A|^{1/2}\varphi_n\| \to 0$ при $n \to \infty$ для любого ортонормированного множества $\{\varphi_n\}$. Поскольку $\||A|^{1/2}\varphi_n\|^2 = (U^*\varphi_n, A\varphi_n)$ при соответствующей частичной изометрии U, нам нужно только показать, что при любом ортонормированном множестве $\{\varphi_n\}$ и любой последовательности $\{\eta_n\}$ с $\|\eta_n\| \leqslant 1$ имеем $(\eta_n, A\varphi_n) \to 0$ при $n \to \infty$.

Пусть C — контур $C_1 \cup C_2 \cup C_3 \cup C_4$, изображенный на рис. XIII.2. Тогда для любой целой функции $f(z)$ с $f(1/2) = 1$ имеем

$$|(\eta_n, A\varphi_n)| \leqslant \frac{1}{2\pi} \int\limits_C |z - 1/2|^{-1} |f(z)| |(\eta_n, A(z)\varphi_n)| \, d|z|.$$

Фиксируем $\varepsilon > 0$ и положим $f(z) = \exp[z^2 - 1/4 - B(z - 1/2)]$. Тогда $f(1/2) = 1$ и, выбрав должным образом B и a, можно устроить так, что

$$\frac{1}{2\pi} M \int\limits_{C_2 \cup C_3 \cup C_4} |z - 1/2|^{-1} |f(z)| \, d|z| \leqslant \varepsilon.$$

Но $\lim\limits_{n \to \infty} |(\eta_n, A(iy)\varphi_n)| = 0$ при любом iy на C_1 вследствие компактности $A(iy)$. Поэтому, так как подынтегральное выражение равномерно ограничено,

$$\lim_{n \to \infty} \frac{1}{2\pi} \int\limits_{C_1} \left|z - \frac{1}{2}\right|^{-1} |f(z)| |(\eta_n, A(z)\varphi_n)| \, d|z| = 0$$

по теореме о мажорированной сходимости. Следовательно, для любого $\varepsilon > 0$

$$\overline{\lim_n}\, |(\eta_n, A\varphi_n)| \leqslant \varepsilon,$$

так что $(\eta_n, A\varphi_n) \to 0$, когда $n \to \infty$. ∎

Часто полезно пользоваться другим вариантом следствия 3, сформулированным в терминах квадратичных форм:

Следствие 4. Пусть A — положительный самосопряженный оператор, и пусть C — самосопряженный оператор, такой, что $Q(C) \supset Q(A)$. Предположим, что сумма квадратичных форм $A+C$ ограничена снизу и замкнута на $Q(A)$, и пусть B есть соответствующий самосопряженный оператор. Допустим далее, что *либо*

(i) C — относительно компактное возмущение оператора A^n с некоторым положительным целым n;

либо

(ii) $Q(|C|) \supset Q(A)$ и $|C|$ есть относительно компактное в смысле формы возмущение A^n с некоторым положительным целым n, т. е. $(A+1)^{-n/2}|C|(A+1)^{-n/2}$ компактен.

Тогда $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$.

Доказательство. Как и в случае следствия 3, достаточно доказать компактность $(A+\lambda)^{-1}C(B+\lambda)^{-1}$, где $\lambda > 0$ выбрано так, что $-\lambda < \inf \sigma(B)$. Сделав преобразование

$$\begin{aligned}(A+\lambda)^{-1}C(B+\lambda)^{-1} &= \\ &= [(A+\lambda)^{-1}C(A+\lambda)^{-1/2}][(A+\lambda)^{1/2}(B+\lambda)^{-1/2}](B+\lambda)^{-1/2},\end{aligned}$$

заметим, что $(A+\lambda)^{1/2}(B+\lambda)^{-1/2}$ ограничен, поскольку $Q(A) = Q(B)$, так что достаточно доказать компактность $(A+1)^{-1}C(A+1)^{-1/2}$.

В силу условия (i), это вытекает из сочетания двух фактов: компактности $(A+1)^{-n}C(A+1)^{-1/2}$ и ограниченности $(A+1)^{-1/2} \times C(A+1)^{-1/2}$. В силу условия (ii), $|C|^{1/2}(A+1)^{-1/2}$ ограничен, а $|C|^{1/2}(A-1)^{-n/2}$ компактен, так что $|C|^{1/2}(A+1)^{-1}$ компактен. Таким образом,

$$(A+1)^{-1}C(A+1)^{-1/2} = [|C|^{1/2}(A+1)^{-1}]^*(\operatorname{sgn} C)[|C|^{1/2}(A+1)^{-1/2}]$$

компактен. ∎

Теперь мы готовы рассмотреть различные примеры, в которых применяется теорема Вейля.

Пример 3 (классическая теорема Вейля). Если A самосопряжен и C компактен, то $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(A+C)$. Это выполняется, так как C автоматически относительно компактен.

Пример 4. Пусть $V \in C_0^\infty(0, \infty)$, и пусть H — оператор $-d^2/dx^2+V$ на $C_0^\infty(0, \infty)$. Он не самосопряжен, но имеет индексы дефекта $\langle 1, 1\rangle$ (см. дополнение к § X.1). Пусть A и B — два различных самосопряженных расширения оператора H. Если $D=D(\bar{H})$, то $\operatorname{Ran}(\bar{H}+i)\equiv R$ есть замкнутое подпространство коразмерности 1, так как H имеет индексы дефекта $\langle 1, 1\rangle$. Если $\psi \in R$, то $\psi=(\bar{H}+i)\varphi$ для некоторого φ и потому

$$[(A+i)^{-1}-(B+i)^{-1}]\psi=(A+i)^{-1}(\bar{H}+i)\varphi-(B+i)^{-1}(\bar{H}+i)\varphi=0,$$

так как $\bar{H}\subset A$ и $\bar{H}\subset B$. Значит, $(A+i)^{-1}-(B+i)^{-1}$ исчезает на R. Так как R имеет коразмерность 1, то отсюда следует, что разность $(A+i)^{-1}-(B+i)^{-1}$ имеет ранг 1 и потому компактна. Следовательно, $\sigma_{\text{ess}}(A)=\sigma_{\text{ess}}(B)$.

Пример 5. В общем случае пусть H — оператор с индексами дефекта $\langle d, d\rangle$ с $d<\infty$. Если A и B — два самосопряженных расширения оператора H, то $(A+i)^{-1}-(B+i)^{-1}$ есть оператор ранга d, как в примере 4, так что $\sigma_{\text{ess}}(A)=\sigma_{\text{ess}}(B)$. Если $d=\infty$, то этот вывод не обязательно правилен (см. задачу 40).

Пример 6. Пусть $H_0=-\Delta$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$. Воспользовавшись преобразованием Фурье, легко видеть, что $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta)=[0, \infty)$. Пусть V принадлежит $L^2+(L^\infty)_\varepsilon$; тогда $V(H_0+1)^{-1}$ компактен. Действительно, можно найти $V_n \in L^2$, такие, что $V-V_n \in L^\infty$ и $\lim\limits_{n\to\infty}\|V_n-V\|_\infty=0$. Следовательно, $V_n(H_0+1)^{-1}$ сходится по норме к $V(H_0+1)^{-1}$, и остается лишь показать, что $V_n(H_0+1)^{-1}$ компактен при всяком n. Но $V_n(H_0+1)^{-1}$ есть интегральный оператор с ядром $V_n(x)e^{-|x-y|}/4\pi|x-y|$ из $L^2(\mathbb{R}^6)$. Следовательно, $V_n(H_0+1)^{-1}$ — оператор Гильберта — Шмидта и, значит, компактный. Так как $V(H_0+1)^{-1}$ компактен, V относительно компактен, и потому $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=\sigma_{\text{ess}}(-\Delta)=[0, \infty)$.

Расширение этого результата на n-мерный случай ($n\neq 3$) см. в задаче 41.

Пример 7. В более общем случае пусть $V \in R+(L^\infty)_\varepsilon$. Вообще говоря, V не будет относительно компактным, так как $D(V)$ может не содержать $D(H_0)$. Однако это возмущение компактно в смысле форм, и поэтому можно воспользоваться теорией из задачи 39. Вместо этого заметим, что если $W \in R$, то

$$\lim_{E\to+\infty}\||W|^{1/2}(H_0+E)^{-1}|W|^{1/2}\|=0,$$

так как $|W|^{1/2}(H_0+E)^{-1}|W|^{1/2}$ есть оператор Гильберта — Шмидта с ядром

$$|W(x)|^{1/2}\exp(-\sqrt{E}|x-y|)|W(y)|^{1/2}/4\pi|x-y|,$$

а норма в L^2 этого ядра стремится к нулю в силу теоремы о мажорированной сходимости. Следовательно, при больших положительных E

$$(H+E)^{-1}-(H_0+E)^{-1}=$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}((H_0+E)^{-1}|W|^{1/2})[-W^{1/2}(H_0+E)^{-1}|W|^{1/2}]^n(W^{1/2}(H_0+E)^{-1}),$$

где $H=H_0+W$ и $W^{1/2}\equiv W/|W|^{1/2}$. Каждый член в этой сходящейся по норме сумме компактен. Действительно, положив $A=(H_0+E)^{-1/2}|W|^{1/2}$, видим, что A^*A компактен и, значит, компактен A. Таким образом, если $W\in R$, то $(H_0+W+E)^{-1}-(H_0+E)^{-1}$ компактен. Обобщение от R к $R+(L^\infty)_\varepsilon$ делается так же, как выше.

Пример 8. Рассмотрим оператор $H\equiv-\Delta+\mathbf{a}\cdot\mathbf{x}+V(x)$, связанный с задачей об эффекте Штарка. По теоремам X.29 и X.38, H в существенном самосопряжен на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, если $V\in L^p(\mathbb{R}^n)+L^\infty(\mathbb{R}^n)$, где $p=2$ при $n\leqslant3$, $p>2$ при $n=4$ и $p=n/2$ при $n\geqslant5$. Поскольку член $\mathbf{a}\cdot\mathbf{x}$ стремится к $-\infty$ таким образом, что он не может быть компенсирован членом $-\Delta$, можно показать, что H не ограничен снизу, и потому мы ожидаем, что $\sigma(H)=(-\infty,\infty)$. Мы покажем, что при более сильном предположении $V=V_1+V_2$, где $V_1\in L^p$ имеет компактный носитель и $V_2\in L^\infty$ стремится к нулю на бесконечности, V есть относительно компактное возмущение оператора $H_0=-\Delta+\mathbf{a}\cdot\mathbf{x}$. Пусть p_a — оператор импульса в направлении, параллельном $\mathbf{a}$, и $p_a^\perp$ — ортогональный импульс. Тогда элементарное вычисление (см. § XI.4) показывает, что на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

$$\exp(-i\alpha p_a^3)H_0\exp(+i\alpha p_a^3)=(p_a^\perp)^2+\mathbf{a}\cdot\mathbf{x}\equiv\tilde{H}_0,$$

где $\alpha=(3|a|)^{-1}$. Можно «диагонализовать» $\tilde{H}_0$ посредством преобразования Фурье в направлении, ортогональном к $\mathbf{a}$. Отсюда следует, что H_0 в существенном самосопряжен на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и $\sigma(H_0)=(-\infty,\infty)$, так что, если V относительно компактен, мы имеем новое доказательство того, что H_0+V в существенном самосопряжен на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и, более того, что $\sigma_{\text{ess}}(H)=\sigma_{\text{ess}}(H_0)=(-\infty,\infty)$, откуда $\sigma(H)=(-\infty,\infty)$. Как и выше, часть V_2 легко прибавить, если показать, что $V_1(H_0+i)^{-1}$ компактен. Пусть $T=-\Delta$. Тогда на $\mathcal{S}$, которое является существенной областью и для H_0, и для T,

$$(H_0+i)^{-1}=(T+i)^{-1}-(T+i)^{-1}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{x})(H_0+i)^{-1}=$$
$$=(T+i)^{-1}-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{x})(T+i)^{-1}(H_0+i)^{-1}+$$
$$+2i|a|(T+i)^{-1}p_a(T+i)^{-1}(H_0+i)^{-1},$$

поскольку $[\mathbf{a}\cdot\mathbf{x}, T]=2i|a|p_a$. Так как V_1 и $(\mathbf{a}\cdot\mathbf{x})V_1$ — относительно компактные возмущения оператора T (см. задачу 41) и $p_a(T+i)^{-1}$ ограничен, то $V_1(H_0+i)^{-1}$ компактен.

Подведем итог всем этим результатам, включая и задачу 41:

Теорема XIII.15. Пусть $H=-\Delta+\mathbf{a}\cdot\mathbf{x}+V$ — оператор в $L^2(\mathbb{R}^n)$. Тогда:

(a) если $a=0$, $n=3$, $V\in R+L^\infty_\varepsilon$, то $\sigma_{\text{ess}}(H)=[0, \infty)$;

(b) если $a=0$, $V\in L^p+L^\infty_\varepsilon$, где $p\geqslant\max\{n/2, 2\}$ при $n\neq 4$ и $p>2$ при $n=4$, то $\sigma_{\text{ess}}(H)=[0, \infty)$;

(c) если $a\neq 0$, $V=V_1+V_2$, где $V_1\in L^p$ (p как выше) имеет компактный носитель и $V_2\in L^\infty$ стремится к нулю на бесконечности, то $\sigma(H)=\sigma_{\text{ess}}(H)=(-\infty, \infty)$.

Пользуясь следствием 4, можно рассмотреть некоторые другие потенциалы.

Пример 9. Пусть $V=|r|^{-2}$ на $L^2(\mathbb{R}^5)$, и пусть $H_0=-\Delta$. Тогда V не может быть H_0-компактным, так как его относительная грань отлична от нуля (см. пример 4 в § X.2). Однако, по следующему общему критерию, V будет H_0^2-компактным.

Предположим, что $V\in L^2(\mathbb{R}^5)+(L^\infty(\mathbb{R}^5))_\varepsilon$. Тогда для каждого $\varepsilon>0$ мы можем написать $V=V_{1,\varepsilon}+V_{2,\varepsilon}$, где $V_{1,\varepsilon}\in L^2$ и $\sup\limits_x|V_{2,\varepsilon}(x)|\leqslant\varepsilon$. Следовательно, $V_{1,\varepsilon}(H_0^2+1)^{-1}$ сходится по норме к $V(H_0^2+1)^{-1}$, так что остается лишь показать, что $V_{1,\varepsilon}(H_0^2+1)^{-1}$ компактен для каждого $\varepsilon>0$. Но это видно непосредственно, так как из $V_{1,\varepsilon}\in L^2$ и $(p^4+1)^{-1}\in L^2$ следует, что $V_{1,\varepsilon}(H_0^2+1)^{-1}$ есть оператор Гильберта—Шмидта.

Возвращаясь к случаю $V=|r|^{-2}$, мы видим из примера 4 в § X.2, что если $\lambda\geqslant -2{,}25$, то $Q(-\Delta+\lambda V)=Q(-\Delta)$ и $-\Delta+\lambda V$ ограничен снизу. При таких λ применимо следствие 4, так что $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+\lambda V)=[0, \infty)$. Аналогичное рассуждение можно применять и к случаю $V=|r|^{-1}$, если $H_0=\sqrt{-\Delta+m^2}$. Когда H_0 — оператор Дирака, он не ограничен снизу, поэтому требуются более тонкие методы.

Теорема XIII.15 показывает, что если V — ограниченная функция с компактным носителем в $\mathbb{R}^3$, то $-\Delta+V$ имеет лишь конечное число собственных значений в $(-\infty, -1]$. Этот результат нетрудно распространить и на $\mathbb{R}^n$ (задача 41). Можно доказать (и в сущности для $n\geqslant 3$ мы это уже доказали в теореме XIII.12), что в $(-\infty, 0)$ есть лишь конечное число собственных значений, но для приложений достаточно более простого результата для $(-\infty, -1]$.

Теорема XIII.16. Пусть V — локально ограниченная положительная функция и $V(x)\to\infty$ при $|x|\to\infty$. Определим $-\Delta+V$

как сумму квадратичных форм. Тогда $-\Delta+V$ имеет чисто дискретный спектр.

Доказательство. Пусть $H=-\Delta+V$. По принципу минимакса достаточно доказать, что $\mu_n(H)\to\infty$ при $n\to\infty$. Для данного c найдем такой шар S, что $V(x)\geqslant c$, если $x\notin S$. Такой шар существует, так как $V(x)\to\infty$ при $x\to\infty$. Пусть W — потенциал, равный $-c$, если $x\in S$, и 0, если $x\notin S$. Тогда $V\geqslant c+W$, так что

$$\mu_n(H)\geqslant c+\mu_n(-\Delta+W).$$

Так как W — ограниченный потенциал с компактным носителем, то существует такое N, что $\mu_n(-\Delta+W)\geqslant -1$ при $n\geqslant N$. Следовательно, $\mu_n(H)\geqslant c-1$ при $n\geqslant N$. Так как c было произвольным, то $\mu_n(H)\to\infty$ при $n\to\infty$. ∎

Мы еще вернемся к общему вопросу об операторах с чисто дискретным спектром в § 14 и 15.

Следующий поразительный результат, в каком-то смысле обратный теореме Вейля, принадлежит фон Нейману.

Теорема XIII.16.1. Пусть A и B — ограниченные самосопряженные операторы, причем $\sigma_{ess}(A)=\sigma_{ess}(B)$. Тогда существуют унитарный оператор U и компактный оператор C, такие, что $B=U(A+C)U^{-1}$.

Это утверждение удивительно потому, что в его формулировке совершенно не упоминается кратность, иными словами, в качестве A можно взять оператор умножения на x в $L^2((0, 1); dx)$, а в качестве B — прямую сумму $A\oplus A$! Теорема XIII.16.1 опирается на следующий результат, который также весьма неожидан.

Теорема XIII.16.2 (теорема Вейля — фон Неймана). Пусть A — ограниченный самосопряженный оператор. Тогда для любого ε существует самосопряженный оператор Гильберта — Шмидта B с нормой $\|B\|_2\leqslant\varepsilon$, такой, что сумма $A+B$ обладает полной системой собственных векторов.

Доказательство. Предположим, что $\|A\|\leqslant 1$. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — ортонормированный базис в $\mathcal{H}$ — пространстве действия оператора A. Пусть $\mathcal{H}_1$ — циклическое подпространство для A, порождаемое вектором φ_1. По спектральной теореме существует изоморфизм $\mathcal{H}_1\cong L^2((-1, 1); d\mu)$, причем такой, что вектор φ_1 отвечает функции, тождественно равной 1, а оператор A — умножению на x. Пусть m — положительное целое число, которое будет зафиксировано ниже, и пусть P_1 — проектор в $L^2((-1, 1); d\mu)$ на те функции, которые постоянны на каждом интервале $(j/m, (j+1)/m)$. Тогда ранг P_1 не превосходит $2m$, так что ранг оператора $D\equiv P_1A(1-P_1)+(1-P_1)AP_1$ не превосходит $4m$.

Любой элемент из $P_1\mathscr{H}_1$ имеет вид $\sum_{j=-m}^{m-1} a_j x_j = \eta$. Пусть $\tilde{\eta} = \sum_{j=-m}^{m-1} \frac{j+1/2}{m} a_j x_j \in \operatorname{Ran} P_1$. Тогда

$$\|A\eta - \tilde{\eta}\|^2 \leqslant \frac{1}{4m^2}\|\eta\|^2,$$

так что $\|(1-P_1)AP_1\| \leqslant (2m)^{-1}$. Отсюда следует, что норма D не превосходит m^{-1}, а потому и любое из его собственных значений ограничено этой же величиной. Поскольку их не больше, чем $4m$, то $\|D\|_2 \leqslant [m^{-2}4m]^{1/2}$. Выбирая m достаточно большим, можно получить, что норма Гильберта—Шмидта оператора D не превосходит $\varepsilon/2$.

Пусть $B_1 = -D$. Тогда сумма $A+B_1 = P_1AP_1 + (1-P_1)A(1-P_1)$ оставляет множество $P_1\mathscr{H}$ инвариантным. Поскольку $P_1\mathscr{H}$ конечномерно, оно состоит из собственных векторов оператора $A+B_1$, и, в частности, φ_1 есть сумма собственных векторов. Пусть теперь $\tilde{\varphi}_2 = (1-P_1)\varphi_2$. По предыдущему построению для оператора $(1-P_1)A(1-P_1)$ на $(1-P_1)\mathscr{H}$ можно найти проектор P_2, такой, что $\operatorname{Ran} P_2 \subset \operatorname{Ran}(1-P_1)$, и оператор B_2 с нормой $\|B_2\|_2 \leqslant \varepsilon/4$, такой, что $\tilde{\varphi}_2$ — сумма собственных векторов оператора $A+B_1+B_2$ и что $B_2 \upharpoonright P_1\mathscr{H} = 0$. Итак, φ_1 и φ_2 — суммы собственных векторов этого оператора. Повторяя этот процесс, мы найдем оператор B с нормой $\|B\|_2 \leqslant \varepsilon$, такой, что каждый вектор φ_i есть сумма собственных векторов оператора $A+B$. Отсюда следует, что $A+B$ имеет чисто точечный спектр. ∎

Заметим, что в предыдущем построении φ_2 можно заменить на φ_p для любого $p > 1$. Однако, в силу инвариантности σ_{ac} относительно возмущений из класса операторов со следом (теорема XI.8), φ_2 нельзя заменить на φ_1.

Доказательство теоремы XIII.16.1. По теореме Вейля—фон Неймана к A и B можно прибавить такие компактные операторы, чтобы оба получившихся суммарных оператора имели полные системы собственных векторов. Более того, к этим последним операторам можно еще прибавить компактные операторы, с тем чтобы вновь полученные не имели дискретного спектра. Действительно, если $A\varphi_n = \lambda_n\varphi_n$, то определим $\tilde{\lambda}_n$ как точку в $\sigma_{ess}(A)$, ближайшую к λ_n (если их две, то возьмем бо́льшую). Тогда $\lim_{n\to\infty} |\lambda_n - \tilde{\lambda}_n| = 0$, так что оператор $C\varphi_n = (\tilde{\lambda}_n - \lambda_n)\varphi_n$ компактен, а дискретный спектр $A+C$ пуст.

Таким образом, дело сводится к доказательству следующего факта. Пусть $\{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty}$ и $\{\mu_n\}_{n=1}^{\infty}$ — два набора вещественных чисел, обладающих тем свойством, что для каждого λ_n имеется бесконечно много сколь угодно близких к нему μ_m, а для каждого μ_n имеется бесконечно много сколь угодно близких к нему λ_m. Тогда существует перенумерация $\{\tilde{\mu}_n\}$ набора $\{\mu_n\}$, такая, что $|\lambda_n - \tilde{\mu}_n| \to 0$ при $n \to \infty$. Сначала выберем подпоследовательность $\lambda_j' = \lambda_{n(j)}$, где $n(1) < n(2) < \ldots$, такую, что $|\lambda_j' - \mu_j| \leqslant 2^{-j}$. Так как каждое μ_j служит пределом каких-то λ, это заведомо возможно. Определим теперь $\tilde{\mu}_n$ индукцией по n следующим образом. Если n не содержится среди $n(j)$, то выберем $\tilde{\mu}_n$ отличным от $\tilde{\mu}_1, \ldots, \tilde{\mu}_{n-1}$ и таким, что $|\lambda_n - \tilde{\mu}_n| \leqslant 2^{-n}$. Если n есть некоторое $n(j)$, проверяем, содержится ли μ_j среди $\tilde{\mu}_1, \ldots, \tilde{\mu}_{n-1}$. Если да, то выбираем $\tilde{\mu}_n$, как и выше. Если нет, то выбираем $\tilde{\mu}_n = \mu_j$. Тогда каждое μ_j есть $\tilde{\mu}_n$ для некоторого $n \leqslant n(j)$ и $\sum |\lambda_n - \tilde{\mu}_n| \leqslant 2$, так что $|\lambda_n - \tilde{\mu}_n| \to 0$. ∎

XIII.5. Местоположение существенного спектра II: теорема Хунцикера — ван Винтера — Жислина

Теорема Вейля позволяет доказать для широкого класса двухчастичных операторов Шредингера, что $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, \infty)$. В этом разделе мы рассмотрим спектр N-частичных операторов Шредингера того типа, который обсуждался в § XI.5. Мы будем пользоваться без пояснений введенными там обозначениями.

В двухчастичном случае ключевую роль играет условие убывания $V(\mathbf{x})$ на бесконечности хотя бы в среднем, например как это диктуется требованием $V \in R + (L^\infty)_\varepsilon$. В случае N частиц это уже не так. Даже если V_{ij} принадлежит C_0^∞, $V = \sum_{i<j} V_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ уже не стремится к нулю на бесконечности в трубчатой области, где $\sum_{i=1}^{n-1} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 \to \infty$, если некоторые $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ остаются конечными. Важная новая идея здесь состоит в том, чтобы заменить

$$(H-E)^{-1} = (H_0 - E)^{-1} - (H_0 - E)^{-1} V (H-E)^{-1}$$

уравнением $(H-E)^{-1} = D(E) + I(E)(H-E)^{-1}$, где $I(E)$ компактен.

Мы предложим два различных доказательства главного результата этого раздела. Первый — основанный на леммах 1—6 — использует резольвентные уравнения упомянутого выше типа. Второй, в котором используются леммы 1, 2 и 7—11, основан на геометрических представлениях такого типа, как упомянутые выше рассуждения о специальных трубчатых областях, в которых V не стремится к нулю. Каждое доказательство имеет свои преимущества. Первое лучше подходит для тех случаев, когда H не самосопряжен, как в случаях, описываемых в § 10 и 11.

Второе же, как мы увидим ниже, особенно удобно, если H сужен на инвариантное подпространство.

Для каждого кластерного разложения $D=\{C_l\}_{l=1}^k$ множества $\{1, \ldots, n\}$ мы определили в § XI.5 гамильтониан $H_D=H-I_D$; здесь I_D — сумма всех потенциалов V_{ij}, где i и j принадлежат разным кластерам. Для потенциалов $V_{ij}\in L^2+L^p$ $(p<3)$ мы доказали, что $\sigma(H_D)\subset\sigma(H)$, так как волновые операторы $\Omega_D^\pm$ осуществляют унитарную эквивалентность H_D и $H\upharpoonright \operatorname{Ran}\Omega_D^\pm$. Чтобы найти $\sigma(H_D)$, запишем $\mathscr{H}=\mathscr{H}(C_1)\otimes\ldots\otimes\mathscr{H}(C_k)\otimes\mathscr{H}_D$, что отвечает разложению $\mathscr{H}$, которое получается при выборе внутренних координат $\xi_1^{(C_1)}, \ldots, \xi_{n_1-1}^{(C_1)}$ для $C_1, \ldots, \xi_1^{(C_k)}, \ldots, \xi_{n_k-1}^{(C_k)}$ для C_k и $\zeta_1, \ldots, \zeta_{k-1}$ для относительных координат кластеров. Тогда

$$H_D=H(C_1)+\ldots+H(C_k)+T_D,$$

где $H(C_l)=I\otimes\ldots\otimes h_{C_l}\otimes\ldots\otimes I$ есть гамильтониан кластера C_l за вычетом движения соответствующего центра масс, а T_D — кинетическая энергия всех кластеров, т. е. сумма кинетических энергий центров масс всех C_l за вычетом энергии движения центра масс полной системы. Тогда по теореме VIII.33

$$\sigma(H_D)=\left\{\sum_{l=1}^k\lambda_l+\tau\,\middle|\,\lambda_l\in\sigma(H(C_l)),\ \tau\in\sigma(T_D)\right\}.$$

Так как $\sigma(T_D)=[0,\infty)$, то $\sigma(H_D)=[\Sigma_D,\infty)$, где

$$\Sigma_D=\sum_{l=1}^k\inf\sigma(H(C_l)). \tag{19}$$

Поскольку мы ожидаем, что $\mathscr{H}$ состоит только из связанных состояний и состояний рассеяния, то соответственно мы ожидаем, что $\sigma_{\mathrm{ess}}(H)=[\Sigma,\infty)$, где

$$\Sigma=\inf_{D,\ \#(D)\geqslant 2}\Sigma_D. \tag{20a}$$

Это справедливо на самом деле, причем в гораздо более общих условиях, чем $V\in L^2+L^p$.

Теорема XIII.17 (ХВЖ-теорема). Пусть H — оператор на $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, полученный вычитанием энергии движения центра масс из

$$-\sum_{i=1}^N(2\mu_i)^{-1}\Delta_i+\sum_{i<j}V_{ij}(\mathbf{r}_{ij}),\quad \text{где } V_{ij}\in R+(L^\infty)_\varepsilon \text{ и } \mathbf{r}_{ij}=\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j.$$

Для каждого кластерного разложения $D=\{C_1, \ldots, C_k\}$ определим Σ посредством (19) и (20a). Тогда

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(H)=[\Sigma,\infty).$$

Вся остальная часть этого раздела будет посвящена доказательству этой теоремы. Приемы, которые мы развиваем, полезны в изучении многих аспектов теории систем N частиц при наличии более чем одного канала, т. е. систем, в которых некоторые из H_D обладают связанными состояниями. В частности, эта техника будет играть важную роль в § 10. Прежде чем доказывать эту теорему, заметим, что по индукции легко показать, что $\inf\{\Sigma_D \mid \# D = m+1\} \geqslant \inf\{\Sigma_D \mid \# D = m\}$, поэтому (20a) можно заменить (см. задачу 42) на

$$\Sigma = \inf\{\Sigma_D \mid \#(D) = 2\}. \tag{20b}$$

Мы покажем, что $[\Sigma, \infty) \subset \sigma(H)$, сначала предполагая, что V_{ij} «хорошие», а затем пользуясь аппроксимациями.

Лемма 1. Если $V_{ij} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, то $[\Sigma, \infty) \subset \sigma(H)$.

Доказательство. Так как существуют волновые операторы $\Omega_D^\pm$ (теорема XI.34), то $\sigma(H_D) \subset \sigma(H)$. Но $\sigma(H_D) = [\Sigma_D, \infty)$, когда $\#(D) \geqslant 2$, откуда следует результат. ∎

Другое доказательство леммы 1, не использующее волновых операторов, см. в задаче 45.

Лемма 2. В условиях теоремы XIII.17 $[\Sigma, \infty) \subset \sigma(H)$.

Доказательство. Для любых i, j можно найти такие $V_{ij}^n \in C_0^\infty$, чтобы выполнялось неравенство $|V_{ij} - V_{ij}^{(n)}| < n^{-1}(-\Delta + 1)$ в смысле форм (задача 44). Положив $H^{(n)} = H_0 + \sum_{i<j} V_{ij}^{(n)}$, видим, что $H^{(n)} \to H$ в равномерном резольвентном смысле и что $H_D^{(n)} \to H_D$ в том же смысле. Следовательно, согласно теореме VIII.20, $\exp(-H_D^{(n)}) \to \exp(-H_D)$ по норме. Так как $\Sigma_D^{(n)} = -\log\left\| e^{-H_D^{(n)}} \right\|$, мы заключаем, что $\Sigma_D^{(n)} \to \Sigma_D$ и, следовательно, $\Sigma^{(n)} \to \Sigma$. Пусть $\lambda > \Sigma$. Для достаточно больших n имеем $\lambda > \Sigma^{(n)}$, так что $\lambda \in \sigma(H^{(n)})$ по лемме 1. Так как $H^{(n)} \to H$ в равномерном резольвентном смысле, то $\lambda \in \sigma(H)$ по теореме VIII.23. Следовательно, $(\Sigma, \infty) \subset \sigma(H)$. Но так как $\sigma(H)$ замкнуто, то $\Sigma \in \sigma(H)$. ∎

Второе утверждение, необходимое для доказательства теоремы XIII.17, а именно: если $\lambda < \Sigma$, то либо $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(H)$, либо $\lambda \in \rho(H)$ — существенно труднее, чем лемма 2, и требует развития некоторой специальной техники. Чтобы проиллюстрировать эти идеи, рассмотрим сначала случай $N = 3$ и $V_{ij} \in L^2$. В двухчастичном случае мы воспользовались ключевым уравнением $(H-E)^{-1} = (H_0 - E)^{-1} - (H_0 - E)^{-1} V (H-E)^{-1}$ и тем обстоятельством, что $(H_0 - E)^{-1} V$ компактен. В случае трех частиц мы имеем по-прежнему

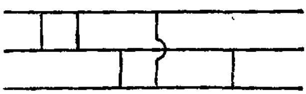
$$(H-E)^{-1} = (H_0 - E)^{-1} - (H_0 - E)^{-1} (V_{12} + V_{13} + V_{23}) (H-E)^{-1},$$

однако $(H_0-E)^{-1}(V_{12}+V_{13}+V_{23})$ бо ыше не компактен. Чтобы убедиться, что $(H_0-E)^{-1}V_{12}$ не компактен, заметим, что он коммутирует с однопараметрической группой трансляций $\langle r_1, r_2, r_3\rangle \mapsto \langle r_1-a, r_2-a, r_3-a\rangle$. Такой оператор не может быть компактным (см. задачу 43).

Поэтому будем искать разложение оператора $(H-E)^{-1}$ вида $A(E)+B(E)(H-E)^{-1}$ с компактным $B(E)$, которое будет более тонким, нежели разложение, задаваемое вторым резольвентным уравнением. Чтобы получить представление о том, каким должно быть нужное нам разложение, возьмем E настолько отрицательным, чтобы сходился ряд теории возмущений, получаемый итерацией второго резольвентного уравнения. Тогда

$$\begin{aligned}(H-E)^{-1} = (H_0-E)^{-1} - (H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1} - \\ - (H_0-E)^{-1}V_{13}(H_0-E)^{-1} - (H_0-E)^{-1}V_{23}(H_0-E)^{-1} + \\ + (H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1} + \ldots . \qquad (21)\end{aligned}$$

Введем графическое представление для отдельных членов в (21). Пусть три горизонтальные линии представляют множитель $(H_0-E)^{-1}$, а вертикальная черта, соединяющая j-ю и i-ю линии, — множитель $-V_{ij}$. Тогда диаграмма



представляет оператор

$$(-1)^5(H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1}V_{23}(H_0-E)^{-1}\times \\ \times V_{13}(H_0-E)^{-1}V_{23}(H_0-E)^{-1}.$$

На языке таких диаграмм легко описать, какие из членов (21) компактны.

Лемма 3А. Диаграмма представляет компактный оператор тогда и только тогда, когда она связна. Если диаграмма G связна, то оператор остается компактным и тогда, когда последний множитель $(H_0-E)^{-1}$ убирается.

Доказательство. Отметим, что мы интерпретируем символ $(H_0-E)^{-1}V_{ij}$ как (ограниченное) замыкание оператора, определенного на $D(H_0)$, или, иными словами, как сопряженный всюду определенного оператора $V_{ij}(H_0-\bar{E})^{-1}$. Если диаграмма несвязна, то, переименовывая частицы, мы можем считать, что линия 3 не связана с линиями 1 и 2. Тогда соответствующий оператор коммутирует с унитарным оператором, осуществляющим отображение $\langle r_1, r_2, r_3\rangle \mapsto \langle r_1+a, r_2+a, r_3+a\rangle$, так что этот оператор не компактен (задача 43).

С другой стороны, если G связна, то на ней найдутся две последовательные связки, которые различны. Переименовав линии, мы можем сделать, чтобы это были V_{12} и V_{23}. Тогда оператор, отвечающий G, после вычеркивания последнего множителя $(H_0-E)^{-1}$ примет вид $A[(H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1}V_{23}]B$, где A и B суть произведения сомножителей вида $(H_0-E)^{-1}V_{ij}$. Так как A и B ограничены, остается лишь показать, что $C=$ $=(H_0-E)^{-1}V_{12}(H_0-E)^{-1}V_{23}$ компактен. Мы будем работать в пространстве импульсов с переменными p и q, отвечающими относительным импульсам частиц 1, 2 и 2, 3, т. е. мы рассматриваем оператор $D=\mathcal{F}C\mathcal{F}^{-1}$, где $\mathcal{F}$ — преобразование Фурье, с переменными $\langle p, q\rangle$, дуальными к $\langle r_{12}, r_{23}\rangle$. Пусть $h_0(p, q)$ — кинетическая энергия, выраженная в переменных p и q:

$$h_0(p, q)=(2m_{12})^{-1}p^2+(2m_{23})^{-1}q^2-\mu_2^{-1}p\cdot q,$$

где $m_{ij}^{-1}=\mu_i^{-1}+\mu_j^{-1}$. Тогда

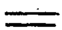
$$(D\psi)(p, q)=(2\pi)^{-3}\int(h_0(p, q)-E)^{-1}\hat{V}_{12}(p-p')(h_0(p', q)-E)^{-1}\times$$
$$\times\hat{V}_{23}(q-q')\psi(p', q')\,dp'\,dq'. \quad (22)$$

Так как E отрицательно, то $|h_0(p, q)-E|>c(p^2+q^2+1)$ с некоторой постоянной c. Следовательно, ядро (22) ограничено величиной

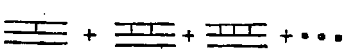
$$(2\pi)^{-3}c^{-2}(p^2+1)^{-1}\hat{V}_{12}(p-p')(q^2+1)^{-1}\hat{V}_{23}(q-q').$$

Так как $\hat{V}_{12}, \hat{V}_{23}\in L^2$, то это ядро принадлежит $L^2(\mathbb{R}^{12})$ и потому интегральный оператор (22) есть оператор Гильберта—Шмидта. Следовательно, D и C компактны. ∎

Это подсказывает нам, что, пробуя найти разложение $(H-$ $-E)^{-1}=A(E)+B(E)(H-E)^{-1}$ с компактным $B(E)$, мы должны в качестве $A(E)$ выбрать сумму всех несвязных диаграмм в формальном разложении (21), когда E отрицательно, а затем определить $A(E)$ с помощью аналитического продолжения на другие E. Чтобы проделать это продолжение, требуется замкнутое выражение для суммы несвязных диаграмм. Несвязные диаграммы естественно распадаются на четыре класса — когда ни одна из горизонтальных линий не связана с другой или же когда связана одна из трех возможных пар. В первый класс попадает только одна диаграмма

 $= (H_0-E)^{-1}$

Класс, в котором связаны линии 1 и 2, представлен суммой

 (23)

Если добавить к этой сумме предыдущую диаграмму, то мы получим сумму всех диаграмм для случая $V_{23}=V_{13}=0$. Значит, сумма (23) есть $(H_0+V_{12}-E)^{-1}-(H_0-E)^{-1}$. Вводя обозначения

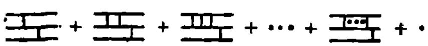
$$G_0(E)=(H_0-E)^{-1},$$
$$G_{ij}(E)=(H_0+V_{ij}-E)^{-1},$$
$$G(E)=(H_0+V-E)^{-1},$$

можно переписать (23) в виде $-G_{12}(E)V_{12}G_0(E)$. Это подсказывает нам следующее

Определение. Пусть $E\notin[\Sigma, \infty)$ есть комплексное число. **Несвязная часть резольвенты**, или кратко **несвязная часть** определяется формулой

$$D(E)=G_0(E)-\sum_{1<i<j<3}G_{ij}(E)V_{ij}G_0(E). \tag{24a}$$

Подобным образом можно исследовать и связные диаграммы. Назовем диаграмму **едва связной**, если она становится несвязной, когда мы вынем последнюю связку. Сумма едва связных диаграмм распадается на шесть классов, один из которых есть



а другие получаются перестановкой линий 1, 2, 3. Каждую связную диаграмму можно рассечь в единственной точке таким образом, что слева от деления будет стоять едва связная диаграмма. Все связные диаграммы можно построить, помещая слева едва связную диаграмму, а справа произвольную диаграмму. Поэтому формально, не отличая диаграмму от отвечающего ей оператора, получим

$\sum$ (все связные диаграммы) $=\sum$ (все едва связные диаграммы без последнего множителя $G_0(E)$) $\times\sum$ (все диаграммы).

Мы воспользовались символом $\sum(\ )$ для обозначения суммы всех диаграмм вида ( ) в формальном разложении (21). Так как $\sum$(все диаграммы) равна $(H-E)^{-1}$, будем искать замкнутое выражение для первого множителя. Сумма, отвечающая классу едва связных диаграмм, который мы нарисовали выше, очевидно, имеет вид

$$-[G_{12}(E)-G_0(E)]V_{23}=G_{12}(E)V_{12}G_0(E)V_{23}.$$

Определение. Пусть $E\notin[\Sigma, \infty)$ есть комплексное число. **Взаимодействие, связное по Вайнбергу**, или **ядро Вайнберга**, определяется как

$$I(E)=\sum_{\substack{j\neq k\neq i\\ i<j}}G_{ij}(E)V_{ij}G_0(E)(V_{jk}+V_{ik}). \tag{24b}$$

Теперь мы готовы к доказательству следующей леммы:

Лемма 4А. Функции $D(E)$ и $I(E)$ суть аналитические операторнозначные функции в области $\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$. Если $E\notin\sigma(H)$, то

$$(H-E)^{-1}=D(E)+I(E)(H-E)^{-1}. \tag{24c}$$

Более того, $I(E)$ компактно при $E\in\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$ и $\lim\limits_{E\to-\infty}\|I(E)\|=0$. Уравнение (24) называется уравнением **Вайнберга — ван Винтера.**

Доказательство. Поскольку $\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)\subset\bigcup\limits_{i<j}\rho(H_0+V_{ij})$, функции $D(E)$ и $I(E)$ аналитичны, если мы рассматриваем $G_0(E)V_{ij}$ как сопряженный ограниченного оператора $V_{ij}G_0(E)^*$, и аналогично для $G_{ij}(E)V_{kl}$. Выберем E настолько отрицательным, что ряд теории возмущений (21) абсолютно сходится по операторной норме. Тогда мы можем перестроить сумму диаграмм, как хотим, и убедиться, что (24c) выполнено. Затем уравнение (24c) аналитически продолжается на все $E\notin\sigma(H)\cup[\Sigma, \infty)$, а это последнее объединение совпадает с $\sigma(H)$ по лемме 2. Так как $|G_0(E)V_{ij}\|\to 0$ при $E\to-\infty$, то $\lim\limits_{E\to-\infty}\|I(E)\|=0$. Наконец, заметим, что если E столь отрицательно, что ряд теории возмущений для $I(E)$ сходится, то $I(E)$ компактно вследствие леммы 3А и того основного факта, что множество компактных операторов замкнуто по норме (теорема VI. 12а). То, что $I(E)$ компактен при всех $E\in\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$, следует из леммы 5 ниже. ∎

Лемма 5. Пусть $f(z)$ — операторнозначная функция в связной области $R\subset\mathbb{C}$. Если $f(z)$ компактно при z из открытого множества $S\subset R$, то $f(z)$ компактно при всех $z\in R$.

Доказательство. Предположим, что $f(z_0)$ не компактно. Так как множество компактных операторов замкнуто, то по теореме Хана — Банаха можно найти такой линейный функционал $L\in\in\mathscr{L}(\mathscr{H})^*$, что $L(f(z_0))=1$ и $L(A)=0$, если A компактен. Тогда $L(f(z))$ аналитично, $L(f(z))=0$, если $z\in S$, и $L(f(z_0))=1$. Но так как S открыто, то это невозможно. Мы заключаем, что $f(z_0)$ компактно при всех z_0. ∎

Эта последняя лемма может быть доказана также с помощью аналитического продолжения степенных рядов.

Доказательство теоремы XIII. 17 в случае $N=3$, $V_{ij}\in L^2$. Так как $I(E)$ — компактная операторнозначная функция на $\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$ и $1-I(E)$ обратим, когда E — большое по абсолютной величине отрицательное число, то из аналитической теоремы Фредгольма (теорема VI.14) следует, что найдется дискретное множество $S\subset\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$, такое, что $(1-I(E))^{-1}$ существует и аналитична в $\mathbb{C}\setminus([\Sigma, \infty)\cup S)$ и мероморфна в $\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$ с вычетами конечного ранга. Следовательно, $[1-I(E)]^{-1}D(E)\equiv f(E)$ аналитична в $\mathbb{C}\setminus([\Sigma, \infty)\cup S)$ с вычетами конечного ранга в точках S. Пусть $E\notin S$, $\operatorname{Im} E\neq 0$. Тогда, в силу (24), $f(E)=(H-E)^{-1}$. В частности, $f(E)(H-E)\psi=\psi$ при любом $\psi\in D(H)$. По аналитическому продолжению это выполняется для любого $E\notin S\cup[\Sigma, \infty)$. Мы заключаем, что при каждом таком E оператор $H-E$ имеет ограниченный обратный. Следовательно, любая точка $\sigma(H)\setminus[\Sigma, \infty)$ должна принадлежать S, так что $\sigma(H)\setminus[\Sigma, \infty)$ состоит из изолированных точек, причем лишь Σ, возможно, является предельной точкой. Наконец, так как $(H-E)^{-1}$ имеет вычеты конечного ранга в любой точке $\lambda\in S$, мы заключаем, что спектральный проектор

$$P_\lambda=-\frac{1}{2\pi i}\oint_{|E-\lambda|=\varepsilon}(H-E)^{-1}dE$$

конечномерен, т. е. любое $\lambda\in\sigma(H)\setminus[\Sigma, \infty)$ принадлежит $\sigma_{\text{disc}}(H)$. ∎

Доказательство общего случая не требует никаких дополнительных аналитических идей, однако нам придется преодолеть два затруднения: (1) V_{ij} должно быть всего лишь из $R+(L^\infty)_\varepsilon$; (2) диаграммный анализ при $N>3$ не так прост, и нам придется развить некоторую дополнительную комбинаторную технику. Так как V_{ij} в общем случае ограничены лишь в смысле форм, нам придется работать с выражениями типа $(H_0-E)^{-1/2}V_{ij}(H_0-E)^{-1/2}$, а не с $V_{ij}(H_0-E)^{-1}$. Пересмотрим поэтому наши графические правила. В данной диаграмме с последовательными попарными связками при n горизонтальных линиях сопоставим каждой связке между линиями i и j множитель $-G_0^{1/2}(E)V_{ij}G_0^{1/2}(E)$ и больше никаких множителей, отвечающих горизонтальным линиям. При этом оператор, который мы прежде сопоставляли диаграмме, изменяется так: с каждого конца изымается по множителю $G_0^{1/2}$. Под $G_0^{1/2}$ мы понимаем оператор, действующий в пространстве импульсов как умножение на $(p^2-E)^{-1/2}$, где выбирается та ветвь квадратного корня, которая положительна при $E<0$. Мы рассмотрим случай произвольного $N\geqslant 3$, и (21) будет, следовательно, означать аналогичное общее разложение для таких N.

Лемма 3В. Пусть $V_{ij}\in R+(L^\infty)_\varepsilon$. Пусть G — одна из диаграмм в формальном разложении (21). Оператор, сопоставляемый G в соответствии *с только что сформулированными диаграммными правилами*, компактен тогда и только тогда, когда G связна.

Доказательство. Как и прежде, если диаграмма несвязна, то она не компактна, так что предположим, что G — некоторая конкретная связная диаграмма. Пусть $V_{ij} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ при всех i, j. Сначала мы покажем, что в этих условиях (на самом деле достаточно, чтобы $V_{ij} \in L^2$) соответствующий оператор G есть оператор Гильберта — Шмидта и, следовательно, компактен.

Мы проведем доказательство индукцией по N — числу линий диаграммы. При $N=1$ гильбертово пространство есть $\mathbb{C}$, так что оператор (который на этот раз есть 1), разумеется, Гильберта — Шмидта. Итак, предположим, что все связные диаграммы с менее чем N линиями приводят к операторам Гильберта — Шмидта.

Сначала заметим, что можно считать G едва связным, так как всякий оператор G может быть записан в виде $G = G_1 G_2$, где G_2 ограниченный, а G_1 едва связный. После переименования линий мы можем считать, что последняя связка в G соединяет линии i и $i+1$ и что если ее убрать, то получившаяся диаграмма распадется на две связные части — одну, содержащую линии $1, \ldots, i$, и другую, содержащую линии $i+1, \ldots, N$.

Введем новые координаты $R_1, \ldots, R_{N-1}$, полагая $R_j = r_{j+1} - r_j$, и пусть $P_1, \ldots, P_{N-1}$ — соответствующие операторы импульсов, так что P_j есть $-i\nabla_{R_j}$; частная производная берется при фиксированных $R_1, \ldots, R_{j-1}, R_{j+1}, \ldots, R_{N-1}$. Пусть W_{jk} — функция, задаваемая посредством $\hat{W}_{jk} = |\hat{V}_{jk}|$; определим оператор $A(jk)$ в виде

$$A(jk) = \begin{cases} \left(\sum\limits_{l \leqslant i-1} P_l^2 + 1\right)^{-1/2} W_{jk} \left(\sum\limits_{l \leqslant i-1} P_l^2 + 1\right)^{-1/2}, & \text{если } j,\ k \leqslant i, \\ (P_i^2 + 1)^{-1/2} W_{i,\,i+1} (P_i^2 + 1)^{-1/2}, & \text{если } j = i,\ k = i+1, \\ \left(\sum\limits_{l \geqslant i+1} P_l^2 + 1\right)^{-1/2} W_{jk} \left(\sum\limits_{l \geqslant i+1} P_l^2 + 1\right)^{-1/2}, & \text{если } j,\ k \geqslant i+1. \end{cases}$$

Пусть $\tilde{G}$ — оператор, полученный заменой каждого сомножителя $G_0^{1/2}(E) V_{jk} G_0^{1/2}(E)$ в G на $A(jk)$. Прежде всего мы утверждаем, что $\tilde{G}$ есть оператор Гильберта — Шмидта. Действительно, при разложении

$$L^2(\mathbb{R}^{3N-3}) = L^2(\mathbb{R}^{3i-3}) \otimes L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^{3N-3i-3}),$$

соответствующем разбиению $\langle R_1, \ldots, R_{i-1} \rangle$, R_i, $\langle R_{i+1}, \ldots, R_{N-1} \rangle$, $\tilde{G}$ есть тензорное произведение $A \otimes B \otimes C$, где A и C — операторы, относящиеся к диаграмме с i и $N-i$ линиями соответственно. Можно явно убедиться, что B — оператор Гильберта — Шмидта на $L^2(\mathbb{R}^3)$, например, записав его ядро в p-пространстве (т. е. рассмотрев $\mathcal{F} B \mathcal{F}^{-1}$), в то время как A и C суть операторы Гильберта—Шмидта в $L^2(\mathbb{R}^{3l-3})$ и $L^2(\mathbb{R}^{3N-3l-3})$ соответственно, согласно предположению индукции. Поэтому $\tilde{G}$ есть оператор Гильберта—Шмидта.

Положим теперь $g=\mathcal{F}G\mathcal{F}^{-1}$ и $\tilde{g}=\mathcal{F}\tilde{G}\mathcal{F}^{-1}$. Так как $|\hat{V}_{ij}|\leqslant \leqslant \hat{W}_{ij}$ и $|H_0-E|\geqslant c_0\left(\sum_{l=1}^{N+1} P_l^2+1\right)$ с некоторой константой c_0, то ядро g мажорируется ядром $\tilde{g}$ умноженным на какую-то константу. Так как $\tilde{g}$—оператор Гильберта—Шмидта, то таков же и g, а значит, и G.

Теперь допустим, что $V_{ij}\in R+(L^\infty)_\varepsilon$. Мы можем выбрать $V_{ij}^{(n)}\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ так, чтобы было $\|(H_0-E)^{-1/2}(V_{ij}-V_{ij}^{(n)})(H_0-E)^{-1/2}\|\to \to 0$ при $n\to\infty$ (задача 44). Для любой данной связной диаграммы G пусть $g^{(n)}$—сопоставляемые ей операторы, если мы пользуемся потенциалами $V_{ij}^{(n)}$, и g—соответствующий оператор с V_{ij}. Так как все $g^{(n)}$ компактны, то и g компактен. ∎

Обратимся теперь к комбинаторике, необходимой для нахождения $D_R(E)$—суммы всех несвязных диаграмм и $I_R(E)$—суммы всех едва связных диаграмм.

Определение. Пусть G—диаграмма с N занумерованными горизонтальными линиями и некоторым числом вертикальных связок между парами таких линий; G называется **k-связной**, если она имеет k связных компонент. **Кластерное разложение** $D(G)$, отвечающее G, есть семейство множеств линий, связанных друг с другом.

Так, диаграмма на рис. XIII.3 2-связна и $D(G)=\{\{1, 2, 4\}, \{3, 5\}\}$.

Определение. **Ассоциированная цепочка** k-связной диаграммы есть множество кластерных разложений $D_N, \ldots, D_k$, определяемое следующим образом. Пусть G имеет l связок. Пусть $G_0, \ldots \ldots, G_l$—диаграммы, полученные сохранением первых $0, 1, \ldots, l$ связок соответственно (считая слева). Рассмотрим кластерные разложения $D(G_0), \ldots, D(G_l)$. Тогда пусть D_m есть $(N+1-m)$-е *отличное от других* разложение в семействе $D(G_0), \ldots, D(G_l)$. Оно содержит m кластеров. Ассоциированную цепочку диаграммы G мы будем обозначать через $S(G)$.

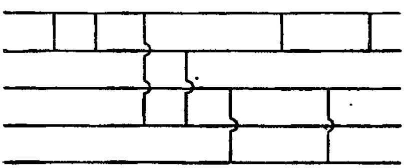


Рис. XIII.3. Двусвязная диаграмма.

Так, для диаграммы на рис. XIII.3

$D_5=\{\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4\}, \{5\}\}$,
$D_4=\{\{1, 2\}, \{3\}, \{4\}, \{5\}\}$,
$D_3=\{\{1, 2, 4\}, \{3\}, \{5\}\}$,
$D_2=\{\{1, 2, 4\}, \{3, 5\}\}\equiv D(G)$.

Заметим, что $D_5 = D(G_0)$; $D_4 = D(G_1) = D(G_2)$; $D_3 = D(G_3) = D(G_4)$; $D_2 = D(G_5) = D(G_6) = D(G_7) = D(G_8)$.

Наконец, введем еще одно

Определение. **Цепочка S** есть семейство $D_N, D_{N-1}, \ldots, D_k$ кластерных разложений $\{1, \ldots, N\}$, таких, что $D_{j+1} \triangleright D_j$ и D_j имеет j кластеров. Цепочка называется **связной**, если $k=1$, и **несвязной**, если $k > 1$. Число k называется **индексом** цепочки, и мы будем писать $i(S) = k$.

Напомним, что по определению из § XI.5 $D \triangleright D'$ означает, что каждый кластер в D' есть объединение кластеров из D. Значит, если S — цепочка, то D_j получается из D_{j+1} объединением какой-либо пары кластеров. Далее, iDm означает, что i и m лежат в одном и том же кластере из D, а $\sim iDm$ означает, что они лежат в разных кластерах.

Чтобы просуммировать все несвязные диаграммы, мы сначала просуммируем все диаграммы с одной и той же ассоциированной цепочкой, а затем найдем сумму по всем цепочкам (их конечное число). В последующем тексте символы

$$\sum_D \quad \text{и} \quad \sum_{D \sim D'}$$

означают соответственно суммы по парам i, j с $i < j$ и iDj (соответственно iDj и $\sim iD'j$).

Определение. Пусть $S_0 = \langle D_N, D_{N-1}, \ldots, D_k \rangle$ — некоторая фиксированная цепочка, и пусть E настолько отрицательно, что

$$\sum_{1 \le i < j \le N} \| (H_0 - E)^{-1/2} V_{ij} (H_0 - E)^{-1/2} \| < 1. \tag{25}$$

Для данного кластерного разложения D определим **редуцированную резольвенту** $R_D(E)$, полагая

$$R_D(E) = \left[1 + (H_0 - E)^{-1/2} \left(\sum_D V_{ij}\right) (H_0 - E)^{-1/2}\right]^{-1}. \tag{26}$$

Оперделим $I_{D_m D_{m-1}}$ формулой

$$I_{D_m D_{m-1}} = (H_0 - E)^{-1/2} \left(-\sum_{D_{m-1} \sim D_m} V_{ij}\right) (H_0 - E)^{-1/2}. \tag{27}$$

Наконец, пусть $R_{S_0}(E)$ — сходящаяся сумма всех диаграмм G с $S(G) = S_0$. Сумма (27) может быть описана следующим образом: D_{m-1} отличается от D_m тем, что два кластера C_l и C_p в D_m заменены одним $C_q = C_p \cup C_l$ в D_{m-1}. Сумма в (27) берется по таким $i < j$, что $i \in C_l$, $j \in C_p$ или $i \in C_p$, $j \in C_l$.

Лемма 6.

$$R_{S_0}(E) = R_{D_N}(E) I_{D_N D_{N-1}} R_{D_{N-1}}(E) I_{D_{N-1} D_{N-2}} \cdots I_{D_{k+1} D_k} R_{D_k}(E). \tag{28}$$

Доказательство. Произвольная диаграмма G с $S(G)=S_0$ может быть описана следующим образом. Первая связка должна изменять D_N на D_{N-1} и, таким образом, должна иметь вид $-(H_0-E)^{-1/2}V_{ij}(H_0-E)^{-1/2}$ с $\sim iD_N j$ и $iD_{N-1}j$. Потом следует произвольное число связок, не меняющих соответствующих кластеров. Это должны быть связки i, j с $iD_{N-1}j$. Затем идет связка, меняющая D_{N-1} на D_{N-2}, и т. д. Если мы напишем $W_{ij}=-(H_0-E)^{-1/2}V_{ij}(H_0-E)^{-1/2}$, то увидим, что

$$R_{S_0}(E)=\Big(\sum_{D_{N-1}\sim D_N}W_{ij}\Big)\Big(\sum_{l=0}^{\infty}\Big(\sum_{D_{N-1}}W_{ij}\Big)^l\Big)\Big(\sum_{D_{N-2}\sim D_{N-1}}W_{ij}\Big)\ldots .$$

Так как $\sum_{i<j}\|W_{ij}\|<1$, то все бесконечные суммы сходятся и мы получаем (28). ∎

Пусть $\mathcal{H}_{+1}$, $\mathcal{H}_{-1}$ — шкала пространств, ассоциированных с H_0 (см. § VIII.6). Пусть D — кластерное разложение с $\#(D)\geqslant 2$, и пусть $E\in\mathbb{C}\setminus[\Sigma,\infty)$. Тогда $E\notin\sigma(H_D)$. По построению сумм квадратичных форм $(H_D-E)^{-1}$ есть ограниченное отображение $\mathcal{H}_{-1}$ на $\mathcal{H}_{+1}$, так что

$$(H_0-E)^{+1/2}(H_D-E)^{-1}(H_0-E)^{+1/2}=$$
$$=\Big[1+(H_0-E)^{-1/2}\sum_{D}V_{ij}(H_0-E)^{-1/2}\Big]^{-1}$$

определяет ограниченный оператор, который мы обозначим $R_D(E)$ в согласии с определением (26). При $E\notin[\Sigma,\infty)$ *определим* $R_{S_0}(E)$ формулой (28), если S_0 — цепочка с $i(S_0)\geqslant 2$. Из леммы 6 видно, что когда E отрицательно и велико по абсолютной величине, это определение согласуется с определением через сумму всех диаграмм с цепочкой S_0. Теперь мы можем определить все величины, входящие в общее уравнение Вайнберга — ван Винтера. Символ $\sum_{S,\ i(S)=2}$ означает сумму по всем цепочкам с индексом 2.

Определение. **Редуцированная несвязная часть** определяется при $E\notin[\Sigma,\infty)$ формулой

$$D_R(E)=\sum_{S,\ i(S)\geqslant 2}R_S(E). \tag{29a}$$

Симметризованное ядро Вайнберга определяется формулой

$$I_R(E)=-\sum_{S,\ i(S)=2}R_S(E)\Big[\sum_{\sim D_2}(H_0-E)^{-1/2}V_{ij}(H_0-E)^{-1/2}\Big]. \tag{29b}$$

В (29b) D_2 относится к последнему разложению в цепочке S, входящей в частную сумму. Заметим, что в (29) сумма по цепочкам *конечна*.

Лемма 4B. Функции $D_R(E)$ и $I_R(E)$ аналитичны в $\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$ и $I_R(E)$ — компактная операторнозначная функция, причем $\lim\limits_{E\to-\infty}\|I_R(E)\|=0$. При $E\notin\sigma(H)$ положим

$$R(E)\equiv R_{\{\{1,\ldots,N\}\}}(E)=\left[1+(H_0-E)^{-1/2}\left(\sum_{i<j}V_{ij}\right)(H_0-E)^{-1/2}\right]^{-1},$$

где $\{\{1,\ldots,N\}\}$ относится к разложению D и содержит только один кластер. Тогда при всех $E\notin\sigma(H)$

$$R(E)=D_R(E)+I_R(E)\,R(E). \tag{29c}$$

Доказательство. Любая D с $\#(D)\geqslant 2$ имеет $\sigma(H_D)\subset[\Sigma, \infty)$, так что $I_R(E)$ и $D_R(E)$ аналитичны в $\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$. Для всех E с достаточно большой по абсолютной величине отрицательной вещественной частью $I_R(E)$ может быть разложено в сходящуюся по норме сумму всех едва связных диаграмм. По лемме 3B, $I_R(E)$ компактно при всех таких E, так что, в силу леммы 5, $I_R(E)$ компактно при всех $E\in\mathbb{C}\setminus[\Sigma, \infty)$. Из ряда теории возмущений следует также, что $\lim\limits_{E\to-\infty}\|I_R(E)\|=0$.

Заметим далее, что между цепочками S с $i(S)=2$ и цепочками $\tilde{S}$ с $i(\tilde{S})=1$ существует взаимно однозначное соответствие, так как единственное разложение с одним элементом есть $D_1\equiv\equiv\{\{1,\ldots,N\}\}$, а также что $R_{D_1}=R$. Поэтому если $S=\langle D_N,\ldots\ldots, D_2\rangle$ и $\tilde{S}=\langle D_N,\ldots, D_1\rangle$, то из леммы 6 следует, что

$$R_{\tilde{S}}(E)=-R_S(E)\Big[\sum_{\sim D_2}(H_0-E)^{-1/2}V_{ij}(H_0-E)^{-1/2}\Big]R(E).$$

Суммируя по всем $\tilde{S}$ (или, эквивалентно, по всем S), мы увидим, что

$$\sum_{\tilde{S},\, i(\tilde{S})=1}R_{\tilde{S}}(E)=I_R(E)\,R(E).$$

При всех достаточно отрицательных E ряд теории возмущений (21) сходится, так что $R(E)$ есть сумма по всем диаграммам; следовательно, суммируя сначала по диаграммам в каждой фиксированной цепочке, а затем по цепочкам, получим, что

$$R(E)=\sum_{S,\, i(S)\geqslant 2}R_S(E)+\sum_{\tilde{S},\, i(\tilde{S})=1}R_{\tilde{S}}(E).$$

Это доказывает (29c) при больших по абсолютной величине отрицательных E. По аналитическому продолжению это справедливо и при $E\notin\sigma(H)\cup[\Sigma, \infty)=\sigma(H)$ (по лемме 2). ∎

Уравнение (29) называется **уравнением Вайнберга — ван Винтера.**

Доказательство теоремы XIII.17, общий случай. Доказательство в основном такое же, как в случае $N=3$; $V_{ij} \in L^2$. В силу леммы 4B и аналитической теоремы Фредгольма $(1-I_R(E))^{-1}$ существует и аналитична в $\mathbb{C} \setminus ([\Sigma, \infty) \cup S)$, где S — дискретное множество в $\mathbb{C} \setminus [\Sigma, \infty)$. Следовательно,

$$f(E) = (H_0 - E)^{-1/2} [1 - I_R(E)]^{-1} D_R(E) (H_0 - E)^{-1/2}$$

существует в $\mathbb{C} \setminus ([\Sigma, \infty) \cup S)$ и имеет вычеты конечного ранга в точках из S. Когда $\operatorname{Im} E \neq 0$, $f(E) = (H-E)^{-1}$, так что $f(E) \times (H-E)\psi = \psi$ при всех $\psi \in D(H)$. По аналитическому продолжению $\sigma(H) \subset [\Sigma, \infty) \cup S$, и точки S имеют конечномерные спектральные проекторы. Следовательно, $\sigma_{ess}(H) \subset [\Sigma, \infty)$. По лемме 2, $[\Sigma, \infty) \subset \sigma(H)$, так что $\sigma_{ess}(H) = [\Sigma, \infty)$. ∎

Как непосредственное следствие ХВЖ-теоремы получается

Теорема XIII.18. Если H — оператор Шредингера N частиц за вычетом энергии движения центра масс, и если $V_{ij} \in L^2 + L^r$ $(r < 3)$ при всех i, j, то $\sigma_{ac}(H) = [\Sigma, \infty)$, где Σ задано формулой (20b).

Доказательство. Из теоремы XI.34 и соотношений

$$e^{-iHt}\Omega_D^{\pm} = \Omega_D^{\pm} e^{-iH_Dt} \quad \text{и} \quad (\Omega_D^{+})^* \Omega_D^{+} = 1$$

следует, что $\sigma_{ac}(H) \supset \sigma_{ac}(H_D)$ при всех D. Если $\#(D) \geqslant 2$, то $\sigma_{ac}(H_D) = \sigma(H_D) = [\Sigma_D, \infty)$, так что $\sigma_{ac}(H) \supset [\Sigma, \infty)$. Но, с другой стороны, $\sigma_{ac}(H) \subset \sigma_{ess}(H) = [\Sigma, \infty)$ по ХВЖ-теореме. ∎

В заключение этого раздела приведем второе доказательство «трудной» части теоремы XIII.17, т. е. того, что $\sigma_{ess}(H) \subset [\Sigma, \infty)$. Это доказательство опирается на совсем другие идеи, но в его основе лежит то же условие компактности.

Лемма 7. Пусть H — самосопряженный оператор, такой, что $f(H)$ компактен при любой непрерывной функции f с компактным носителем, удовлетворяющим условию $\operatorname{supp} f \subset (-\infty, \Sigma)$. Тогда $\sigma_{ess}(H) \subset [\Sigma, \infty)$.

Доказательство. Это часть теоремы XIII.77, доказанной в § 14. ∎

Второе доказательство того, что $\sigma_{ess}(H) \subset [\Sigma, \infty)$, опирается на две идеи. Во-первых, ограниченные области не могут вносить вклад в $\sigma_{ess}(H)$, и, во-вторых, вблизи бесконечности H должен выглядеть как некоторый H_D. Для воплощения первой идеи выберем функцию $\varphi \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}^{3N-3})$ со свойством $0 \leqslant \varphi \leqslant 1$ и такую, что $\varphi(x) = 1$ при $|x| \leqslant 1$ и $\varphi(x) = 0$ при $|x| \geqslant 2$. Определим $j_{<n}(x) = \varphi(xn^{-1})$ и $j_{\geqslant n} = 1 - j_{<n}$. Тогда первая идея выражается следующей леммой.

Лемма 8. Пусть H удовлетворяет всем условиям теоремы XIII.17. Тогда для всякой непрерывной функции f с компактным носителем $j_{<n} f(H)$ компактен при любом n.

Доказательство. Выберем $c < \inf \sigma(H)$ и ограниченную непрерывную функцию g, такую, что $g(x) = (x-c)^{1/2} f(x)$ при $x \in \sigma(H)$. Тогда

$$j_{\leqslant n} f(H) = j_{<n} (H-c)^{-1/2} g(H) =$$
$$= j_{<n} (H_0+1)^{-1/2} [(H_0+1)^{1/2} (H-c)^{-1/2}] g(H).$$

Таким образом, достаточно доказать, что $j_{<n}(H_0+1)^{-1/2}$ компактен, а это следует из теоремы XI.20 или задачи 41. ∎

Для выражения того, что вблизи бесконечности H выглядит как некоторый H_D, по крайней мере в некоторых трубах, полезна такая лемма:

Лемма 9. Пусть A_n — семейство ограниченных операторов с $\sup_n \|A_n\| < \infty$, и пусть H_1, H_2 — два самосопряженных оператора, спектры которых $\sigma(H_1)$ и $\sigma(H_2)$ содержатся в $[c, \infty)$ и которые удовлетворяют условию

$$\lim_{n \to \infty} \|A_n [(H_1-z)^{-1} - (H_2-z)^{-1}]\| = 0$$

при всех z из какого-либо открытого подмножества в $\mathbb{C} \setminus [c, \infty)$. Тогда

$$\lim_{n \to \infty} \|A_n [f(H_1) - f(H_2)]\| = 0$$

для любой непрерывной функции f с компактным носителем.

Доказательство. Доказательство похоже на доказательство теоремы VIII.20a. По теореме Витали о сходимости первое утверждение о пределе выполнено при всех $z \in \mathbb{C} \setminus [c, \infty)$, причем равномерно на компактных подмножествах в $\mathbb{C} \setminus [c, \infty)$. Пользуясь интегральной формулой Коши заключаем, что

$$\lim_{n \to \infty} \|A_n [(H_1-c+1)^{-m} - (H_2-c+1)^{-m}]\| = 0.$$

Утверждение леммы следует теперь из теоремы Стоуна — Вейерштрасса, вследствие которой $f(x)$ может быть равномерно на $[c, \infty)$ аппроксимирована полиномами по $(x-c+1)^{-1}$. ∎

Далее выделим те области, где H и H_D похожи. Нам потребуются лишь D с $\#(D) = 2$, так что пусть D_a, $a = 1, 3, \ldots, 2^{N-1}-1$, соответствуют всем различным способам разбиения $\{1, 2, \ldots, N\}$ на два непустых подмножества $C_a^{(1)}$ и $C_a^{(2)}$. Положим $H_a = H_{D_a}$, $I_a = I_{D_a}$ и

$$|x|_0 = \Big(\sum_{i<j} |x_i - x_j|^2\Big)^{1/2},$$
$$|x|_a = \min\{|x_i - x_j| \mid i \in C_a^{(1)},\ j \in C_a^{(2)}\}.$$

Лемма 10. Пусть $d_N=(N-1)^{-3/2}N^{-1/2}\sqrt{2}$. Тогда при любом $x\in\mathbb{R}^{3N-3}$ существует такое a, что $|x|_a\geqslant d_N|x|_0$. В частности, существуют такие функции j_a, $a=1, 3, \ldots, 2^{N-1}-1$, что

(a) $0\leqslant j_a\leqslant 1, \quad \sum\limits_a j_a(x)\equiv 1$;

(b) $j_a(\lambda x)=j_a(x)$ при всех $\lambda\in(0, \infty)$;

(c) $j_a\in C^\infty$ на $\mathbb{R}^{3N-3}\setminus\{0\}$;

(d) $\operatorname{supp} j_a\subset\{x\mid |x|_a\geqslant {}^1/_2 d_N|x|_0\}$.

Доказательство. Это геометрическое доказательство, совершенно такое же, как то, которое было приведено при рассмотрении теории рассеяния Хаага—Рюэля (§ XI.16). При данном x пусть i и j — две такие точки, что $|x_i-x_j|\geqslant\sqrt{2}(N-1)^{-1/2}N^{-1/2}|x|_0$. Пусть $\pi_1, \ldots, \pi_N$ суть N плоскостей, проходящих через точки $x_1, \ldots, x_N$ перпендикулярно x_i-x_j. Очевидно, что они делят область между π_i и π_j на не более чем $N-1$ слоев, один из которых должен иметь толщину по крайней мере $(N-1)^{-1}|x_i-x_j|$. Выбрав $C_a^{(1)}$ и $C_a^{(2)}$ так, чтобы они отвечали частицам по разные стороны от этого слоя, получим $|x|_a\geqslant(N-1)^{-1}|x_i-x_j|$.

Чтобы построить функции j_a, рассмотрим сначала открытые подмножества на сфере $S\equiv\{x\mid |x|_0=1\}$ вида $R_a=\{x\mid |x|_a\geqslant {}^1/_2 d_N, |x|_0=1\}$, которые покрывают S по предыдущему построению. Обычным образом найдем C^∞-функции $\tilde{j}_a$ на S с $\operatorname{supp}\tilde{j}_a\subset R_a$, $0\leqslant\tilde{j}_a$ и $\sum\tilde{j}_a\equiv 1$. Положим $j_a(x)=\tilde{j}_a(|x|_0^{-1}x)$. ∎

Теперь можно придать точный смысл словам: вблизи бесконечности H выглядит как некоторый H_a.

Лемма 11. Фиксируем $a=1, \ldots, 2^{N-1}-1$. При любом $z\notin\sigma(H)\cup\sigma(H_a)$

$$\lim_{n\to\infty}\|j_{\geqslant n}\, j_a[(H-z)^{-1}-(H_a-z)^{-1}]\|=0.$$

Доказательство. Напишем

$$j_{\geqslant n}\, j_a[(H-z)^{-1}-(H_a-z)^{-1}]\equiv-(H-z)^{-1}I_a j_a j_{\geqslant n}(H_a-z)^{-1}+ \\ +[(H-z)^{-1}, j_{\geqslant n}\, j_a]\,I_a(H_a-z)^{-1},$$

и воспользуемся тем, что $[(H-z)^{-1}, f]=-(H-z)^{-1}[H_0, f](H-z)^{-1}$; тогда достаточно доказать, что

$$\|(H_0+1)^{-1/2}I_a j_a j_{\geqslant n}(H_0+1)^{-1/2}\|\to 0 \qquad (29.1)$$

и

$$\|(H_0+1)^{-1/2}[H_0, j_{\geqslant n}\, j_a](H_0+1)^{-1/2}\|\to 0. \qquad (29.2)$$

Так как $j_a j_{\geqslant n}$ имеет носитель в области, где $|x|_a\geqslant {}^1/_2 d_N n$, то (29.1) следует из того, что $V_{ij}\in R+L_\varepsilon^\infty$. А (29.2) следует из того, что

$$\|\nabla(j_{\geqslant n}\, j_a)\|_\infty\leqslant\|j_{\geqslant n}\nabla j_a\|_\infty+\|\nabla j_{\geqslant n}\|_\infty=Cn^{-1}\to 0. \ ∎$$

Второе доказательство теоремы XIII.17. Теперь мы дадим второе доказательство того, что $\sigma_{ess}(H) \subset [\Sigma, \infty)$. Так как $\sum j_a = j_{<n} + j_{\geqslant n} = 1$, то

$$f(H) = f(H)\, j_{<n} + \sum_a [f(H) - f(H_a)]\, j_a j_{\geqslant n} + \sum_a f(H_a)\, j_a j_{\geqslant n}. \tag{29.3}$$

Пусть f — непрерывная функция с компактным носителем и с $\operatorname{supp} f \subset (-\infty, \Sigma]$. Так как $\sigma(H_a) \subset [\Sigma, \infty)$, то $f(H_a) = 0$, и потому последний член в (29.3) есть нуль. По леммам 9 и 11 второй член в (29.3) стремится к нулю по норме, когда $n \to \infty$. По лемме 8 первый член компактен. Следовательно, $f(H)$ компактен для таких f. С помощью леммы 7 заключаем, что $\sigma_{ess}(H) = [\Sigma, \infty)$. ∎

Отметим, наконец, что (29.3) полезно в тех случаях, когда мы ограничиваемся каким-либо подпространством с определенной симметрией. Вот абстрактная формулировка:

Теорема XIII.17′. Пусть H — оператор, удовлетворяющий всем предположениям теоремы XIII.17. Пусть P — проектор на инвариантное подпространство оператора H и P_a, $a = 1, \ldots, 2^{N-1} - 1$, — проектор на некоторое инвариантное подпространство оператора H_a, содержащее $P\mathscr{H}$. Пусть $\Sigma_p = \min\limits_a \inf \sigma(H_a P_a)$. Тогда $\sigma_{ess}(HP) \subset [\Sigma_p, \infty)$.

Доказательство. Очевидно, что $\Sigma_p \leqslant 0$, так как $0 \in \sigma(H_a P_a)$. Следовательно, для всякой f с носителем в $(-\infty, \Sigma_p)$ имеем $Pf(H) = f(PH)$ и $P_a f(H_a) = f(P_a H_a) = 0$. Так как по предположению $P = PP_a$, то на основании (29.3)

$$f(PH) = Pf(H)\, j_{<n} + P \sum_a [f(H) - f(H_a)]\, j_a j_{\geqslant n}.$$

Так же как в предыдущем доказательстве, заключаем, что $f(PH)$ компактен и, следовательно, $\sigma_{ess}(HP) \subset [\Sigma_p, \infty)$. ∎

Пример. Пусть H — гамильтониан атома, который получается вычитанием движения центра масс из

$$\tilde{H} = -\sum_{i=1}^{N-1} (2\mu)^{-1} \Delta_i - (2M)^{-1} \Delta_N - Z \sum_{i=1}^{N-1} |r_i - r_N|^{-1} + \\ + \sum_{i<j\leqslant N-1} |r_i - r_j|^{-1},$$

и пусть P — проектор на все функции, антисимметричные относительно перестановки r_i, $i = 1, \ldots, N-1$. Для всякого a пусть P_a — проектор на все функции, антисимметричные относительно перестановки двух электронов в одной $C_j^{(a)}$. Тогда из теоремы XIII.17′ следует, что $\sigma_{ess}(HP) \subset [\Sigma_P, \infty)$, а последнее множество, вообще говоря, строго меньше, чем $[\Sigma, \infty)$. Легко показать (задача 46), что в этом случае $[\Sigma_P, \infty) \subset \sigma_{ess}(HP)$.

XIII.6. Отсутствие сингулярного спектра I: общая теория

Спектральный анализ какого-либо оператора A сводится к описанию пяти множеств: $\sigma_{ess}(A)$, $\sigma_{disc}(A)$, $\sigma_{ac}(A)$, $\sigma_{sing}(A)$, $\sigma_{pp}(A)$. Для широких классов операторов Шредингера H нам удалось описать $\sigma_{ess}(H)$ и $\sigma_{ac}(H)$. Точное определение $\sigma_{disc}(H)$ — это довольно сложное дело, но мы видели, как можно воспользоваться принципом минимакса для получения обширных сведений об этом спектре. Осталось рассмотреть $\sigma_{sing}(H)$ и $\sigma_{pp}(H)$. Мы обсудим вопрос о доказательстве равенства $\sigma_{pp} = \sigma_{disc}$ в § 13. Следующие пять разделов будут посвящены трудному вопросу о $\sigma_{sing}(H)$. Проведенное в § XI.3 обсуждение асимптотической полноты позволяет думать, что $\sigma_{sing}(H) = \varnothing$, и наша главная цель будет состоять в доказательстве этого для различных классов операторов Шредингера.

Как уже подчеркивалось, существует тесная связь между доказательством отсутствия сингулярного спектра и теорией рассеяния. На самом деле уже метод разложения по собственным функциям из § XI.6 кое-что говорит о сингулярном спектре. В общем случае, когда $V \in L^1 \cap R$, мы знаем, что σ_{sing} принадлежит исключительному множеству $\mathscr{E}$, так что σ_{sing} имеет меру Лебега нуль. В двух случаях: когда $V \in L^1 \cap R$ и $\|V\|_R < 4\pi$ и когда $Ve^{a|x|} \in R$ при некотором $a > 0$ — нам известно, что $\mathscr{E}$ дискретно, так что $\sigma_{sing} = \varnothing$. В этом разделе мы выведем фундаментальный критерий отсутствия сингулярного спектра и покажем, как с его помощью без серьезных усилий получить эти два результата из основных принципов. В § 7 и 8 мы воспользуемся связью между теорией рассеяния и спектральным анализом в другую сторону: техника, развитая для доказательства отсутствия сингулярного спектра, послужит получению очень сильных результатов об асимптотической полноте.

Фундаментальный критерий отсутствия сингулярного спектра очень прост. Частично он основан на формуле Стоуна (теорема VII.13)

$$\frac{1}{2}(\varphi, (E_{[a,b]} + E_{(a,b)})\varphi) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \pi^{-1} \int_a^b \operatorname{Im}(\varphi, R(x+i\varepsilon)\varphi)\,dx,$$

где $R(\lambda)$ есть резольвента $(H-\lambda)^{-1}$ некоторого самосопряженного H и $\{E_\Omega\}$ — семейство его спектральных проекторов. В частности, в случае $p=1$ для любого $\varphi \in \mathcal{H}$

$$\sup_{0<\varepsilon<1} \int_a^b |\operatorname{Im}(\varphi, R(x+i\varepsilon)\varphi)|^p dx < \infty. \tag{30}$$

Теорема XIII.19. Пусть H — самосопряженный оператор с резольвентой $R(\lambda)=(H-\lambda)^{-1}$. Пусть (a, b) — ограниченный интервал и $\varphi \in \mathcal{H}$. Предположим, что существует некоторое $p>1$, для которого выполнено (30). Тогда $E_{(a,b)}\varphi \in \mathcal{H}_{\text{ac}}$.

Доказательство. Согласно формуле Стоуна и неравенству $E_{(c,d)} \leqslant \leqslant E_{[c,d]}$,

$$(\varphi, E_{(c,d)}\varphi) \leqslant \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \int_c^d \operatorname{Im}(\varphi, R(x+i\varepsilon)\varphi)\, dx$$

для каждого открытого интервала (c, d). Пусть S — открытое множество в (a, b), так что $S=\bigcup_{i=1}^{N}(a_i, b_i)$ есть объединение непересекающихся открытых интервалов. Предположим сначала, что $N<\infty$. Тогда

$$\begin{aligned}(\varphi, E_S\varphi) &\leqslant \frac{1}{\pi}\sum_{i=1}^{N} \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \int_{a_i}^{b_i} \operatorname{Im}(\varphi, R(x+i\varepsilon)\varphi)\, dx \leqslant \\ &\leqslant \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \sum_{i=1}^{N} \int_{a_i}^{b_i} \operatorname{Im}(\varphi, R(x+i\varepsilon)\varphi)\, dx \leqslant \\ &\leqslant \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \left[\int_a^b |\operatorname{Im}(\varphi, R(x+i\varepsilon)\varphi)|^p dx\right]^{1/p} |S|^{1/q} \leqslant C|S|^{1/q},\end{aligned}$$

где $|S|$ — мера Лебега множества S и q — индекс, сопряженный с p. Если N бесконечно, то положим $S_m=\bigcup_{i=1}^{m}(a_i, b_i)$. Таким образом,

$$(\varphi, E_S\varphi) = \lim_{m\to\infty} (\varphi, E_{S_m}\varphi) \leqslant \lim_{m\to\infty} C|S_m|^{1/q} = C|S|^{1/q}.$$

Пусть I — произвольное множество нулевой меры Лебега, лежащее внутри (a, b). Поскольку мера Лебега регулярна, можно найти открытое множество $S^{(k)}$, содержащее I и такое, что $|S^{(k)}| < < 1/k$. Тогда

$$(\varphi, E_I\varphi) \leqslant \inf_k (\varphi, E_{S^{(k)}}\varphi) \leqslant C \inf |S^{(k)}|^{1/q} = 0.$$

Следовательно, мера $\Omega \mapsto (\varphi, E_\Omega \varphi)$ абсолютно непрерывна на (a, b), так что $E_{(a, b)} \varphi \in \mathscr{H}_{ac}$. ∎

Теорема XIII.20. Пусть H — самосопряженный оператор с резольвентой $R(\lambda) = (H - \lambda)^{-1}$. Пусть (a, b) — ограниченный интервал. Предположим, что существует такое плотное множество $D \subset \mathscr{H}$, что для каждого $\varphi \in D$ условие (30) выполняется с некоторым $p > 1$. Тогда H имеет только абсолютно непрерывный спектр на (a, b), т. е. $\operatorname{Ran} E_{(a, b)} \subset \mathscr{H}_{ac}$. Обратно, если $\operatorname{Ran} E_{(a, b)} \subset \mathscr{H}_{ac}$, то существует такое множество D, плотное в $\operatorname{Ran} E_{(a, b)}$, что (30) выполнено при любом $p \geqslant 1$, включая $p = \infty$, когда $\varphi \in D$.

Доказательство. Первая половина этой теоремы следует из теоремы XIII.19. Для доказательства второй части допустим, что D есть множество векторов φ, для которых спектральная мера $d\mu_\varphi$ оператора H имеет вид $f(x)\,dx$, где $f \in L^\infty$ с компактным носителем в (a, b). По предположению, D плотно в $\operatorname{Ran} E_{(a, b)}$. Далее,

$$\operatorname{Im}(\varphi, R(x + i\varepsilon)\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} g_\varepsilon(x - y) f(y)\,dy,$$

где $g_\varepsilon(y) = \varepsilon(y^2 + \varepsilon^2)^{-1}$. Так как $\|g_\varepsilon\|_1 = \pi$ и не зависит от ε, условие (30) выполняется с $p = \infty$ в силу неравенства Юнга, а значит, и для всех p, так как (a, b) конечен. ∎

В большей части приложений теоремы XIII.20 в действительности доказывается, что $(\varphi, R(\lambda)\varphi)$ ограничено на $M = \{x + i\varepsilon \mid \varepsilon \in (0, 1),\ x \in (a, b)\}$, или, несколько сильнее, что $(\varphi, R(\lambda)\varphi)$ имеет непрерывное продолжение на $\overline{M}$. Характерное применение таково:

Теорема XIII.21. Пусть $V \in R$, R — класс Рольника, и пусть $H = -\Delta + V$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$. Предположим, что *либо*

(a) $\|V\|_R < 4\pi$,

либо

(b) $Ve^{a|x|} \in R$ с некоторым $a > 0$.

Тогда $\sigma_{\text{sing}}(H) = \varnothing$.

Доказательство. (a) Так как $\|V\|_R < 4\pi$, то $|V|^{1/2}(H_0 - \lambda)^{-1} V^{1/2}$ имеет норму Гильберта — Шмидта, меньшую 1, равномерно по $\lambda \in \mathbb{C} \setminus [0, \infty)$ (см. § XI.6). Пусть $f \in C_0^\infty$; заметим, что $|f|^{1/2} \in R$. Тогда

$$|f|^{1/2}(H - \lambda)^{-1}|f|^{1/2} = |f|^{1/2}(H_0 - \lambda)^{-1}|f|^{1/2} + \\ + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} (|f|^{1/2}(H_0 - \lambda)^{-1} V^{1/2}) (|V|^{1/2}(H_0 - \lambda)^{-1} V^{1/2})^n \times \\ \times (|V|^{1/2}(H_0 - \lambda)^{-1}|f|^{1/2})$$

сходится равномерно по норме Гильберта—Шмидта к оператору с нормой, меньшей $C_1+C_2(1-(4\pi)^{-1}\|V\|_R)^{-1}$. Следовательно,

$$|(f, (H-\lambda)^{-1}f)|\leqslant\||f|^{1/2}\|_2\||f|^{1/2}(H-\lambda)^{-1}|f|^{1/2}\|$$

и $(f, (H-\lambda)^{-1}f)$ ограничено на $\mathbb{C}\setminus[0, \infty)$. Из фундаментального критерия—теоремы XIII.19, таким образом, следует, что $\operatorname{Ran}E_{(a, b)}\subset\mathcal{H}_{ac}$ при *всех* (a, b), так что σ_{pp} и σ_{sing} пусты.

(b) Как при обсуждении в § XI.6, $(1+|V|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}|V|^{1/2})^{-1}$ существует при всех $\lambda\in\mathbb{C}\setminus[0, \infty)$ и имеет непрерывные граничные значения, когда $\lambda\to x+i0$, пока x не попадает в исключительное множество $\mathcal{E}$—конечное множество вещественных чисел. Пусть $[a, b]$ изолировано от $\mathcal{E}$. Тогда

$$\begin{aligned}|f|^{1/2}(H-\lambda)^{-1}|f|^{1/2}&=|f|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}|f|^{1/2}-\\&-(|f|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}V^{1/2})(1+|V|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}V^{1/2})^{-1}\times\\&\times|V|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}|f|^{1/2}\end{aligned}$$

является равномерно ограниченным оператором на $\{x+i\varepsilon\,|\,0<\varepsilon<1,\ x\in[a, b]\}$, если только $f\in C_0^\infty$. Как и в (a), отсюда следует, что $\operatorname{Ran}E_{(a, b)}\subset\mathcal{H}_{ac}$, так что σ_{sing} лежит в конечном множестве $\mathcal{E}$. Отсюда выводим, что $\sigma_{sing}=\varnothing$. ∎

Возникает естественный вопрос: почему при наличии такого простого критерия (теорема XIII.20) того, что $\sigma_{sing}(H)$ пуст, задача описания сингулярного спектра настолько труднее задачи описания $\sigma_{ess}(H)$ (§ 4 и 5) или $\sigma_{ac}(H)$ (§ XI.3). Причина в том, что σ_{sing} далеко не столь устойчив относительно возмущений. Чтобы проиллюстрировать это, опишем теорию Ароншайна—Доногью поведения σ_{sing} под действием возмущений ранга один. Эту теорию следует сравнить с теоремой Вейля об инвариантности σ_{ess} и теорией Като—Бирмана об инвариантности σ_{ac}. Основой теории Ароншайна—Доногью является следующая комбинация классических результатов Фату и Валле Пуссена:

Предложение. Пусть ν—конечная мера Бореля на $\mathbb{R}$, и пусть

$$F(z)=\int(x-z)^{-1}d\nu(x)$$

с $\operatorname{Im}z>0$. Пусть $A_\nu=\{x|\lim_{\varepsilon\downarrow0}F(x+i\varepsilon)=\infty\}$, и пусть $B=\{x|\lim_{\varepsilon\downarrow0}F(x+i\varepsilon)=\Phi(x)$—конечное число с $\operatorname{Im}\Phi(x)\neq0\}$. Тогда $\nu(\mathbb{R}\setminus(A_\nu\cup B_\nu))=0$, $\nu\restriction A_\nu$ сингулярна относительно меры Лебега и $\nu\restriction B_\nu$ абсолютно непрерывна.

Доказательства этих результатов можно проследить по литературе, приведенной в Замечаниях. Пусть теперь H_0—некоторый самосопряженный оператор на $\mathcal{H}$, и пусть $\varphi\in\mathcal{H}$—единичный вектор. Пусть P — проектор на φ, и пусть

$$H_\alpha = H_0 + \alpha P.$$

Пусть $\mathcal{H}'$ — циклическое подпространство для φ, порожденное H_0. Очевидно, все H_α равны H_0 на $(\mathcal{H}')^\perp$, так что мы можем с тем же успехом считать, что $\mathcal{H}' = \mathcal{H}$, т. е. мы тем самым допускаем, что φ цикличен для H_0. Отсюда следует, что φ цикличен и для H_α, так как

$$(H_\alpha - z)^{-1}\varphi = (H_0 - z)^{-1}\varphi - \alpha(\varphi, (H_0 - z)^{-1}\varphi)(H_\alpha - z)^{-1}\varphi,$$

и потому оболочка $\{(H_\alpha - z)^{-1}\varphi\}$ совпадает с оболочкой $\{(H_0 - z)^{-1}\varphi\}$. Из этой цикличности вытекает, что H_α унитарно эквивалентен умножению на x в $L^2(\mathbb{R}, d\nu_\alpha)$ с соответствующей мерой $d\nu_\alpha$.

Очевидно,

$$F_\alpha(z) \equiv \int (x - z)^{-1} d\nu_\alpha(x) = (\varphi, (H_\alpha - z)^{-1}\varphi)$$

удовлетворяет условию

$$F_\alpha(z) = F_\beta(z) + (\beta - \alpha) F_\alpha(z) F_\beta(z)$$

благодаря резольвентному уравнению

$$(H_\alpha - z)^{-1} = (H_\beta - z)^{-1} + (\beta - \alpha)(H_\alpha - z)^{-1} P (H_\beta - z)^{-1}.$$

Итак, мы имеем следующее основное уравнение:

$$F_\alpha(z) = F_\beta(z)(1 + (\alpha - \beta) F_\beta(z))^{-1}. \qquad (30^1/_2)$$

Заметим, что если $\lim\limits_{\varepsilon \downarrow 0} F_\beta(z) = \infty$, то $\lim\limits_{\varepsilon \downarrow 0} F_\alpha(z) = (\alpha - \beta)^{-1} \neq \infty$ при $\alpha \neq \beta$. Применив предложение, мы докажем следующий поразительный результат о *неинвариантности* σ_{sing}.

Теорема XIII.21$^1/_2$. Пусть H_0 — самосопряженный оператор, и пусть φ — циклический вектор для H_0. Пусть

$$H_\alpha = H_0 + \alpha(\varphi, \cdot)\varphi.$$

Тогда при $\alpha \neq \beta$ сингулярные части спектральных мер H_α и H_β (т. е. объединение чисто точечной и сингулярной части спектра) взаимно сингулярны.

Пример. Пусть $d\nu_0 = dx \restriction [0, 1] + d\mu_C$, где $d\mu_C$ — мера Кантора. Тогда $\sigma_{\text{ess}}(H_\alpha) = [0, 1]$ при всех α вследствие теоремы Вейля. Далее, $F_0 = F_L + F_C$ очевидным образом и

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \operatorname{Im} F_L(x + i\varepsilon) = \begin{cases} 1, & x \in (0, 1), \\ 1/2, & x = 0, 1, \\ 0, & x \notin [0, 1]. \end{cases}$$

Так как $\operatorname{Im} F_L(z) \geqslant 0$ при всех z с $\operatorname{Im} z > 0$, мы видим, что $\lim\limits_{\varepsilon\downarrow 0} F_0(x+i\varepsilon)$ не веществен ни при каком $x \in [0, 1]$. Из основного уравнения ($30^1/_2$) следует, что $\lim\limits_{\varepsilon\downarrow 0} F_\beta(x+i\varepsilon)$ не бесконечен ни при каких $\beta \neq 0$, $x \in [0, 1]$. Следовательно, никакой H_β при $\beta \neq 0$ не имеет сингулярного спектра, в то время как $\sigma_{\text{sing}}(H_0) \neq \varnothing$. Таким образом, мы имеем два ограниченных оператора H_0 и H_1, таких, что $H_0 - H_1$ имеет ранг один и при этом $\sigma_{\text{sing}}(H_1) = \varnothing \neq \sigma_{\text{sing}}(H_0)$!

XIII.7. Отсутствие сингулярного спектра II: гладкие возмущения

Теорема XIII.20 подсказывает нам, что следует изучить L^p-оценки математических ожиданий резольвенты, а наш опыт наводит на мысль, что особенно просто будет рассмотреть случай $p=2$.

Определение. Пусть H — самосопряженный оператор с резольвентой $R(\mu) = (H-\mu)^{-1}$. Пусть A — замкнутый оператор; A называется ***H*-гладким** тогда и только тогда, когда для каждого $\varphi \in \mathscr{H}$ и каждого $\varepsilon \neq 0$ для почти всех $\lambda \in \mathbb{R}$ имеем $R(\lambda + i\varepsilon)\varphi \in D(A)$ и, кроме того,

$$\|A\|_H^2 = \sup_{\substack{\|\varphi\|=1 \\ \varepsilon>0}} \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} (\|AR(\lambda+i\varepsilon)\varphi\|^2 + \|AR(\lambda-i\varepsilon)\varphi\|^2)\, d\lambda < \infty. \quad (31)$$

Поскольку A замкнут, достаточно, чтобы (31) выполнялось для плотного множества векторов φ (задача 47а). Более интересно то, что, как показывает принцип равномерной ограниченности, если для *каждого* φ мы имеем $\int_{-\infty}^{\infty} \|AR(\lambda \pm i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda \leqslant M_\varphi^2$ с некоторой константой M_φ (не зависящей от $\varepsilon > 0$ и от знака $\pm$, но зависящей от φ), то A является H-гладким (задача 47b, с).

H-гладкие операторы — это особенно удобный класс операторов. Например, мы увидим, что они H-ограничены с нулевой относительной гранью. Они представляют существующую в микромире тесную связь между теорией рассеяния и спектральным анализом. С одной стороны, мы докажем основной результат о существовании и полноте волновых операторов $\Omega^\pm(H_1, H_0)$, когда разность $H_1 - H_0$ есть произведение H_1-гладкого оператора на H_0-гладкий оператор (теорема XIII.24; см. также теорему XIII.31). С другой стороны, мы увидим, что если A H-гладкий, то $\overline{\operatorname{Ran}(A^*)} \subset \mathscr{H}_{\text{ac}}(H)$ (теорема XIII.23), что приведет к нескольким теоремам об отсутствии сингулярного спектра (см. теоремы XIII.26 и XIII.28).

Этот раздел состоит из двух частей. В первой мы построим абстрактную теорию гладких операторов, а во второй применим эту теорию к различным операторам Шредингера. Первые два применения относятся к случаю, когда волновые операторы унитарны, т. е. когда H и H_0 унитарно эквивалентны. Это операторы Шредингера вида $H_0+\lambda V$, когда λ мало либо V — потенциал отталкивания. В этом последнем случае теория гладких возмущений приведет лишь к доказательству того, что H обладает только абсолютно непрерывным спектром. В последнем из рассмотренных в этом разделе приложений будет установлено существование волновых операторов для случая потенциалов отталкивания в некоторых предположениях относительно убывания на бесконечности; для этого будет построено некое обобщение понятия H-гладкости. Часть этой обобщенной теории сыграет свою роль в следующем разделе.

Одна из наших первых основных задач — дать ряд эквивалентных формулировок свойства H-гладкости. Нам потребуется следующая векторнозначная версия теоремы Планшереля.

Лемма 1. Пусть $\varphi(\cdot)$ — (слабо измеримая) функция из $\mathbb{R}$ в сепарабельное гильбертово пространство $\mathcal{H}$. Предположим, что $\int\|\varphi(x)\|\,dx<\infty$. Определим $\hat{\varphi}$: $\mathbb{R}\to\mathcal{H}$ посредством равенства

$$\hat{\varphi}(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} e^{-ipx}\varphi(x)\,dx$$

(где в соответствии с нашим обычным соглашением интеграл понимается как слабый интеграл). Пусть A — замкнутый оператор, определенный в $\mathcal{H}$. Тогда

$$\int\|A\hat{\varphi}(p)\|^2\,dp=\int\|A\varphi(x)\|^2\,dx, \tag{32}$$

где интегралы полагаются равными бесконечности, если $\hat{\varphi}(p)$ (соответственно $\varphi(x)$) не лежит в $D(A)$ почти всюду.

Доказательство. Предположим сначала, что A ограничен. Тогда для любого $\psi\in\mathcal{H}$ равенство $(\psi,\ A\hat{\varphi}(p))=(A^*\psi,\ \hat{\varphi}(p))$ есть (обычное) преобразование Фурье от $(A^*\psi,\ \varphi(x))=(\psi,\ A\varphi(x))$, так что по теореме Планшереля

$$\int|(\psi,\ A\hat{\varphi}(p))|^2\,dp=\int|(\psi,\ A\varphi(x))|^2\,dx.$$

Формула (32) следует отсюда суммированием по вектору ψ, пробегающему ортонормированный базис. Пусть, далее, A самосопряжен и $\{E_\Omega\}$ — семейство его спектральных проекторов. Тогда произведение $AE_{(-a,\ a)}$ ограничено, так что

$$\int \| AE_{(-a,\ a)}\hat{\varphi}(p)\|^2 dp = \int \| AE_{(-a,\ a)}\varphi(x)\|^2 dx.$$

Предположим, что один из интегралов в (32) конечен; без потери общности можно считать, что конечен правый. Тогда $\varphi(x) \in \in D(A)$ почти всюду по x, так что $\| AE_{(-a,\ a)}\varphi(x)\|^2$ монотонно стремится к $\| A\varphi(x)\|^2$ при $a \to \infty$. Итак,

$$\int \lim_{a\to\infty} \| AE_{(-a,\ a)}\hat{\varphi}(p)\|^2 dp = \int \| A\varphi(x)\|^2 dx < \infty.$$

В частности, $\lim\limits_{a\to\infty} \| AE_{(-a,\ a)}\hat{\varphi}(p)\|^2 < \infty$ почти всюду по p. Отсюда следует, что $\hat{\varphi}(p) \in D(A)$ п. в., и справедливо (32). Пусть, наконец, A — произвольный замкнутый оператор. По теореме VIII.32, существует самосопряженный оператор $|A|$, такой, что $D(|A|) = = D(A)$ и $\||A|\psi\| = \|A\psi\|$. Таким образом, теперь (32) следует из случая, когда A самосопряжен. ∎

Пример 1. Пусть $H = -id/dx$ в $L^2(\mathbb{R})$, так что $(e^{-iHt}\varphi)(x) = = \varphi(x-t)$. Пусть g лежит в $L^2(\mathbb{R})$, и пусть A — оператор умножения на g. С помощью замены переменных получаем, что $\int |g(x)\varphi(x-t)|^2 dx\, dt = \|g\|_2^2 \|\varphi\|_2^2$, так что по теореме Фубини для любого $\varphi \in L^2$ и почти всех t имеем $e^{-iHt}\varphi \in D(A)$ и $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \| Ae^{-iHt}\varphi\|^2 dt = = \|g\|_2^2 \|\varphi\|_2^2$. Фиксируем $\varepsilon > 0$; тогда

$$\int\limits_0^\infty e^{-\varepsilon t} e^{i\lambda t} e^{-iHt}\varphi\, dt = -iR(\lambda + i\varepsilon)\varphi.$$

Итак, по лемме

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \| AR(\lambda + i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda = 2\pi \int\limits_0^\infty e^{-2\varepsilon t} \| Ae^{-itH}\varphi\|^2 dt.$$

Применяя аналогичное вычисление для $\lambda - i\varepsilon$, видим, что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (\| AR(\lambda + i\varepsilon)\varphi\|^2 + \| AR(\lambda - i\varepsilon)\varphi\|^2) d\lambda =$$

$$= 2\pi \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2\varepsilon |t|} \| Ae^{-itH}\varphi\|^2 dt. \qquad (33)$$

Из равенства (33) и оценки интеграла $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \| Ae^{-iHt}\varphi \|^2 dt$ следует, что g есть H-гладкий оператор и $\| g \|_H = (2\pi)^{-1/2} \| g \|_2$.

Пример 2. Пусть H — произвольный самосопряженный оператор, и пусть $A = I$ — тождественный оператор. Мы снова пользуемся леммой 1 и заключаем, что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \| R(\lambda + i\varepsilon)\varphi \|^2 d\lambda = 2\pi \int\limits_{0}^{\infty} e^{-2\varepsilon t} \| e^{-itH}\varphi \|^2 dt = \pi\varepsilon^{-1} \| \varphi \|^2, \qquad (34)$$

так что $\sup\limits_{\varepsilon > 0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \| R(\lambda + i\varepsilon)\varphi \|^2 d\lambda = \infty$ для любого $\varphi \neq 0$. Итак, I не есть H-гладкий оператор.

Одна из эквивалентных формулировок свойства H-гладкости дается в терминах унитарной группы e^{itH}. Как немедленное следствие равенства (33) получается

Лемма 2. Оператор A H-гладкий тогда и только тогда, когда для всех $\varphi \in \mathcal{H}$ имеем $e^{itH}\varphi \in D(A)$ для почти всех $t \in \mathbb{R}$, причем для некоторой константы C

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \| Ae^{-iHt}\varphi \|^2 dt \leqslant C \| \varphi \|^2.$$

C может быть выбрана равной $2\pi \| A \|_H^2$, но не меньше.

Эта лемма имеет ряд важных следствий.

Теорема XIII.22. Если оператор A H-гладкий, то он H-ограничен с нулевой относительной гранью.

Доказательство. Пусть $\psi \in D(A^*)$. По резольвентной формуле

$$-i(A^*\psi,\ R(\lambda + i\varepsilon)\varphi) = \int\limits_{0}^{\infty} (A^*\psi,\ e^{-iHt}\varphi)\, e^{i\lambda t} e^{-\varepsilon t}\, dt.$$

Итак, в силу неравенства Шварца и леммы 2,

$$|(A^*\psi, R(\lambda + i\varepsilon)\varphi)|^2 \leqslant \frac{1}{2\varepsilon} \int\limits_{0}^{\infty} |(A^*\psi,\ e^{-iHt}\varphi)|^2 dt \leqslant$$

$$\leqslant \frac{1}{2\varepsilon} \| \psi \|^2 \int\limits_{0}^{\infty} \| Ae^{-iHt}\varphi \|^2 dt \leqslant \frac{\pi}{\varepsilon} \| A \|_H^2 \| \psi \|^2 \| \varphi \|^2.$$

Таким образом, $R(\lambda+i\varepsilon)\varphi \in D(A^{**})=D(A)$ и $\|AR(\lambda+i\varepsilon)\|^2 \leqslant$ $\leqslant (\pi/\varepsilon)\|A\|_H^2$. Отсюда получаем, что $D(H)\subset D(A)$ и для $\psi \in D(H)$

$$\|A\psi\| \leqslant \pi^{1/2}\|A\|_H(\varepsilon^{-1/2}\|H\psi\|+\varepsilon^{1/2}\|\psi\|).$$

Поскольку ε произвольно, теорема доказана. ∎

Усиление теоремы XIII.22 приведено в задаче 49.

Теорема XIII.23. Если A является H-гладким, то $\overline{\mathrm{Ran}(A^*)}\subset$ $\subset \mathscr{H}_{ac}(H)$.

Доказательство. Поскольку множество $\mathscr{H}_{ac}(H)$ замкнуто, достаточно доказать лишь включение $\mathrm{Ran}(A^*)\subset\mathscr{H}_{ac}(H)$. Пусть $\varphi \in D(A^*)$, $\psi = A^*\varphi$, и пусть $d\mu_\psi$ — спектральная мера оператора H, ассоциированная с ψ. Введем

$$F(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-itx}\,d\mu_\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}(A^*\varphi,\ e^{-itH}\psi).$$

Тогда $|F(t)|\leqslant(2\pi)^{-1/2}\|\varphi\|\|Ae^{-itH}\psi\|$, так что, по лемме 2, $F \in$ $\in L^2(\mathbb{R})$. По теореме Планшереля, и $\check{F}\in L^2$, а потому мера $d\mu_\psi =$ $=\check{F}\,dx$ абсолютно непрерывна по отношению к мере Лебега. ∎

Поучительным упражнением является доказательство теоремы XIII.23, опирающееся на теорему XIII.20 и непосредственное определение H-гладкости. См. также условие (5) приведенной ниже теоремы XIII.25. Лемма 2 ведет к важным следствиям в теории рассеяния.

Теорема XIII.24. Пусть H и H_0 — самосопряженные операторы. Предположим, что $H=H_0+\sum\limits_{i=0}^{n} A_i^* B_i$ в следующем смысле:

(1) $D(H)\subset D(A_i)$; $D(H_0)\subset D(B_i)$; $i=1, \ldots, n$;

(2) если $\varphi\in D(H)$ и $\psi\in D(H_0)$, то

$$(H\varphi,\ \psi)=(\varphi,\ H_0\psi)+\sum_{i=1}^{n}(A_i\varphi,\ B_i\psi). \tag{35}$$

Если каждый A_i H-гладкий, а каждый B_i H_0-гладкий, то волновые операторы $\operatorname*{s-lim}\limits_{t\to\mp\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}$ существуют и унитарны.

Доказательство. Положим сначала $n=1$. Пусть $\varphi\in D(H_0)$, $w(t)=e^{iHt}e^{-iH_0t}\varphi$ и $\psi\in D(H)$. Тогда функция $(\psi,\ w(t))$ дифференцируема и

$$\frac{d}{dt}(\psi,\ w(t))=i(Ae^{-iHt}\psi,\ Be^{-iH_0t}\varphi).$$

Поэтому если $t>s$, то

$$|(\psi,\ w(t)-w(s))|=\int\limits_s^t |(Ae^{-i\tau H}\psi,\ Be^{-iH_0\tau}\varphi)|\,d\tau\leqslant$$
$$\leqslant\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty}\|Ae^{-i\tau H}\psi\|^2\,d\tau\right)^{1/2}\left(\int\limits_s^t\|Be^{-iH_0\tau}\varphi\|^2\,d\tau\right)^{1/2}.$$

Поскольку ψ — произвольный элемент $D(H)$, то

$$\|w(t)-w(s)\|\leqslant\sqrt{2\pi}\,\|A\|_H\left(\int\limits_s^t\|Be^{-iH_0\tau}\varphi\|^2\,d\tau\right)^{1/2}.$$

Так как подынтегральная функция в правой части принадлежит $L^1(\mathbb{R})$, то эта последняя оценка показывает, что направленность $w(s)$ при $s\to+\infty$ или $s\to-\infty$ есть направленность Коши. Следовательно, пределы существуют на плотном в $\mathscr{H}$ подмножестве, а потому и на всех $\mathscr{H}$. Поскольку в силу симметрии $H_0=H-B^*A$, то пределы $\text{s-lim}\, e^{iH_0t}e^{-iHt}$ существуют, а потому и унитарны. Доказательство для $n>1$ аналогично. ∎

Отметим, что предельный оператор из теоремы XIII.24 *не содержит* $P_{\text{ac}}(H_0)$ (см. для сравнения § XI.3). Поэтому если $H_0\psi=E\psi$, то $H\psi=E\psi$. Это следует непосредственно из предположений, так как условие $\operatorname{Ran}(B^*)\subset\mathscr{H}_{\text{ac}}(H_0)$ влечет за собой $\mathscr{H}_{\text{pp}}(H_0)\subset\operatorname{Ker}(B)$, откуда в свою очередь $H\psi=H_0\psi$.

В качестве заключительного результата общей теории докажем эквивалентность различных форм гладкости.

Теорема XIII.25. Пусть A — замкнутый оператор, а H самосопряженный. Тогда следующие условия эквивалентны:

(0) A H-гладкий;

(1) для всех $\varphi\in\mathscr{H}$ при почти всех t имеем $e^{-itH}\varphi\in D(A)$ и

$$c_1=\sup_{\|\varphi\|=1}\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\|Ae^{-itH}\varphi\|^2\,dt<\infty;$$

(2) $D(H)\subset D(A)$ и

$$c_2=\sup_{\substack{\|\varphi\|=1\\ -\infty<a<b<\infty}}\frac{\|AE_{(a,\,b)}\varphi\|^2}{|b-a|}<\infty,$$

где E_Ω — спектральное семейство для H;

(3) $$c_3=\sup_{\substack{\|\varphi\|=1;\ \varphi\in D(A^*)\\ -\infty<a<b<\infty}}\frac{\|E_{(a,\,b)}A^*\varphi\|^2}{|b-a|}<\infty;$$

(4) $c_4 = \frac{1}{2\pi} \sup\limits_{\substack{\mu \notin \mathbb{R};\ \varphi \in D(A^*) \\ \|\varphi\|=1}} |(A^*\varphi,\ [R(\mu) - R(\bar{\mu})]\, A^*\varphi)| < \infty$;

(5) $c_5 = \frac{1}{\pi} \sup\limits_{\substack{\mu \notin \mathbb{R};\ \varphi \in D(A^*) \\ \|\varphi\|=1}} \|R(\mu)\, A^*\varphi\|^2 \, |\operatorname{Im} \mu| < \infty$;

(6) $D(H) \subset D(A)$ и

$$c_6 = \frac{1}{\pi} \sup_{\mu \notin \mathbb{R},\ \|\varphi\|=1} \|AR(\mu)\, \varphi\|^2 \, |\operatorname{Im} \mu| < \infty;$$

(7) $D(H) \subset D(A)$ и

$$c_7 = \frac{1}{\pi} \sup_{\mu \notin \mathbb{R},\ \|\varphi\|=1} (\|AR(\mu)\, \varphi\|^2 + \|AR(\bar{\mu})\, \varphi\|^2)\, |\operatorname{Im} \mu| < \infty.$$

Кроме того, если некоторые (а тогда и все) константы $c_1, \ldots, c_7$ конечны, то все они равны $\|A\|_H^2$.

Прежде чем доказывать эту теорему, заметим, что в пунктах (5) и (6) sup по $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ можно заменить на sup по $0 < \operatorname{Im} \mu < \alpha$ для любого $\alpha > 0$. В исходном определении можно условие $\varepsilon > 0$ заменить на $0 < \varepsilon < \alpha$. Это прямо следует из доказательства теоремы, если заметить, что (в силу (33)) выражение в (31) монотонно возрастает при убывании ε.

Следующее утверждение, содержащее условие более сильное, чем гладкость, вытекает из п. (4).

Следствие. Если $AR(\mu)\, A^*$ ограничено для каждого $\mu \notin \mathbb{R}$ в том смысле, что

$$\sup_{\substack{\psi,\ \varphi \in D(A^*) \\ \|\psi\|=\|\varphi\|=1}} |(A^*\varphi,\ R(\mu)\, A^*\psi)| < \infty \quad \text{и} \quad \Gamma \equiv \sup_{\mu \notin \mathbb{R}} \|AR(\mu)\, A^*\| < \infty,$$

то A H-гладкий и $\|A\|_H \leqslant \Gamma/\pi$.

Доказательство теоремы XIII.25. Заметим сначала, что для любого замкнутого оператора A, любого ограниченного оператора B и любых $\varphi \in D(A)$ и $\psi \in \mathscr{H}$ имеем

$$(\psi,\ BA\varphi) = (B^*\psi,\ A\varphi).$$

Это означает, что оценка $\|BA\varphi\| \leqslant c\|\varphi\|$ выполняется для всех $\varphi \in D(A)$ тогда и только тогда, когда $\operatorname{Ran} B^* \subset D(A^*)$ и $\|A^*B^*\| \leqslant c$. Как следствие получаем: $c_2 = c_3$ и $c_5 = c_6$. Более того, поскольку $(A^*\varphi,\ [R(\mu) - R(\bar{\mu})]\, A^*\varphi) = 2 \operatorname{Im} \mu \|R(\mu)\, A^*\varphi\|^2$, то $c_5 = c_4$. Далее, $c_0 = c_1$ в силу леммы 2. Итак, мы должны доказать лишь, что $c_0 = c_3 = c_4 = c_7$, где $c_0 \equiv \|A\|_H^2$. Мы покажем, что

$$c_0 \leqslant c_4 \leqslant c_3 \leqslant c_0 \quad \text{и} \quad c_3 \leqslant c_7 \leqslant c_1.$$

$c_0 \leqslant c_4$. $(2\pi i)^{-1}[R(\mu)-R(\bar{\mu})]=\pi^{-1}(\operatorname{Im}\mu)R(\bar{\mu})R(\mu)\geqslant 0$, если $\operatorname{Im}\mu>0$. Пусть $K(\mu)$ — положительный квадратный корень из этой величины. По определению c_4 имеем $\|K(\mu)A^*\varphi\|^2\leqslant c_4\|\varphi\|^2$, если $\varphi\in D(A^*)$. Итак, если $c_4<\infty$, то из сделанного выше замечания следует, что $\operatorname{Ran}K(\mu)\subset D(A)$ и $\|AK(\mu)\|^2\leqslant c_4$. Поэтому

$$\int_{-\infty}^{\infty}\|A[R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\varphi\|^2 d\lambda=$$

$$=4\pi^2\int_{-\infty}^{\infty}\|AK(\lambda+i\varepsilon)K(\lambda+i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda\leqslant 4\pi^2c_4\int_{-\infty}^{\infty}\|K(\lambda+i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda=$$

$$=4\pi^2c_4\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}(\varphi,\ [R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\varphi)\,d\lambda=4\pi^2c_4\|\varphi\|^2,$$

ибо, пользуясь спектральной мерой $d\mu_\varphi$ оператора H, имеем

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}(\varphi,\ [R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\varphi)\,d\lambda=$$

$$=\frac{\varepsilon}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(x-\lambda)^2+\varepsilon^2}\,d\mu_\varphi(x)\,d\lambda=\int_{-\infty}^{\infty}d\mu_\varphi(x)=\|\varphi\|^2.$$

Далее,

$$[R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\varphi=i\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\varepsilon|t|}e^{i\lambda t}e^{-iHt}\varphi\,dt,$$

так что по лемме 1

$$\int_{-\infty}^{\infty}\|A[R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\varphi\|^2 d\lambda=2\pi\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\varepsilon|t|}\|Ae^{-iHt}\varphi\|^2 dt, \tag{36}$$

т. е. $c_0=c_1\leqslant c_4$.

$c_4\leqslant c_3$. Пусть $\varphi\in D(A^*)$, и пусть $d\mu_{A^*\varphi}$ — спектральная мера оператора H, ассоциированная с вектором $A^*\varphi$. Тогда в силу определения c_3 (см. п. (3))

$$d\mu_{A^*\varphi}(a,\ b]\leqslant c_3|b-a|\|\varphi\|^2.$$

Если I — произвольное борелево множество, обозначим через $|I|$ его лебегову меру. Тогда $d\mu_{A^*\varphi}(I)\leqslant c_3|I|\|\varphi\|^2$ для любого I, поскольку это справедливо для открытых множеств, а тогда, в силу внешней регулярности меры, и для произвольных множеств. Поэтому мера $d\mu_{A^*\varphi}$ абсолютно непрерывна относительно dx и производная Радона — Никодима $g(x)$ удовлетворяет оценке $\|g\|_\infty\leqslant$

$\leqslant c_3\|\varphi\|^2$. Итак, если $\mu=\lambda+i\varepsilon$, то

$$|(A^*\varphi,\ [R(\mu)-R(\bar\mu)]\,A^*\varphi)|=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2|\varepsilon|}{(x-\lambda)^2+\varepsilon^2}g(x)\,dx\leqslant$$

$$\leqslant\|g\|_\infty\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2|\varepsilon|}{(x-\lambda)^2+\varepsilon^2}\,dx\leqslant c_3(2\pi)\|\varphi\|^2.$$

Это и означает, что $c_4\leqslant c_3$.

$c_3\leqslant c_0$. Пусть $\varphi\in D(A^*)$. Предположим, что a и b не являются собственными значениями оператора H. По формуле Стоуна

$$|(A^*\varphi, E_{(a,b]}\psi)|^2=\frac{1}{4\pi^2}\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\left|\int_a^b(A^*\varphi,\ [R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\,\psi)\,d\lambda\right|^2\leqslant$$

$$\leqslant\frac{1}{4\pi^2}\|\varphi\|^2\,|b-a|\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty}\|A\,[R(\lambda+i\varepsilon)-R(\lambda-i\varepsilon)]\,\psi\|^2\,d\lambda\leqslant$$

$$\leqslant|b-a|\,\|A\|_H^2\,\|\varphi\|^2\,\|\psi\|^2.$$

Последний шаг здесь сделан на основе равенства (36). Если a, или b, или и a, и b — собственные значения, то $a+\delta$ и $b+\delta$ не являются собственными значениями при почти всех достаточно малых δ, а тогда $E_{(a,b]}=\operatorname{s-lim}_{\delta\to 0}E_{(a+\delta,\,b+\delta]}$, так что $c_3\leqslant c_0$.

$c_3\leqslant c_7$. Уже известно, что $c_3=c_6$, а неравенство $c_6\leqslant c_7$ очевидно.

$c_7\leqslant c_1$. Здесь по существу повторяется прием, примененный в доказательстве теоремы XIII.22. Действительно, там мы имели

$$|(A^*\psi,\ R(\lambda+i\varepsilon)\,\varphi)|^2\leqslant\frac{1}{2\varepsilon}\|\psi\|^2\int_0^{\infty}\|Ae^{-iHt}\varphi\|^2\,dt,$$

так что

$$\|AR(\lambda+i\varepsilon)\,\varphi\|^2\leqslant\frac{1}{2\varepsilon}\int_0^{\infty}\|Ae^{-iHt}\varphi\|^2\,dt.$$

Аналогичная выкладка для $R(\lambda-i\varepsilon)$ доказывает справедливость оценки

$$\|AR(\lambda+i\varepsilon)\,\varphi\|^2+\|AR(\lambda-i\varepsilon)\,\varphi\|^2\leqslant\frac{1}{2\varepsilon}\int_{-\infty}^{\infty}\|Ae^{-iHt}\varphi\|^2\,dt.$$

Итак, $c_7\leqslant c_1$. ∎

Заметим, что критерий (3) дает другое доказательство того, что $\operatorname{Ran}(A^*)\subset\mathscr{H}_{\mathrm{ac}}(H)$, если A является H-гладким, а из критерия (6) вытекает теорема XIII.22. Равенство постоянных c_6 и c_7, на первый взгляд, очень загадочно. Отчасти эта загадочность проясняется, если обратиться к доказательству равенства, близкого к рассматриваемому:

$$\sup_{\substack{\varepsilon>0\\ \|\varphi\|=1}} \int_{-\infty}^{\infty} \|AR(\lambda+i\varepsilon)\varphi\|^2\,d\lambda =$$

$$= \sup_{\substack{\varepsilon>0\\ \|\varphi\|=1}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} (\|AR(\lambda+i\varepsilon)\varphi\|^2+\|AR(\lambda-i\varepsilon)\varphi\|^2)\,d\lambda \right\}.$$

В силу (33) это равенство эквивалентно следующему:

$$\sup_{\|\varphi\|=1} \int_0^{\infty} \|Ae^{-itH}\varphi\|^2\,dt = \sup_{\|\varphi\|=1} \int_{-\infty}^{\infty} \|Ae^{-itH}\varphi\|^2\,dt,$$

а это последнее вытекает из того, что если $\varphi_s = e^{-isH}\varphi$, то

$$\int_0^{\infty} \|Ae^{-itH}\varphi_s\|^2\,dt = \int_s^{\infty} \|Ae^{-itH}\varphi\|^2\,dt$$

сходится к $\int_{-\infty}^{\infty} \|Ae^{-itH}\varphi\|^2\,dt$ при $s\to-\infty$.

Прежде чем обратиться к приложениям, приведем еще два примера гладких операторов.

Пример 3. Пусть $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$, и пусть A — умножение на функцию V из класса потенциалов Рольника R. В силу оценки

$$|V|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}|V|^{1/2}\|_{\text{oper}} \leqslant \||V|^{1/2}(H_0-\lambda)^{-1}|V|^{1/2}\|_2 \leqslant (4\pi)^{-1}\|V\|_R$$

и следствия теоремы XIII.25, оператор $|A|^{1/2}$ является H_0-гладким.

Пример 4. Пусть H — умножение на x в $L^2([\alpha, \beta], dx)$, где $\alpha, \beta\in\mathbb{R}$. Пусть A — ограниченный оператор на $\mathcal{H}$, такой, что A^*A — интегральный оператор вида

$$(A^*A\psi)(x) = \int_{\alpha}^{\beta} K(x, y)\,\psi(y)\,dy, \tag{37}$$

причем $\|K\|_\infty \equiv \operatorname{ess\,sup}_{[\alpha,\beta]\times[\alpha,\beta]} |K(x, y)| < \infty$. Тогда A H-гладкий и $\|A\|_H \leqslant \|K\|_\infty^{1/2}$. Действительно, пусть $(a, b]$ — произвольный интервал и φ — вектор с нормой 1. Тогда

$$\|AE(a,\ b]\varphi\|^2 = (\varphi,\ E(a,\ b]A^*AE(a,\ b]\varphi) =$$
$$= \int_a^b \int_a^b K(x,\ y)\overline{\varphi(x)}\varphi(y)\,dx\,dy \leqslant$$
$$\leqslant \left(\int_a^b \int_a^b |K(x,\ y)|^2\,dx\,dy\right)^{1/2} \left(\int_a^b \int_a^b |\bar\varphi(x)\varphi(y)|^2\,dx\,dy\right)^{1/2} \leqslant$$
$$\leqslant |b-a|\,\|K\|_\infty\,\|\varphi\|^2.$$

В силу критерия (2), $\|A\|_H \leqslant \|K\|_\infty^{1/2}$. С помощью дальнейшего анализа (см. задачи 50, 51) можно показать, что для любого H-гладкого оператора A произведение A^*A имеет вид (37) и что $\|A\|_H = \|K\|_\infty^{1/2}$. В частности, отметим, что, как показывает предыдущее рассмотрение, любой интегральный оператор

$$(A\psi)(x) = \int_\alpha^\beta A(x,\ y)\,\psi(y)\,dy$$

с $\|A\|_\infty < \infty$ является H-гладким. Таким образом, мы нашли много H-гладких операторов и, в частности, H-гладкие операторы A с ядром $\operatorname{Ker} A = \{0\}$. Пример 1 также относится к этому случаю, хотя оператор H в этом примере и не ограничен. Действительно, если $f \in L^2$, то для оператора A, который есть умножение на f, A^*A — умножение на $g \equiv |f|^2 \in L^1$. Переходя к представлению, где диагонален оператор $-id/dx$ (посредством преобразования Фурье), получаем, что A^*A — интегральный оператор с ядром, равным $(2\pi)^{-1/2}\hat{g}(x-y) \in L^\infty$.

Теперь мы обратимся к различным приложениям.

А. Слабо взаимодействующие квантовые системы

Предположим, что H_0 — положительный самосопряженный оператор и что C самосопряжен. Если $|C|^{1/2}(H_0+I)^{-1}|C|^{1/2}$ — ограниченный оператор с гранью a, то для любого $\varphi \in D(|C|^{1/2})$ имеем $\|(H_0+I)^{-1/2}|C|^{1/2}\varphi\|^2 \leqslant a\|\varphi\|^2$, так что оператор $(H_0+I)^{-1/2}|C|^{1/2}$ ограничен. Переходя к сопряженным, получаем $Q(H_0) \subset Q(C)$ и $\||C|^{1/2}(H_0+I)^{-1/2}\|^2 \leqslant a$. Отсюда $(\varphi,\ |C|\varphi) \leqslant a(\varphi,\ (H_0+I)\varphi)$ для всех $\varphi \in Q(H_0)$. Итак, C H_0-ограничен в смысле форм, и если $a < 1$, то сумма $H = H_0 + C$ в смысле форм дает самосопряженный оператор. Для таких сумм в смысле форм имеет место следующая

Теорема XIII.26 (теорема Като о гладкости). Пусть H_0 — положительный самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$, и пусть $C_1, \ldots, C_n$ — самосопряженные операторы, причем

$$\alpha_{ij} \equiv \sup_{\mu \notin R} \| |C_i|^{1/2} (H_0 - \mu)^{-1} |C_j|^{1/2} \| < \infty.$$

Предположим, что $\{\alpha_{ij}\}_{1 \leqslant i, j \leqslant n}$ — матрица оператора с нормой, меньшей 1, в $\mathbb{C}^n$ (снабженном естественной нормой гильбертова пространства). Тогда:

(a) сумма $H = H_0 + \sum_{i=1}^{n} C_i$ в смысле форм есть замкнутая форма на $Q(H_0)$;

(b) волновые операторы $\operatorname{s-lim}_{t \to \mp \infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t}$ существуют и унитарны.

В частности, H и H_0 — унитарно эквивалентные операторы.

Доказательство. Введем гильбертово пространство $\mathscr{H}' = \bigoplus_{i=1}^{n} \mathscr{H}_i$, где каждое $\mathscr{H}_i$ — копия $\mathscr{H}$. В силу рассмотрения, предшествующего этой теореме, а также условия $\alpha_{ii} < \infty$, каждый $|C_i|$ ограничен относительно H_0 в смысле форм, так что $|C_i|^{1/2}$ определен как оператор из $Q(H_0)$ в $\mathscr{H}$. В итоге можно определить оператор B: $Q(H_0) \to \mathscr{H}'$ посредством $(B\psi)_i = |C_i|^{1/2} \psi$. Из условия теоремы вытекает, что

$$\alpha \equiv \sup_{\mu \notin R} \| B (H_0 - \mu)^{-1} B^* \| < 1. \tag{38}$$

Пусть $B = U|B|$ — полярное разложение B. Тогда, поскольку $|B| = U^* B$ и U частично изометричен, из (38) следует, что $|B|(H_0 + I)^{-1} |B|$ — ограниченный оператор с нормой, меньшей α. Опять же из построения, предшествующего теореме, следует, что

$$(\varphi, |B|^2 \varphi) \leqslant \alpha (\varphi, (H_0 + I) \varphi),$$

или что

$$\left(\varphi, \sum_{i=1}^{n} |C_i| \varphi\right) \leqslant \alpha (\varphi, (H_0 + I) \varphi). \tag{39}$$

Отсюда заключаем, что сумма $\sum_{i=1}^{n} C_i$ ограничена относительно H_0 в смысле форм с относительной гранью $\alpha < 1$, что доказывает (a).

Далее заметим, что для $\mu \notin [0, \infty)$

$$(H - \mu)^{-1} = (H_0 - \mu)^{-1} -$$
$$- \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (H_0 - \mu)^{-1} B^* W (B (H_0 - \mu)^{-1} B^* W)^n B (H_0 - \mu)^{-1}, \tag{40}$$

где оператор W: $\mathscr{H}' - \mathscr{H}'$ определен равенством $(W\varphi)_i = (\operatorname{sgn} C_i) \varphi_i$. Равенство (40) справедливо, поскольку сумма сходится в силу

(38), и, как можно проверить, на языке квадратичных форм (§ VIII.6) правая часть задает отображение $\mathcal{H}_{-1}$ в $\mathcal{H}_{+1}$, являющееся обратным к $(H-\mu)$: $\mathcal{H}_{+1} \to \mathcal{H}_{-1}$. Из (40) легко видеть, что

$$\sup_{\mu \notin \mathbb{R}} \| B(H-\mu)^{-1} B^* \| \leqslant \alpha (1-\alpha)^{-1}, \tag{41}$$

поэтому каждый $|C_i|^{1/2}$ и $C_i^{1/2} \equiv |C_i|^{1/2} \operatorname{sgn} C_i$ является H-гладким в силу следствия теоремы XIII.25. Аналогично, в силу основных предположений и этого же следствия, каждый $|C_i|^{1/2}$ H_0-гладкий. Итак, по теореме XIII.24, и $\operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t}$, и $\operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} e^{iH_0 t} e^{-iHt}$ существуют. Эти отображения изометричны и обратны друг другу. Это доказывает (b). ∎

В качестве приложения этой теоремы читателю следует доказать усиленную версию теоремы XIII.21, сформулированную в задаче 56. Если нет желания возиться с подробными оценками, то часто полезно применять теорему Като о гладкости в следующей форме.

Следствие. Пусть H_0 самосопряжен и положителен. Пусть $C_1, \ldots, C_n$ самосопряжены, и пусть $C = \sum_{i=1}^{n} C_i$. Предположим, что для каждых i и j

$$\sup_{\mu \notin \mathbb{R}} \| |C_i|^{1/2} (H_0 - \mu)^{-1} |C_j|^{1/2} \| < \infty.$$

Тогда существует такое $\Lambda > 0$, что для всех $\lambda \in (-\Lambda, \Lambda)$

(a) $H(\lambda) = H_0 + \lambda C$ — замкнутая форма на $Q(H_0)$;

(b) волновые операторы $\Omega_\lambda^{\pm} = \operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} e^{itH(\lambda)} e^{-itH_0}$ существуют и унитарны.

В действительности можно доказать, что $\Omega_\lambda^{\pm}$ аналитичны по λ (см. Замечания и задачи 53, 54). Теперь для нас не составит труда исследование шредингеровых операторов N слабо взаимодействующих частиц.

Теорема XIII.27 (теорема Иорио—О'Кэррола). Пусть $m \geqslant 3$, $N \geqslant 2$. Пусть

$$\tilde{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} (-2\mu_i)^{-1} \Delta_i$$

— оператор в $L^2(\mathbb{R}^{Nm})$, причем каждое $\mu_i > 0$, а $r \in \mathbb{R}^{Nm}$ записывается в виде $r = \langle r_1, \ldots, r_N \rangle$, $r_i \in \mathbb{R}^m$. Пусть H_0 — оператор $\tilde{H}_0$

с отделенным движением центра масс (см. § XI.5). Пусть $V = \sum_{i<j} V_{ij}(r_i - r_j)$, где каждая функция $V_{ij} \in L^{m/2+\varepsilon}(\mathbb{R}^m) \cap L^{m/2-\varepsilon}(\mathbb{R}^m)$ для некоторого фиксированного $\varepsilon > 0$. Тогда для всех достаточно малых по модулю $\lambda \in \mathbb{R}$ оператор $H_0 + \lambda V$ (определенный как сумма форм) унитарно эквивалентен оператору H_0. Эта эквивалентность обеспечивается волновыми операторами. В частности, $H_0 + \lambda V$ не имеет ни связанных состояний, ни сингулярного спектра и обладает волновыми операторами, которые полны.

Прежде чем доказывать теорему Иорио—О'Кэррола, сделаем несколько замечаний. Во-первых, движение центра масс отделяется исключительно для согласования с понятиями квантовой теории N частиц. Во-вторых, заметим, что понятие суммы в смысле форм необходимо только при $m=3$. При $m \geqslant 4$ по теореме X.20 операторная сумма $H_0 + \lambda V$ самосопряжена на $C_0^\infty(\mathbb{R}^{m(N-1)})$, если λ вещественно. В-третьих, отметим, что по теореме XIII.11 при $m=1$ или 2 теорема о слабом взаимодействии не имеет места, однако справедлив некоторый результат, относящийся к $L^2([0, \infty))$ (задача 58). Наконец, условия на V_{ij} не могут быть заметно ослаблены, так как если V_{ij} обладает локальными особенностями в конечных точках, выводящими его из $L^{m/2}$ (например, поведением $r^{-2-\varepsilon}$ при $r=0$), то утрачивается самосопряженность, а если V_{ij} выходит из $L^{m/2}$ на бесконечности (например, убывает лишь как $r^{-2+\varepsilon}$), то может оказаться, что $H_0 + \lambda V$ имеет связанные состояния при любом сколь угодно малом λ (см. теорему XIII.6).

Доказательство теоремы XIII.27. Рассмотрим сначала случай $N=2$. Тогда $H_0 = (-2\nu)^{-1}\Delta$ действует в $L^2(\mathbb{R}^m)$, так что по теореме IX.30

$$\|e^{-iH_0t}\varphi\|_r \leqslant (ct)^{-m[1/2-r^{-1}]}\|\varphi\|_{r'}, \tag{42}$$

где $2 \leqslant r \leqslant \infty$, $r^{-1} + r'^{-1} = 1$ и константа c выбрана подходящим образом. Итак, если $f \in L^p$ и $p > 2$, то по неравенствам Гёльдера и (42)

$$\|fe^{-iH_0t}f\varphi\|_2 \leqslant (ct)^{-mp^{-1}}\|f\|_p^2\|\varphi\|_2. \tag{43}$$

Итак, если $f \in L^{m-\varepsilon} \cap L^{m+\varepsilon}$ (и $m > 2+\varepsilon$), то

$$\int_{-\infty}^{\infty} \|fe^{-iH_0t}f\varphi\|_2\,dt \leqslant d\,(\|f\|_{m+\varepsilon} + \|f\|_{m-\varepsilon})^2\|\varphi\|_2$$

с подходящей константой d. Поскольку

$$f(H_0 - z)^{-1}f\varphi = i\int_0^\infty e^{izt}(fe^{-iH_0t}f)\varphi\,dt,$$

если $\operatorname{Im} z > 0$, заключаем, что при $\operatorname{Im} z > 0$

$$\| f(H_0 - z)^{-1} f\varphi \|_2 \leqslant d(\| f \|_{m+\varepsilon} + \| f \|_{m-\varepsilon})^2 \| \varphi \|_2.$$

Аналогичное рассуждение справедливо при $\operatorname{Im} z < 0$. Полагая $f = |V|^{1/2}$, находим, что

$$\sup_{z \notin \mathbb{R}} \| |V|^{1/2} (H_0 - z)^{-1} |V|^{1/2} \| < \infty.$$

Тогда доказываемая теорема (для случая $N = 2$) вытекает из следствия теоремы XIII.26.

Чтобы доказать теорему в общем случае, следует показать лишь, что

$$\sup_{z \notin \mathbb{R}} \| |V_{ij}|^{1/2} (H_0 - z)^{-1} |V_{kl}|^{1/2} \| < \infty$$

для всех i, j, k, l, и применить следствие теоремы XIII.26. Необходимо рассмотреть три различных случая.

Случай 1: $(ij) = (kl)$. Без потери общности предположим, что $i = k = 1$ и $j = l = 2$. Пусть $H_0^{(12)} = (-2\mu_{12})^{-1} \Delta_{12}$, где $\mu_{12}^{-1} = \mu_1^{-1} + \mu_2^{-1}$ и Δ_{12} — лапласиан по переменной r_{12} в якобиевой системе координат (см. § XI.5). Итак, разность $H_0 - H_0^{(12)}$ зависит только от остальных якобиевых координат $\zeta_2, \ldots, \zeta_{N-1}$, а потому коммутирует с любой функцией от $\zeta_1 = r_2 - r_1$. Если $f \in L^p(\mathbb{R}^m)$ и f_1 — умножение на $f(\zeta_1)$, то

$$\| f_1 e^{-itH_0} f_1 \varphi \|_2 = \left\| f_1 e^{-itH_0^{(12)}} f_1 \varphi \right\|_2. \tag{44}$$

Пусть $\varphi \in \mathscr{S}(\mathbb{R}^{m(N-1)})$. По основной двухчастичной оценке (43) имеем

$$\int \left| f_1 \left(e^{-itH_0^{(12)}} f_1 \varphi \right) (\zeta_1, \zeta_2, \ldots, \zeta_{N-1}) \right|^2 d\zeta_1 \leqslant$$
$$\leqslant (ct)^{-2mp^{-1}} \| f \|_p^4 \int |\varphi(\zeta)|^2 d\zeta_1.$$

Интегрируя по $\zeta_2, \ldots, \zeta_{N-1}$ и используя (44), мы видим, что (43) продолжает выполняться. Итак, действуя аналогично доказательству в двухчастичном случае, получаем

$$\sup_{z \notin \mathbb{R}} \| |V_{12}|^{1/2} (H_0 - z)^{-1} |V_{12}|^{1/2} \| < \infty.$$

Случай 2: $j = k$; i, j, l различны. Без потери общности предположим, что $i = 1$, $j = k = 2$, $l = 3$. Опять воспользуемся якобиевыми координатами с $\zeta_1 = r_2 - r_1$ и $r_{23} = \alpha\zeta_1 + \beta\zeta_2$ (где α, $\beta \neq 0$). Поскольку разность $H_0 - H_0^{(12)}$ коммутирует с функциями от ζ_1, то

$$\| |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0} |V_{23}|^{1/2} \varphi \| = \left\| |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0^{(12)}} |V_{23}|^{1/2} \varphi \right\|.$$

Фиксируем $\zeta' \equiv \langle\zeta_2, \ldots, \zeta_{N-1}\rangle$, и пусть $\varphi \in \mathscr{S}(\mathbb{R}^{m(N-1)})$. Тогда, в силу основной двухчастичной оценки (43),

$$\int |V_{12}(\zeta_1)| \left| e^{-itH_0^{(12)}} V_{23}^{1/2}(\alpha\zeta_1 - \beta\zeta_2)\varphi(\zeta_1, \zeta')\right|^2 d\zeta_1 \leqslant$$
$$\leqslant (ct)^{-2mp^{-1}} \|V_{12}\|_{p/2} \|V_{23}\|_{p/2} \alpha^{-2m/p} \int |\varphi(\zeta)|^2 d\zeta_1,$$

где мы воспользовались тем, что

$$\int |V_{23}(\alpha\zeta_1 - \beta\zeta_2)|^{p/2} d\zeta_1 = \alpha^{-1}\int |V_{23}(x)|^{p/2} dx$$

независимо от ζ_2. Интегрируя по ζ', находим, что

$$\| |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0^{(12)}} |V_{23}|^{1/2}\varphi\|_2^2 \leqslant \alpha^{-2/p}(ct)^{-2mp^{-1}} \|V_{12}\|_{p/2} \|V_{23}\|_{p/2} \|\varphi\|_2^2.$$

Из этой оценки следует, что

$$\sup_{z \notin \mathbb{R}} \| |V_{12}|^{1/2}(H_0 - z)^{-1} |V_{23}|^{1/2}\| < \infty,$$

как и в двухчастичном случае.

Случай 3: i, j, k, l все различны. Без потери общности предположим, что $i=1$, $j=2$, $k=3$, $l=4$. Тогда

$$\begin{aligned}
|(\varphi, |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0} |V_{34}|^{1/2}\psi)| &= \\
&= |(e^{itH_0^{(34)}}\varphi, |V_{12}|^{1/2} e^{-it(H_0 - H_0^{(34)})} |V_{34}|^{1/2}\psi)| = \\
&= |(|V_{34}|^{1/2} e^{itH_0^{(34)}}\varphi, |V_{12}|^{1/2} e^{-it(H_0 - H_0^{(34)})}\psi)| \leqslant \\
&\leqslant \| |V_{34}|^{1/2} e^{itH_0^{(34)}}\varphi\| \| |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0^{(12)}}\psi\|.
\end{aligned}$$

На первом шаге мы воспользовались тем, что $|V_{12}|^{1/2}$ и $H_0^{(34)}$ коммутируют, на втором шаге — тем, что $|V_{34}|^{1/2}$ коммутирует с $H_0 - H_0^{(34)}$ и $|V_{12}|^{1/2}$, а на последнем — тем, что коммутируют $|V_{12}|^{1/2}$ и $H_0 - H_0^{(34)} - H_0^{(12)}$. В силу критерия (1) и следствия теоремы XIII.25, оператор $|V_{ij}|^{1/2}$ $H_0^{(ij)}$-гладкий. Итак

$$\int_{-\infty}^{\infty} \| |V_{34}|^{1/2} e^{+itH_0^{(34)}}\varphi\| \| |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0^{(12)}}\psi\| dt \leqslant$$
$$\leqslant \left(\int_{-\infty}^{\infty} \| |V_{34}|^{1/2} e^{itH_0^{(34)}}\varphi\|^2 dt\right)^{1/2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \| |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0^{(12)}}\psi\|^2 dt\right)^{1/2} \leqslant$$
$$\leqslant \| |V_{34}|^{1/2}\|_{H_0^{(34)}} \| |V_{12}|^{1/2}\|_{H_0^{(12)}} \|\varphi\| \|\psi\|,$$

откуда

$$\int_{-\infty}^{\infty} |(\varphi, |V_{12}|^{1/2} e^{-itH_0} |V_{34}|^{1/2}\psi)| dt \leqslant c\|\varphi\| \|\psi\|.$$

Поскольку при $\operatorname{Im} z > 0$

$$(\varphi, |V_{12}|^{1/2}(H_0-z)^{-1}|V_{34}|^{1/2}\psi) = \\ = -i\int_0^\infty e^{izt}(\varphi, |V_{12}|^{1/2}e^{-iH_0t}|V_{34}|^{1/2}\psi)\,dt,$$

мы заключаем, что

$$\sup_{z\notin R}\| |V_{12}|^{1/2}(H_0-z)^{-1}|V_{34}|^{1/2}\| < \infty.$$

Это завершает доказательство случая 3. ∎

Если одна из частиц имеет бесконечную массу, то в случае 2 нельзя действовать так, как выше, поскольку $\alpha = 0$ при $\mu_2 = \infty$. В этой ситуации будет работать метод случая 3, и теорема остается справедливой.

B. Положительные коммутаторы и потенциалы отталкивания

В качестве второго приложения техники, основанной на понятии гладкости, мы разовьем метод, который позволит доказать, что гамильтонианы с потенциалами отталкивания имеют только абсолютно непрерывные спектры.

Теорема XIII.28 (теорема Путнама—Като). Пусть H и A — ограниченные самосопряженные операторы. Предположим, что оператор $C = i[H, A]$ положителен. Тогда $C^{1/2}$ H-гладкий. В частности, если $\operatorname{Ker} C = \{0\}$, то H имеет только абсолютно непрерывный спектр.

Доказательство. Второе утверждение следует из первого в силу теоремы XIII.23 и того факта, что $\operatorname{Ker}(C^{1/2}) = [\operatorname{Ran}(C^{1/2})]^\perp = \{0\}$. Непосредственное вычисление дает

$$\frac{d}{dt} e^{itH}Ae^{-itH}\varphi = ie^{itH}[H, A]e^{-itH}\varphi = e^{itH}Ce^{-itH}\varphi.$$

Таким образом,

$$\int_s^t (\varphi, e^{i\tau H}Ce^{-i\tau H}\varphi)\,d\tau = (\varphi, e^{itH}Ae^{-itH}\varphi) - (\varphi, e^{isH}Ae^{-isH}\varphi),$$

откуда

$$\int_s^t \|C^{1/2}e^{-i\tau H}\varphi\|^2\,d\tau \leqslant 2\|A\|\,\|\varphi\|^2.$$

Поскольку t и s произвольны, оператор $C^{1/2}$ H-гладкий и $\|C^{1/2}\|_H^2 \leqslant \|A\|/\pi$. ∎

Другой способ доказательства предложен в задаче 59.

Пример 5. Поскольку непосредственно построить операторы, коммутаторы которых положительны, не легко, мы приведем примеры, показывающие, что условия теоремы XIII.28 иногда выполняются. Действительно, имеет место утверждение, в каком-то смысле обратное к факту H-гладкости оператора $C^{1/2}$. Именно, если H — ограниченный, а B — произвольный ограниченный H-гладкий оператор, то существует ограниченный оператор A, такой, что $i[H, A]=B^*B$. Поскольку H-гладкие операторы с нулевым ядром в случае, когда H обладает лишь абсолютно непрерывным спектром, существуют (см. пример 4), то можно построить много пар H, A, для которых выполняются условия теоремы XIII.28. Докажем приведенное утверждение. Если B H-гладкий, то, следуя построению в доказательстве теоремы XIII.24, можно показать, что существует оператор $\Gamma_H^+(B^*B) \equiv \equiv \operatorname{s-lim}_{s\to\infty} i\int_0^s e^{itH}B^*Be^{-itH}\,dt$. Далее,

$$[H,\ \Gamma_H^+(B^*B)] = \operatorname{s-lim}_{s\to\infty} i\int_0^s e^{itH}[H,\ B^*B]\,e^{-itH}\,dt =$$
$$= \operatorname{s-lim}_{s\to\infty}(e^{isH}B^*Be^{-isH} - B^*B) = -B^*B,$$

где мы воспользовались тем, что $e^{itH}B^*Be^{-itH}\varphi$ принадлежит L^2 вместе с равномерно ограниченной производной, откуда $\operatorname{s-lim}_{s\to\infty}(e^{isH}B^*Be^{-isH})=0$ (задача 62). Полагая $A=i\Gamma_H^+(B^*B)$, видим, что $i[H, A]=B^*B$.

Мы хотим применить идею, основанную на положительных коммутаторах, для доказательства того, что N-частичные шредингеровы операторы с потенциалами отталкивания имеют только абсолютно непрерывный спектр. Потенциал отталкивания — это такая функция V на $\mathbb{R}^m$, что $V(r\hat{e}) \leqslant V(r'\hat{e})$ для каждого единичного вектора $\hat{e}$ и всех $r>r'$. Такие потенциалы отталкивания стремятся развести частицы друг от друга, так что мы ожидаем, что связанных состояний нет, а потому и спектры только абсолютно непрерывные. Имеется иной способ описания того факта, что V — потенциал отталкивания, делающий связь с положительностью коммутаторов более прозрачной. Пусть $U(\theta)$ — семейство масштабных преобразований, т. е. $(U(\theta)\psi)(r)=e^{m\theta/2}\psi(e^\theta r)$. Тогда $[U(\theta)VU(\theta)^{-1}](r)=V(e^\theta r)$, т. е. потенциалы отталкивания удовлетворяют тому условию, что операторнозначная функция $V_\theta \equiv U(\theta)VU(\theta)^{-1}$ монотонно убывает при возрастании θ. Поскольку $U(\theta)H_0U(\theta)^{-1}=e^{-2\theta}H_0$, кинетическая энергия тоже монотонно убывает при масштабных преобразованиях. Итак, формально

$$\frac{d}{d\theta} U(\theta)(H_0+V) U(\theta)^{-1} \leqslant 0.$$

Обозначим через

$$D=\frac{i}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(x_i\frac{\partial}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_i}x_i\right)$$

генератор $U(\theta)$ (т. е. $U(\theta)=\exp(-i\theta D)$); тогда, опять-таки формально, $i[D, H]\geqslant 0$.

С физической точки зрения существует другой способ обнаружить неотрицательность коммутатора $i[D, H]$. Действительно, $D=-(i/2)[H, x^2]$. Поэтому если определить момент инерции в гейзенберговой картине как

$$I(t)=e^{+iHt}x^2e^{-iHt},$$

то на формальном уровне условие $i[D, H]\geqslant 0$ эквивалентно условию $\ddot{I}(t)\geqslant 0$. Легко видеть, что в классической теории потенциалы отталкивания удовлетворяют этому условию, и мы действительно применяли подобные идеи в теореме XI.3.

Теорема XIII.28 неприменима в этой ситуации непосредственно в силу следующих причин. (1) Вычисления проводились формально; как обычно, здесь необходимо аккуратно следить за областями определения и существенными областями определения, однако оказывается, что ни в каких дополнительных технических предположениях надобности нет. (2) H не ограничен. Однако, поскольку H положителен, само по себе это не было бы очень серьезным препятствием (см. задачу 61). (3) D не ограничен. Вот это уже более серьезно. Оператор d/dx, входящий в D, контролировать нетрудно, поскольку он H-ограничен, но вот оператор умножения на x трудно контролировать непосредственно. В доказательстве приводимой ниже теоремы мы применим обрезание оператора умножения на x, что усложнит вычисления. Поскольку свойство отталкивания связано с условием $dV/dr\leqslant 0$, то в D важнее производная, чем x; таким образом, обрезание x не нарушит условия $i[D, H]\geqslant 0$.

Теорема XIII.29 (теорема Лавина). Пусть $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^m)$ $(m\geqslant 3)$. Пусть V — функция на $\mathbb{R}^m$, такая, что

(i) умножение на V H_0-ограничено с относительной гранью, равной нулю;

(ii) производная в смысле обобщенных функций $\sum_{i=1}^{n} x_i\,\partial V/\partial x_i$ отрицательна.

Тогда оператор $H = H_0 + V$ имеет только абсолютно непрерывный спектр.

Доказательство. Выберем α, удовлетворяющее условию $1/2 < \alpha < 3/2$, и введем $g(r) = \int_0^r (1+\rho^2)^{-\alpha}\, d\rho$. Пусть A — оператор

$$Af = i\sum_{k=1}^{m}\left[x_k \frac{g(r)}{r}\frac{\partial f}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(x_k \frac{g(r) f}{r}\right)\right]. \tag{45}$$

Поскольку $g(r)\, r^{-1} \in C^\infty$, то A отображает множество C_0^∞ в себя. Если g в (45) заменить на r, то полученный оператор будет в точности генератором масштабных преобразований, поэтому (45) — частично обрезанная аппроксимация этого генератора. На самом деле A обладает непосредственной геометрической интерпретацией. Пусть семейство операторов T_γ: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ определяется условиями: $T_0 x = x$, а вектор $y(\gamma) = T_\gamma x$ есть решение уравнения $\dot{y} = |y|^{-1} g(|y|)\, y$. Тогда

$$(e^{-i\gamma A} f)(x) = N_\gamma(x)\, f(T_\gamma x),$$

где $N_\gamma(x)$ — нормирующий множитель (корень квадратный из якобиана).

Наша ближайшая цель — доказать, что для некоторой константы $c > 0$

$$i[A, H] \geqslant c(1+r^2)^{-\alpha-1},$$

в том смысле, что для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$

$$i(A\varphi, H\varphi) - i(H\varphi, A\varphi) \geqslant c(\varphi, (1+r^2)^{-\alpha-1}\varphi). \tag{46}$$

Сначала проведем такую выкладку:

$$\begin{aligned} &i(A\varphi, V\varphi) - i(V\varphi, A\varphi) = \\ &= 2\,\mathrm{Re}\sum_{i=1}^{m}\int V(x)\left[\overline{\varphi(x)}\left\{\frac{x_i}{r} g(r)\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{x_i}{r} g(r)\right)\right\}\varphi(x)\right] dx = \\ &= 2\int V(x)\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial}{\partial x_i} x_i\left(\frac{g(r)}{r}|\varphi(x)|^2\right) dx \geqslant 0, \end{aligned}$$

последнее в силу (ii). Итак, нам необходимо доказать (46) лишь при $V = 0$ — задача скучная, но не слишком сложная. Предварительно отметим, что для всех r

$$rg'(r) - g(r) \leqslant 0, \tag{47a}$$

$$g''(r) = -2\alpha r(1+r^2)^{-\alpha-1}, \tag{47b}$$

$$g'''(r) + (2\alpha+1)\, r^{-1} g''(r) \leqslant 0. \tag{47c}$$

Чтобы доказать (47a), заметим, что функция $(1+r^2)^{-\alpha}$ монотонно убывает, поэтому и ее среднее значение $r^{-1}\int_0^r (1+\rho^2)^{-\alpha}\,d\rho = g(r)\,r^{-1}$ также монотонно убывает. Поскольку $rg'-g=r^2(r^{-1}g)'$, (47a) доказана. Две другие формулы следуют из явных выкладок:

$$g''(r) = -2\alpha r(1+r^2)^{-\alpha-1},$$
$$g'''(r)+(2\alpha+1)\,r^{-1}g''(r) = -4\alpha(\alpha+1)(1+r^2)^{-\alpha-2}.$$

Докажем далее, что

$$-\Delta\left(\sum_{j=1}^m \frac{\partial g_j}{\partial x_j}\right) \geqslant c\,(1+r^2)^{-\alpha-1}, \tag{48}$$

где $g_j(x) = x_j r^{-1} g(r)$. Действительно,

$$\frac{\partial g_j}{\partial x_k} = r^{-1}g\,(\delta_{jk}-r^{-2}x_jx_k)+r^{-2}x_jx_kg'. \tag{49}$$

Таким образом,

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial g_j}{\partial x_j} = (n-1)\,r^{-1}g+g'.$$

Пользуясь тем, что для сферически симметричной функции h

$$\Delta h = r^{-1}(rh)''+(n-3)\,r^{-1}h',$$

находим, что

$$-\Delta\left(\sum_{j=1}^n \frac{\partial g_j}{\partial x_j}\right) = -(g'''+(2\alpha+1)\,r^{-1}g'')-(2n-2\alpha-3)\,r^{-1}g''-$$
$$-(n-1)(n-3)\,r^{-3}(rg'-g).$$

Поскольку $n\geqslant 3$ и $\alpha<3/2$, (48) следует из (47). Наконец, на функциях из C_0^∞ вычисление коммутатора дает

$$-\left[g_k\frac{\partial}{\partial x_k},\ H_0\right] = \sum_{l=1}^n \left[g_k\frac{\partial}{\partial x_k},\ \frac{\partial^2}{\partial x_l^2}\right] = \sum_{l=1}^n 2p_l\frac{\partial g_k}{\partial x_l}p_k+i\,\frac{\partial^2 g_k}{\partial x_l^2}\,p_k,$$

где $p_k = i^{-1}\,\partial/\partial x_k$. Применяя равенство

$$-\left[g_k\frac{\partial}{\partial x_k}+\frac{\partial}{\partial x_k}g_k,\ H_0\right] = -\left[g_k\frac{\partial}{\partial x_k},\ H_0\right]-\left[g_k\frac{\partial}{\partial x_k},\ H_0\right]^*,$$

видим, что

$$i\,[A,\ H_0] = \sum_{l,\ k} 2p_k\left(\frac{\partial g_l}{\partial x_k}+\frac{\partial g_k}{\partial x_l}\right)p_l-\Delta\left(\sum_j \frac{\partial g_j}{\partial x_j}\right).$$

Итак, в силу (48) доказательство оценки (46) свелось к доказательству неравенства

$$\sum_{i,\,k} 2p_k \left(\frac{\partial g_i}{\partial x_k} + \frac{\partial g_k}{\partial x_i}\right) p_i \geqslant 0. \tag{50}$$

В силу (49) левая часть (50) равна

$$4\sum_{i,\,k} \{p_k [(r^{-1}g)(\delta_{ik} - r^{-2}x_i x_k)] p_i + p_k (r^{-2}g') x_i x_k p_i\}.$$

Фиксируем $x \in \mathbb{R}^n$. Тогда, по неравенству Шварца, матрица $\{\delta_{ik} - r^{-2}x_i x_k\}$ положительно определена. Далее, матрица $\{x_i x_k r^{-2}\}$, очевидно, положительно определена, так что (50) выполняется, и это завершает доказательство (46).

Теперь необходимо убедиться, что $A \ll H$, т. е. что A H-ограничен с относительной гранью, равной нулю. Поскольку $V \ll H_0$ по предположению, следует доказать лишь, что $A \ll H_0$. Но $\partial/\partial x_i \ll H_0$, оператор $x_i g r^{-1}$ ограничен и

$$A = 2i \sum_{i=1}^{n} x_i g r^{-1} \partial/\partial x_i + i(n-1) r^{-1}g + ig',$$

так что свойство $A \ll H_0$ доказано. Поскольку C_0^∞ — существенная область определения для H и $A \ll H$, то (46) выполняется для всех $\varphi \in D(H)$.

Пусть теперь $\varphi \in D(H)$, и пусть B — умножение на $c^{1/2}(1+r^2)^{-(\alpha+1)/2}$. Тогда утверждается, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \| Be^{-itH}\varphi \|^2 \, dt \leqslant d \| (H+I)\varphi \|^2 \tag{51}$$

при подходящей константе d. Действительно, в силу (46),

$$\int_{-\infty}^{\infty} \| Be^{-itH}\varphi \|^2 \, dt = \int_{-\infty}^{\infty} (e^{-itH}\varphi,\ B^*Be^{-itH}\varphi)\, dt \leqslant$$

$$\leqslant \int_{-\infty}^{\infty} i\{(Ae^{-itH}\varphi,\ He^{-itH}\varphi) - (He^{-itH}\varphi,\ Ae^{-itH}\varphi)\}\, dt \leqslant$$

$$\leqslant 2 \sup_{-\infty < s < \infty} |(e^{-isH}\varphi,\ Ae^{-isH}\varphi)| \leqslant 2\|\varphi\| \|A(H+I)^{-1}\| \|(H+I)\varphi\|,$$

что доказывает (51).

Для завершения доказательства отметим, что из (51) следует H-гладкость оператора $B(H+I)^{-1}$. Поскольку $\operatorname{Ran}(B^*)$ и $\operatorname{Ran}(H+I)^{-1}$ плотны замыкание множества $\operatorname{Ran}(H+I)^{-1}B^*$ есть $\mathcal{H}$. Из теоремы XIII.23, таким образом, вытекает, что $\mathcal{H} \subset \mathcal{H}_{ac}$. Поэтому H имеет только абсолютно непрерывный спектр. ∎

Следствие. Пусть $m(N-1)\geqslant 3$. Пусть $\tilde{H}_0=\sum_{i=1}^{N}(-2\mu_i)^{-1}\Delta_i$ в $L^2(\mathbb{R}^{Nm})$, и пусть H_0 — оператор $\tilde{H}_0$ за вычетом движения центра масс. Предположим, что для любых i, j функции V_{ij}: $\mathbb{R}^m\to\mathbb{R}$ удовлетворяют условиям

(i) $V_{ij}\in L^p(\mathbb{R}^m)+L^\infty(\mathbb{R}^m)$ ($p=2$ при $m\leqslant 3$, $p>2$ при $m=4$, $p=m/2$ при $m\geqslant 5$);

(ii) $\sum_{k=1}^{m}x_k\partial V_{ij}/\partial x_k\leqslant 0$ в смысле обобщенных функций.

Тогда оператор $H=H_0+\sum_{i<j}V_{ij}(r_i-r_j)$ в $L^2(\mathbb{R}^{m(N-1)})$ обладает только абсолютно непрерывным спектром.

Доказательство. Пусть ζ — якобиева система координат, так что $H_0=\sum_{i=1}^{N-1}(-2M_i)^{-1}\Delta_{\zeta_i}$, и пусть $q_i=(2M_i)^{1/2}\zeta_i$, так что $H_0=-\sum_{i=1}^{N-1}\Delta_{q_i}$. Если можно показать, что $\sum_{i=1}^{N-1}q_i\cdot\nabla_{q_i}V_{jk}\leqslant 0$ для всех j, k, то требуемый результат следует из теоремы XIII.29. Предположим сначала, что каждая функция V_{jk} гладкая. Тогда $V_{jk}(r)=V_{jk}\left(\sum_{i=1}^{N-1}\alpha_i q_i\right)$ с соответствующими α_i. Поэтому

$$\sum_i q_i\cdot\nabla_{q_i}V_{jk}\left(\sum_l\alpha_l q_l\right)=\left(\sum_i\alpha_i q_i\right)\cdot(\nabla_r V_{jk})(r)\,|_{r=\sum\alpha_l q_l}=$$
$$=(r\cdot\nabla_r V_{jk})(r)\,|_{r=\sum\alpha_l q_l}.$$

Последнее неположительно по условию. При произвольных V_{jk} нужно произвести усреднение с основными функциями и повторить предыдущее построение. ∎

C. Локальная гладкость и волновые операторы для потенциалов отталкивания

В качестве последнего вопроса из теории гладких операторов мы обсудим некоторое расширение теоремы XIII.24. «Неприятность» с этой теоремой состоит в том, что ее результат слишком силен: H и H_0 унитарно эквивалентны. В частности, она не применима к квантовым гамильтонианам, имеющим какой бы то ни было чисто точечный спектр. Поэтому мы введем понятие более слабое, чем гладкость:

Определение. Пусть H — самосопряженный оператор со спектральными проекторами E_Ω. Оператор A называют ***H-гладким*** на Ω, где Ω — борелево множество, тогда и только тогда, когда оператор AE_Ω является H-гладким.

Теорема XIII.30. Пусть H — самосопряженный оператор с резольвентой R и спектральными проекторами $\{E_\Omega\}$. Пусть $\Omega \subset \mathbb{R}$. Предположим, что $D(A) \supset D(H)$ и что *либо*

(a) $\sup\limits_{0<|\varepsilon|<1,\ \lambda\in\Omega} |\varepsilon| \| AR(\lambda+i\varepsilon) \|^2 < \infty,$

либо

(b) $\sup\limits_{0<\varepsilon<1,\ \lambda\in\Omega} \| AR(\lambda+i\varepsilon) A^* \| < \infty.$

Тогда A H-гладкий на $\bar{\Omega}$ — замыкании Ω.

Доказательство. (a) Для каждого $\varepsilon \neq 0$ норма $\| AR(\lambda+i\varepsilon) \|$ непрерывна по λ, поэтому оценка

$$C = \sup\{ |\varepsilon| \| AR(\lambda+i\varepsilon) \|^2 \mid \lambda\in\Omega,\ 0<|\varepsilon|<1 \}$$

продолжается на все $\lambda \in \bar{\Omega}$. Предположим, что $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \bar{\Omega}$. Выберем $\lambda_0 \in \bar{\Omega}$ так, что $|\lambda-\lambda_0| = \operatorname{dist}(\lambda, \bar{\Omega})$. Тогда

$$\begin{aligned}
&|\varepsilon| \| AR(\lambda+i\varepsilon) E_{\bar{\Omega}}\varphi \|^2 = \\
&\quad = |\varepsilon| \| AR(\lambda_0+i\varepsilon) [I-(\lambda_0-\lambda) R(\lambda+i\varepsilon)] E_{\bar{\Omega}}\varphi \|^2 \leqslant \\
&\quad \leqslant |\varepsilon| \| AR(\lambda_0+i\varepsilon) \|^2 \| (I-(\lambda_0-\lambda) R(\lambda+i\varepsilon)) E_{\bar{\Omega}} \|^2 \| \varphi \|^2 \leqslant \\
&\quad \leqslant 4 |\varepsilon| \| AR(\lambda_0+i\varepsilon) \|^2 \| \varphi \|^2,
\end{aligned}$$

поскольку $|\lambda_0-\lambda|\, |x-\lambda+i\varepsilon|^{-1} < 1$ для любого $x \in \bar{\Omega}$. Итак,

$$\sup_{\lambda\in\mathbb{R},\ \varepsilon\neq 0} |\varepsilon| \| AR(\lambda+i\varepsilon) E_{\bar{\Omega}} \| < \infty,$$

поэтому $AE_{\bar{\Omega}}$ H-гладкий в силу теоремы XIII.25 и замечания, сделанного после ее формулировки.

(b) Поскольку $(AR(\lambda+i\varepsilon) A^*)^* = AR(\lambda-i\varepsilon) A^*$, имеем

$$c = \sup_{\lambda\in\Omega,\ 0<|\varepsilon|<1} \| AR(\lambda+i\varepsilon) A^* \| < \infty.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned}
&\sup_{\lambda\in\Omega,\ 0<|\varepsilon|<1} |\varepsilon| \| R(\lambda+i\varepsilon) A^* \|^2 = \\
&\quad = \sup_{\lambda\in\Omega,\ 0<|\varepsilon|<1} |\varepsilon| \| AR(\lambda+i\varepsilon) R(\lambda-i\varepsilon) A^* \| = \\
&\quad = \sup_{\lambda\in\Omega,\ 0<|\varepsilon|<1} {}^1/_2 \| A[R(\lambda+i\varepsilon) - R(\lambda-i\varepsilon)] A^* \| \leqslant c < \infty.
\end{aligned}$$

Поскольку $\| R(\lambda+i\varepsilon) A^* \| = \| AR(\lambda-i\varepsilon) \|$, то выполняются условия пункта (a). ∎

Теперь мы можем сформулировать обобщение теоремы XIII.24.

Теорема XIII.31. Пусть H и H_0 — самосопряженные операторы со спектральными проекторами E_Ω и $E_\Omega^{(0)}$. Предположим, что

$$H - H_0 = A^* B$$

в смысле (35). Предположим, что A H-ограниченный, а также H-гладкий на некотором ограниченном открытом интервале $\Omega \subset \mathbb{R}$ и что B H_0-ограниченный и H_0-гладкий на Ω. Тогда существуют пределы

$$W_\pm = \operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t} E_\Omega^{(0)}, \quad \tilde{W}_\pm = \operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} e^{iH_0 t} e^{-iHt} E_\Omega.$$

Более того,

$$W_\pm^* = \tilde{W}_\pm, \tag{52}$$

$$\tilde{W}_\pm W_\pm = E_\Omega^{(0)}; \quad W_\pm \tilde{W}_\pm = E_\Omega. \tag{53}$$

Доказательство. Допустим, мы доказали, что $W_\pm$ существуют и что $\operatorname{Ran} W_\pm \subset E_\Omega$. Тогда, в силу симметрии и того, что $H_0 - H = -B^* A$, операторы $\tilde{W}_\pm$ существуют и $\operatorname{Ran} \tilde{W}_\pm \subset E_\Omega^{(0)}$. Равенство (52) очевидно, а (53) следуют из того, что $W_\pm$ (соответственно $\tilde{W}_\pm$) — частичные изометрии с начальным пространством $E_\Omega^{(0)}$ (соответственно E_Ω). Мы покажем, что операторы $W_\pm$ существуют и $\operatorname{Ran} W_\pm \subset E_\Omega$, доказав, что существует $\operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} E_\Omega e^{iHt} e^{-iH_0 t} E_\Omega^{(0)}$ и

$$\operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} E_{\mathbb{R} \setminus \Omega} e^{iHt} e^{-iH_0 t} E_\Omega^{(0)} = 0. \tag{54}$$

Доказательство существования первого предела идентично доказательству теоремы XIII.24, а (54) достаточно доказать

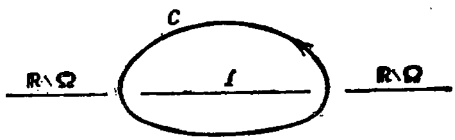


Рис. XIII.4. Контур интегрирования.

с $E_I^{(0)}$ вместо $E_\Omega^{(0)}$ для произвольного компактного подынтервала $I \subset \Omega$. Для такого I пусть C — такой контур, как на рис. XIII.4. Тогда

$$E_{\mathbb{R} \setminus \Omega} e^{iHt} e^{-iH_0 t} E_I^{(0)} \varphi = \frac{1}{2\pi i} \oint_C E_{\mathbb{R} \setminus \Omega} (H - z)^{-1} e^{iHt} e^{-iH_0 t} E_I^{(0)} \varphi \, dz -$$

$$- \frac{1}{2\pi i} \oint_C E_{\mathbb{R} \setminus \Omega} e^{iHt} e^{-iH_0 t} (H_0 - z)^{-1} E_I^{(0)} \varphi \, dz =$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint_C E_{\mathbb{R} \setminus \Omega} e^{iHt} \left[(H - z)^{-1} - (H_0 - z)^{-1} \right] e^{-iH_0 t} E_I^{(0)} \varphi \, dz.$$

Поскольку последнее подынтегральное выражение равномерно ограничено на C, достаточно, в силу теоремы о мажорированной сходимости, доказать, что

$$\operatorname*{s-lim}_{t\to\mp\infty}\left[(H-z)^{-1}-(H_0-z)^{-1}\right]e^{-iH_0t}E_I^{(0)}=0 \tag{55}$$

для всех невещественных z. Однако

$$\begin{aligned}|(\psi,\ [(H-z)^{-1}-(H_0-z)^{-1}]e^{-iH_0t}E_I^{(0)}\varphi)|&=\\ =|(A(H-z)^{-1}\psi,\ B(H_0-z)^{-1}e^{-iH_0t}E_I^{(0)}\varphi)|&\leqslant\\ \leqslant\|A(H-z)^{-1}\|\,\|B(H_0-z)^{-1}e^{-iH_0t}E_I^{(0)}\varphi\|\,\|\psi\|&.\end{aligned}$$

Итак, чтобы доказать (55), достаточно показать, что

$$\lim_{t\to\pm\infty}\|B(H_0-z)^{-1}e^{-iH_0t}E_I^{(0)}\varphi\|=0. \tag{56}$$

Но, в силу предположений о гладкости, функция от t в (56) квадратично интегрируема. Более того, она имеет равномерно ограниченную производную, поэтому (56) выполняется (задача 62). ▮

Следствие. Предположим, что H и H_0 — самосопряженные операторы со спектральными проекторами E_Ω и $E_\Omega^{(0)}$ и что

$$H-H_0=A^*B,$$

где B H_0-ограничен, а A H-ограничен. Пусть $S\subset\mathbb{R}$, причем $S=\bigcup_{l=1}^{\infty}\Omega_l$, а каждое Ω_l — ограниченный открытый интервал. Предположим, что

(i) A H-гладкий на каждом Ω_l, а B H_0-гладкий на каждом Ω_l;

(ii) как множество $\sigma(H)\setminus S$, так и $\sigma(H_0)\setminus S$ имеют нулевую лебегову меру.

Тогда обобщенные волновые операторы $\operatorname*{s-lim}_{t\to\mp\infty}e^{iHt}e^{-iH_0t}E_{\mathrm{ac}}^{(0)}$ существуют и полны.

Доказательство. Поскольку $S=\bigcup_{l=1}^{\infty}\Omega_l$ и $E_{\mathrm{ac}}^{(0)}=E_S^{(0)}$, то существование будет доказано, если мы убедимся в том, что $\lim_{t\to\mp\infty}e^{iHt}e^{-iH_0t}\varphi$ существует для $\varphi\in\bigcup_{l=1}^{\infty}\operatorname{Ran}E_{\Omega_l}^{(0)}$. Но это есть прямое следствие предыдущей теоремы. Поскольку обратные волновые операторы существуют в силу симметрии, то волновые операторы полны. ▮

Одно возможное приложение этого следствия будет дано в § 8. Здесь же мы применим его для доказательства одного результата из теории потенциалов отталкивания. Этот результат не является лучшим из возможных (см. Замечания).

Теорема XIII.32. Пусть H — оператор типа указанного в следствии теоремы XIII.29. Предположим, что каждый V_{ij} — функция от $|x|$, удовлетворяющая условию $|V_{ij}(x)| \leqslant C(1+|x|)^{-5/2-\varepsilon}$ для каждых i и j и некоторого $\varepsilon > 0$. Тогда волновые операторы $\Omega^{\pm} = \operatorname{s-lim}_{t \to \pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}$ существуют и унитарны.

Доказательство. Поскольку уже известно, что H имеет только абсолютно непрерывный спектр, достаточно доказать, что волновые операторы существуют и полны. В обозначениях, использованных в доказательстве теоремы XIII.29, пусть

$$A_{jk} = +i\left[g(r_j - r_k)\frac{d}{dr_{jk}} + \frac{d}{dr_{jk}}g(r_j - r_k)\right], \quad A = \sum_{j=k} A_{jk},$$

где $r_{jk} = |r_j - r_k|$, а d/dr_{jk} определено так, что

$$r_{jk}d/dr_{jk} = (r_j - r_k)\cdot(\nabla_j - \nabla_k).$$

Далее, $i[A_{ij}, V_{ij}] \geqslant 0$, как в доказательстве теоремы XIII.29, и $i[A_{kl}, V_{ij}] = 0$, если i, j, k, l различны. Наконец, если различны i, j, k, то

$$i[A_{ik} + A_{kj}, V_{ij}(r_{ij})] = \mathbf{a}(i, j, k)\cdot(\nabla V_{ij})(r_{ij}),$$

где $\mathbf{a}(i, j, k) = g(r_{ik})\mathbf{e}_{ik} + g(r_{kj})\mathbf{e}_{kj}$ и $\mathbf{e}_{ik} = r_{ik}^{-1}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)$. Поскольку V_{ij} — функция только от $|x|$ и $(\mathbf{x}\cdot\nabla)V_{ij} \leqslant 0$, заключаем, что $i[A_{ik} + A_{kj}, V_{ij}] \geqslant 0$, если $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\cdot(\mathbf{a}(i, j, k)) \geqslant 0$. Но

$$\begin{aligned}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\cdot\mathbf{a}(i, j, k) &= r_{ik}g(r_{ik}) + r_{kj}g(r_{kj}) + \\ &+ (\mathbf{e}_{ik}\cdot\mathbf{e}_{kj})(r_{ik}g(r_{kj}) + r_{kj}g(r_{ik})) \geqslant \\ &\geqslant (r_{ik} - r_{kj})(g(r_{ik}) - g(r_{jk})) \geqslant 0,\end{aligned}$$

ибо g монотонно. Отсюда следует, что $i[A, V] \geqslant 0$, так что вычисления, идентичные тем, которые проводились в теореме XIII.29, показывают, что (задача 64)

$$i[A, H] \geqslant c(1 + r_{jk})^{-3-\varepsilon}$$

при подходящей константе c. Снова следуя доказательству теоремы XIII.29, заключаем, что оператор $(1 + r_{jk})^{-3/2-\varepsilon}(H + I)^{-1}$ H-гладкий. Поскольку

$$\|\,|V_{ij}|^{3/5}(H + I)^{-1}e^{-iHt}\varphi\| \leqslant c^{1/2}\|(1 + r_{jk})^{-3/2-\varepsilon}(H + I)^{-1}e^{-iHt}\varphi\|,$$

оператор $|V_{ij}|^{3/5}(H + I)^{-1}$ H-гладкий, а потому $|V_{ij}|^{3/5}$ H-гладкий на любом компактном множестве. По предположению $|V_{ij}|^{2/5} \in L^{m+\varepsilon}(\mathbb{R}^m) \cap L^{m-\varepsilon}(\mathbb{R}^m)$, так что, согласно доказательству теоремы XIII.27, $|V_{ij}|^{2/5}$ H_0-гладкий. Доказываемый результат теперь вытекает из предыдущего следствия. ∎

XIII.8. Отсутствие сингулярного спектра III: пространства L^2 с весом

Как мы уже видели, достаточное условие того, что множество $\sigma_{\text{sing}}(H)$ пусто, состоит в существовании плотного набора векторов $X \subset \mathcal{H}$, такого, что внутреннее произведение $(\varphi, (H-z)^{-1}\varphi)$ остается ограниченным при $z \to \lambda \in \mathbb{R}$ для любого $\varphi \in X$. Имеется естественный способ проверки этого условия в конкретной ситуации. Предположим, что множество $X \subset \mathcal{H}$ плотно, существует норма $|||\cdot|||_+$ на X, превращающая X в банахово пространство, и $|||\varphi|||_+ \geqslant \|\varphi\|$ для любого $\varphi \in X$. Тогда внутреннее произведение на $\mathcal{H}$ позволяет естественно реализовать $\mathcal{H}$ как подмножество в X^*. Если $|||\cdot|||_-$ обозначает норму на X^*, то $\|\varphi\| \geqslant |||\varphi|||_-$ для любого $\varphi \in \mathcal{H}$. Мы уже рассматривали такую ситуацию и связанные с ней понятия в § VIII.6 и в дополнении к § XI.6. Пусть $z \in \mathbb{C}$ и $\operatorname{Im} z \neq 0$. Тогда $(H-z)^{-1}$ переводит $\mathcal{H}$ в $\mathcal{H}$, а потому X в X^*. Конечно, норма оператора $(H-z)^{-1}$ как отображения из $\mathcal{H}$ в $\mathcal{H}$ расходится, когда z стремится к спектру $\sigma(H)$, однако предположим, что она остается ограниченной, если этот оператор рассматривать как отображение из X в X^*. Тогда

$$|(\varphi, (H-z)^{-1}\varphi)| \leqslant |||\varphi|||_+^2 \, \|(H-z)^{-1}\|_{+,-},$$

где

$$\|A\|_{+,-} = \sup_{\psi \neq 0,\, \psi \in X} |||A\psi|||_- / |||\psi|||_+,$$

так что можно заключить, что $\sigma_{\text{sing}}(H) = \varnothing$ в силу теоремы XIII.20.

Естественно попытаться реализовать эту идею при помощи техники теории возмущений. Точнее говоря, мы исследуем оператор $H = H_0 + V$ и начнем с доказательства оценок на $(H_0 - z)^{-1}$ как отображение из X в X^*. Мы будем рассматривать операторы Шредингера и возьмем $H_0 = -\Delta$. Чтобы обоснсвать наш выбор множества X, возьмем $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ и вычислим

$$\lim_{y \downarrow 0} (f, [(H_0 - x + iy)^{-1} - (H_0 - x - iy)^{-1}] f) =$$

$$= \lim_{y \downarrow 0} \int |\hat{f}(p)|^2 \, 2i \operatorname{Im}[(p^2 - x + iy)^{-1}] \, d^n p =$$

$$= -2i\pi \int |\hat{f}(p)|^2 \, \delta(p^2 - x) \, d^n p,$$

последнее в силу уравнения (V.4). Итак, для того чтобы $(f, (H_0 - x + iy)^{-1} f)$ имело предел при $y \downarrow 0$, функция $\hat{f}$ должна обладать «естественным» сужением на сферу радиуса $x^{1/2}$. В силу исследования, проведенного нами в § IX.9, естественно выбрать в качестве X пространство L^2_δ (с $\delta > 1/2$); тогда X^* есть $L^2_{-\delta}$:

$$L^2_\delta(\mathbb{R}^n) = \left\{ f(x) \,\middle|\, \|f\|_\delta^2 \equiv \int (1 + x^2)^\delta |f(x)|^2 \, dx < \infty \right\}.$$

Мы будем все время опираться на оценки, доказанные в § IX.9, особенно на теоремы IX.39 и IX.41.

Определение. Оператор умножения на функцию $V(x)$ называется **потенциалом Агмона**, если $V(x) = (1+x^2)^{-1/2-\varepsilon} W(x)$ для некоторого $\varepsilon > 0$ и некоторого W, являющегося относительно компактным возмущением оператора $(-\Delta)$.

Потенциалы Агмона образуют векторное пространство $-\Delta$-ограниченных возмущений с нулевой относительной гранью (см. задачу 20 к гл. X).

Пример 1. Пусть $p > n/2$, $p < \infty$ и $p \geqslant 2$. Тогда любая функция $W \in L^p(\mathbb{R}^n)$ задает относительно компактный оператор (задача 41), так что любой V, такой, что $(1+x^2)^{1/2+\varepsilon} V \in L^p$, является потенциалом Агмона.

Пример 2. Пусть $W \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$; определим $V(x) = (1+x^2)^{-1/2-\varepsilon} W(x)$. Чтобы убедиться, что V — потенциал Агмона, достаточно доказать, что $U(x) = (1+x^2)^{-\varepsilon/2} W(x)$ относительно компактен. Но это справедливо, поскольку $U(x)$ принадлежит $L^p + (L^\infty)_\varepsilon$ для всех p (см. задачу 41).

Сформулируем теперь основную теорему этого раздела.

Теорема XIII.33 (теорема Агмона — Като — Куроды). Пусть V — потенциал Агмона, и пусть $H = H_0 + V$, где $H_0 = -\Delta$. Тогда:

(a) множество $\mathscr{E}_+$ положительных собственных значений H есть дискретное подмножество в $(0, \infty)$, и каждое собственное значение имеет конечную кратность;

(b) если C — произвольный компактный подынтервал в $(0, \infty) \setminus \mathscr{E}_+$ и $\delta > 1/2$, то

$$\sup_{\lambda \in C,\ 0 < y < 1} \ \sup_{\psi,\ \varphi \in L^2_\delta;\ \|\varphi\|_\delta \leqslant 1,\ \|\psi\|_\delta \leqslant 1} |(\psi, (H - \lambda - iy)^{-1} \varphi)| < \infty;$$

(c) $\sigma_{\text{sing}}(H) = \varnothing$;

(d) волновые операторы $\Omega^\pm(H, H_0)$ существуют и полны.

Доказательство теоремы XIII.33 хотя и элегантно, но довольно длинно, поэтому мы разобьем его на ряд лемм. После доказательства (a) мы проведем несколько технических оценок, которые позволят нам вывести (c) и (d) из (b). Затем мы докажем (b) в случае $V = 0$. Наконец, мы воспользуемся доказанными для H_0 оценками, теоремами IX.39 и IX.41 и техникой бутстрапа для завершения доказательства. Здесь всюду мы полагаем $\rho(x) \equiv (1+x^2)^{1/2}$. В следующем доказательстве иллюстрируется применение L^2-пространств с весом и теоремы IX.39.

Доказательство части (a) теоремы XIII.33. Предположим, что $\varphi \in D(H)$ и $H\varphi = \lambda\varphi$ с $\lambda > 0$. Сначала покажем, что $\|\varphi\|_\delta \leqslant c\|\varphi\|$

для некоторого $\delta > 0$, где c зависит только от λ и остается ограниченным, когда λ изменяется в компактных подмножествах из $(0, \infty)$. Поскольку W H_0-компактен, он H-ограничен, так что $\|W\varphi\| \leqslant a\|H\varphi\| + b\|\varphi\| = (a\lambda + b)\|\varphi\|$. Следовательно, функция $\psi \equiv V\varphi = \rho^{-1-\varepsilon}W\varphi$ принадлежит $L^2_{1+\varepsilon}$. В частности, по теореме IX.40, $\hat{\psi}$ обладает сужениями на каждую сферу S_E и эти сужения непрерывны по Гёльдеру по E. Поскольку $(H_0 - \lambda)\varphi = -\psi$, имеем $\hat{\varphi} = -(k^2 - \lambda)^{-1}\hat{\psi}$. Но если бы сужение $\hat{\psi} \upharpoonright S_{\sqrt{\lambda}}$ было отлично от тождественного нуля, $\hat{\varphi}$ не могло бы лежать в L^2, поэтому заключаем, что $\hat{\psi} \upharpoonright S_{\sqrt{\lambda}} = 0$. В результате применима теорема IX.41, так что

$$\|\varphi\|_{\varepsilon/2} \leqslant c_\lambda \|\psi\|_{1+\varepsilon} = c_\lambda \|W\varphi\| \leqslant d_\lambda \|\varphi\|.$$

Пусть $\eta \equiv \rho^{\varepsilon/2}(-\Delta + 1)\varphi$. Тогда из $H\varphi = \lambda\varphi$ вытекает, что

$$\|\eta\| \leqslant \|\rho^{\varepsilon/2}(\lambda + 1)\varphi\| + \|\rho^{\varepsilon/2}V\varphi\| \leqslant (\lambda + 1)\|\varphi\|_{\varepsilon/2} + \|W\varphi\| \leqslant c'_\lambda \|\varphi\|.$$

Поскольку $\varphi = (-\Delta + 1)^{-1}\rho^{-\varepsilon}\eta$, мы заключаем, что для любого компактного подмножества $K \subset (0, \infty)$ любое решение уравнения $H\varphi = \lambda\varphi$ с $\lambda \in K$ и $\|\varphi\| = 1$ имеет вид $\varphi = A\eta$, где (i) $A = (-\Delta + 1)^{-1}\rho^{-\varepsilon}$ и (ii) $\|\eta\| \leqslant c$, где c—константа, зависящая только от K. Согласно задаче 41, A—компактный оператор, так что множество $M = \{\varphi = A\eta \mid \|\eta\| \leqslant c\}$ компактно. Если бы какое-нибудь собственное значение $\lambda \in K$ имело бесконечную кратность или если бы в K лежало бесконечно много собственных значений, то M содержало бы бесконечный ортонормированный набор. Поскольку M компактно, K содержит лишь конечное число собственных значений, причем каждое с конечной кратностью. ▮

В § 13 мы покажем, что $\mathscr{E}_+ = \varnothing$ при некоторых дополнительных предположениях о регулярности V.

Лемма 1. Пусть F и G—два произвольных вещественнозначных оператора умножения, которые H_0-ограничены с нулевой относительной гранью. Тогда для любого $\mu \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ операторы $(H_0 - \mu)^{-1}$, $(H_0 + G - \mu)^{-1}$, $F(H_0 - \mu)^{-1}$ и $F(H_0 + G - \mu)^{-1}$ ограничены на каждом L^2_δ. Более того, если F также и H_0-компактен, то $F(H_0 - \mu)^{-1}$ и $F(H_0 + G - \mu)^{-1}$ компактны на каждом L^2_δ.

Доказательство. Мы докажем лемму для $(H_0 - \mu)^{-1}$ в случае $|\delta| \leqslant 1$. Другие случаи аналогичны и оставлены в качестве задач (задача 66). Введем символ ∂_j для оператора $\partial/\partial x_j$ и проведем формальное вычисление:

$$[(H_0-\mu)^{-1}, \rho^\delta] = -(H_0-\mu)^{-1}[H_0, \rho^\delta](H_0-\mu)^{-1} =$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \{(H_0-\mu)^{-1}\partial_i\}(\partial_i\rho^\delta)(H_0-\mu)^{-1} +$$
$$+(H_0-\mu)^{-1}(\partial_i\rho^\delta)\{\partial_i(H_0-\mu)^{-1}\}.$$

В применении к векторам из $\mathscr{S}$ все вычисления законны. Более того, если $\delta \leqslant 1$, производная $\partial_i(\rho^\delta)$ ограничена. Поскольку $(H_0-\mu)^{-1}$ и $\partial_i(H_0-\mu)^{-1}$ ограничены на L^2, мы заключаем, что

$$\|[(H_0-\mu)^{-1}, \rho^\delta]\psi\| \leqslant \text{const}\,\|\psi\|,$$

если $\psi \in \mathscr{S}$, а потому и для произвольного $\psi \in L^2$. Предположим, что $1 \geqslant \delta > 0$. Тогда

$$\|(H_0-\mu)^{-1}\psi\|_\delta = \|\rho^\delta(H_0-\mu)^{-1}\psi\| \leqslant$$
$$\leqslant \|(H_0-\mu)^{-1}\|\|\psi\|_\delta + \|[(H_0-\mu)^{-1}, \rho^\delta]\psi\| \leqslant d\|\psi\|_\delta,$$

так что $(H_0-\mu)^{-1}$ есть ограниченный оператор из L^2_δ в L^2_δ. В силу двойственности, $(H_0-\bar{\mu})^{-1}$ — ограниченный оператор из $L^2_{-\delta}$ в $L^2_{-\delta}$. ∎

Лемма 2. Пусть $H = H_0 + V$, как в теореме XIII.33. Предположим, что F — потенциал Агмона и что для некоторого компактного интервала $\Omega \subset \mathbb{R}$ и каждого $\delta > 1/2$

$$\sup_{x\in\Omega,\ 0<y<1}\ \sup_{\psi,\ \varphi\in L^2_\delta:\ \|\varphi\|_\delta<1,\ \|\psi\|_\delta<1} |(\psi, (H-\lambda-iy)^{-1}\varphi)| < \infty. \tag{57}$$

Тогда оператор $|F|^{1/2}$ H-гладкий на Ω.

Доказательство. По теореме XIII.30 достаточно доказать, что

$$\sup_{\substack{\lambda\in\Omega\\ 0<y<1}} \||F|^{1/2}(H-\lambda-iy)^{-1}|F|^{1/2}\| < \infty.$$

Из (57) следует, что $(H-\lambda-iy)^{-1}$ — равномерно ограниченный оператор из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$ для $\lambda+iy \in \Omega\times(0, 1)$. Напишем $F = \rho^{-1-\varepsilon}G$, где G H_0-компактен, и пусть $\delta = 1/2+\varepsilon/2$. Тогда, по лемме 1, $(H-i)^{-1}|G|^{1/2}$ — ограниченный оператор из L^2_δ в L^2_δ, так что $|G|^{1/2}(H-i)^{-1}(H-\lambda-iy)^{-1}(H-i)^{-1}|G|^{1/2}$ — равномерно ограниченный оператор из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$ для $\lambda+iy \in \Omega\times(0, 1)$. Таким образом,

$$|F|^{1/2}(H-i)^{-1}(H-\lambda-iy)^{-1}(H-i)^{-1}|F|^{1/2}$$

есть равномерно ограниченный оператор из L^2 в L^2 для $\lambda+iy \in \Omega\times(0, 1)$. Записывая

$$(H-z)^{-1} = (H-i)^{-1} + (z-i)(H-i)^{-2} +$$
$$+(z-i)^2(H-i)^{-1}(H-z)^{-1}(H-i)^{-1}$$

и пользуясь тем фактом, что $\| |F|^{1/2}(H-i)^{-1}|F|^{1/2}\| < \infty$, мы видим, что

$$\sup_{\lambda+iy\in\Omega\times(0,\,1)} \| \, |F|^{1/2}(H-\lambda-iy)^{-1}|F|^{1/2}\| < \infty. \ \blacksquare$$

Сведение доказательства теоремы XIII.33 к доказательству части (b). Мы хотим показать, что, коль скоро удалось доказать (b), доказательство (c) и (d) тривиально. Предположим, что (b) выполнено, $\varphi\in L^2_\delta$ для $\delta>1/2$ и K — компактный подынтервал в $(0, \infty)\setminus\mathscr{E}_+$. Тогда $E_K\varphi\in\mathscr{H}_{ac}$ по теореме XIII.20. Таким образом, $K\cap\sigma_{\text{sing}}=\varnothing$. Согласно второму следствию теоремы XIII.14, $\sigma_{\text{ess}}=[0, \infty)$, откуда мы заключаем, что $\sigma_{\text{sing}}\cap$ $\cap(-\infty, 0)=\varnothing$. Следовательно, $\sigma_{\text{sing}}\subset(\mathscr{E}_+\cup\{0\})$. Но $\mathscr{E}_+$ счетно по (a), и потому $\sigma_{\text{sing}}=\varnothing$. Применяя лемму 2 к случаю $V=0$, мы видим, что оператор $|V|^{1/2}$ из теоремы XIII.33 H_0-гладкий на Ω для любого интервала $[a, b]$ с $a>0$. Кроме того, оператор $|V|^{1/2}$ H-гладкий на каждом таком Ω при условии $\Omega\cap\mathscr{E}_+=\varnothing$. Теперь (d) вытекает из следствия теоремы XIII.31. $\blacksquare$

Оставшаяся часть этого раздела посвящена доказательству пункта (b). Сначала рассматривается случай $V=0$, который сводится к оценке, весьма похожей на оценку из теоремы IX.41. Само доказательство также вполне аналогично.

Лемма 3. Пусть $\varepsilon>0$. Тогда существует константа c, такая, что для всех $\lambda\in\mathbb{C}$ и всех $\varphi\in\mathscr{S}(\mathbb{R})$

$$\|\varphi\|_{-1/2-\varepsilon}\leqslant c\left\|\left(\frac{d}{dx}-\lambda\right)\varphi\right\|_{1/2+\varepsilon}. \tag{58}$$

Доказательство. Предположим, что $\operatorname{Re}\lambda\leqslant 0$. Пусть $\psi=$ $=(d/dx-\lambda)\varphi$. Тогда

$$\varphi(x)=\int_{-\infty}^{x} e^{\lambda(x-y)}\psi(y)\,dy.$$

Таким, образом,

$$\|\varphi\|_{L^\infty}\leqslant\|\psi\|_{L^1}=((1+x^2)^{-1/4-\varepsilon/2},\ (1+x^2)^{1/4+\varepsilon/2}\psi)\leqslant c_1\|\psi\|_{1/2+\varepsilon}.$$

Поскольку

$$\|\varphi\|_{-1/2-\varepsilon}\leqslant\|\varphi\|_{L^\infty}\|(1+x^2)^{-1/4-\varepsilon/2}\|_{L^2},$$

отсюда вытекает оценка (58) в случае $\operatorname{Re}\lambda\leqslant 0$. Аналогичное рассуждение проходит и для $\operatorname{Re}\lambda\geqslant 0$. $\blacksquare$

Лемма 4. Пусть n фиксировано. Тогда при всех $\varepsilon>0$ существует такая константа d, что для всех $\lambda\in\mathbb{C}$, каждого $j=1, \ldots, n$ и всех $\varphi\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$

$$\|\partial_j\varphi\|_{-1/2-\varepsilon}\leqslant d\|(-\Delta-\lambda)\varphi\|_{1/2+\varepsilon}. \tag{59}$$

Доказательство. Рассмотрим сначала случай $n=1$. Пусть $\lambda=-\mu^2$. Тогда по лемме 3

$$\left\|\frac{d}{dx}\varphi\right\|_{-1/2-\varepsilon}\leqslant\frac{1}{2}\left\|\left(\frac{d}{dx}-\mu\right)\varphi\right\|_{-1/2-\varepsilon}+\frac{1}{2}\left\|\left(\frac{d}{dx}+\mu\right)\varphi\right\|_{-1/2-\varepsilon}\leqslant$$
$$\leqslant c\left\|\left(-\frac{d^2}{dx^2}-\lambda\right)\varphi\right\|_{1/2+\varepsilon}.$$

Пусть теперь $\varphi\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$, и пусть $\psi(x_1, k_2, \ldots, k_n)$ — частичный фурье-образ φ по переменным $x_2, \ldots, x_n$:

$$\psi(x_1, k_2, \ldots, k_n)=(2\pi)^{-(n-1)/2}\int e^{-i\sum\limits_2^n k_jx_j}\varphi(x_1, \ldots, x_n)\,dx_2\ldots dx_n.$$

Применяя уже доказанный одномерный результат, при любых фиксированных $k_2, \ldots, k_n$ имеем

$$\int(1+x_1^2)^{-1/2-\varepsilon}|\partial_1\psi(x_1, k_2, \ldots, k_n)|^2\,dx_1\leqslant$$
$$\leqslant c\int(1+x_1^2)^{1/2+\varepsilon}|(-\partial_1^2+k_2^2+\ldots+k_n^2-\lambda)\psi|^2\,dx_1.$$

Интегрируя по $k_2, \ldots, k_n$ и применяя теорему Планшереля, мы видим, что

$$\int(1+x_1^2)^{-1/2-\varepsilon}|\partial_1\varphi(x)|^2\,d^nx\leqslant c\int(1+x_1^2)^{1/2+\varepsilon}|(-\Delta-\lambda)\varphi|^2\,d^nx.$$

Поскольку $(1+x^2)^{-1/2-\varepsilon}\leqslant(1+x_1^2)^{-1/2-\varepsilon}$ и $(1+x_1^2)^{1/2+\varepsilon}\leqslant\leqslant(1+x^2)^{1/2+\varepsilon}$, отсюда следует (59). ∎

Лемма 5. Пусть n фиксировано. Для любого компактного множества $K\subset\mathbb{C}\diagdown\{0\}$ существует такая константа c, что для всех $\lambda\in K$ и $\varphi\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$

$$\|\varphi\|_{-1/2-\varepsilon}\leqslant c\,\|(-\Delta-\lambda)\varphi\|_{1/2+\varepsilon}. \tag{60}$$

Доказательство. Можно найти константу $c_1>0$, удовлетворяющую условию

$$\inf_{x\in\mathbb{R},\,\lambda\in K}[|x^2-\lambda|^2+|x|^2]\geqslant c_1^{-2}.$$

Поэтому для заданного $\psi\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$

$$|\hat{\psi}(k_1, \ldots, k_n)|^2\leqslant c_1^2\left[|(\sum k_l^2-\lambda)\hat{\psi}(k_1, \ldots, k_n)|^2+\sum_{l=1}^n|k_l\hat{\psi}(k_1,\ldots,k_n)|^2\right].$$

Интегрируя это неравенство и применяя теорему Планшереля, получим

$$\|\psi\|^2 \leqslant c_1^2 \left[\|(-\Delta-\lambda)\psi\|^2 + \sum_{j=1}^{n} \|\partial_j\psi\|^2 \right] \qquad (61a)$$

для всех $\lambda \in K$. Пусть α — положительное вещественное число, которое будет подобрано ниже. Положим $\delta = 1/2+\varepsilon$ и $\rho_\alpha = (1+\alpha x^2)^{1/2}$. Наконец, пусть $\varphi = (\rho_\alpha)^\delta \psi$. Тогда, в силу (61a),

$$\|\rho_\alpha^{-\delta}\varphi\| \leqslant c_1 \|(-\Delta-\lambda)\rho_\alpha^{-\delta}\varphi\| + c_1 \sum_{j=1}^{n} \|\partial_j \rho_\alpha^{-\delta}\varphi\|. \qquad (61b)$$

Далее, $\partial_j \rho_\alpha^{-\delta}\varphi = \rho_\alpha^{-\delta}\partial_j\psi - \delta\alpha x_j \rho_\alpha^{-\delta-1}\varphi$, так что

$$\|\partial_j \rho_\alpha^{-\delta}\varphi\| \leqslant \|\rho_\alpha^{-\delta}\partial_j\varphi\| + \alpha^{1/2}\delta \|\rho_\alpha^{-\delta}\varphi\|,$$

поскольку $|\alpha^{1/2}x_j\rho^{-1}| \leqslant 1$ для всех x. Аналогично (задача 87)

$$\|(-\Delta-\lambda)\rho_\alpha^{-\delta}\varphi\| \leqslant \|\rho_\alpha^{-\delta}(-\Delta-\lambda)\varphi\| + 2\delta\alpha^{1/2} \sum_{j=1}^{n} \|\rho_\alpha^{-\delta}\partial_j\varphi\| + d_{n,\varepsilon}\alpha \|\rho_\alpha^{-\delta}\varphi\|, \qquad (62)$$

где единственное, что зависит от n и ε, — это $d_{n,\varepsilon}$. Возьмем α настолько малым, что $c_1(n\delta\alpha^{1/2}+d_{n,\varepsilon}\alpha) < 1/2$ и $\alpha < 1$. Тогда, в силу (61), для всех $\varphi \in \mathscr{S}$ и $\lambda \in K$

$$\frac{1}{2}\|\rho_\alpha^{-\delta}\varphi\| \leqslant c_2 \left| \|\rho_\alpha^{-\delta}(-\Delta-\lambda)\varphi\| + \sum_{j=1}^{n} \|\rho_\alpha^{-\delta}\partial_j\varphi\| \right|.$$

Поскольку $\rho^{-\delta} \leqslant \rho_\alpha^{-\delta} \leqslant \alpha^{-\delta/2}\rho^{-\delta}$, имеем

$$\|\varphi\|_{-\delta} \leqslant c_3 \left[\|(-\Delta-\lambda)\varphi\|_{-\delta} + \sum_j \|\partial_j\varphi\|_{-\delta} \right],$$

где c_3 не зависит от $\lambda \in K$ и $\varphi \in \mathscr{S}$. Поскольку $\|\cdot\|_{-\delta} \leqslant \|\cdot\|_\delta$ и $\|\partial_j\varphi\|_{-\delta} \leqslant c\|(-\Delta-\lambda)\varphi\|_\delta$ в силу леммы 4, то отсюда следует (60). ∎

Если теперь $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$ и $\delta > 1/2$, то, по лемме 1, $(H_0-\lambda)^{-1}$ есть ограниченный оператор из L_δ^2 в L_δ^2. Лемма 5 гарантирует, что для $\lambda \in K = [a, b] \times (0, 1]$, где $a > 0$, имеет место основная оценка:

$$\|(H_0-\lambda)^{-1}\varphi\|_{-\delta} \leqslant c\|\varphi\|_\delta. \qquad (63)$$

Коль скоро справедливо (63), естественно рассматривать граничные значения $\lim\limits_{y \downarrow 0} (H_0-x-iy)^{-1}$ как отображения из L_δ^2 в $L_{-\delta}^2$. Для данного доказательства не обязательны именно такие граничные значения, но они помогают выделить лежащие в его основе идеи, поэтому мы введем их. В качестве предварительного результата нам необходима

Лемма 6. Пусть $\delta > 3/2$, и пусть $0 < a < b$. Тогда существует такая константа c, что для всех $\varphi \in L^2_\delta$ и $\lambda = x + iy$, где $x \in [a, b]$ и $y \in (0, 1]$, справедливо неравенство

$$\|(H_0 - \lambda)^{-2}\varphi\|_{-\delta} \leqslant c \|\varphi\|_\delta.$$

Доказательство. Пусть A — оператор $\sum_{j=1}^{n} x_j \partial_j$. Тогда $[A, (H_0 - \lambda)] = -2H_0$, так что

$$[A, (H_0 - \lambda)^{-1}] = -(H_0 - \lambda)^{-1}[A, (H_0 - \lambda)](H_0 - \lambda)^{-1} = 2H_0(H_0 - \lambda)^{-2} = 2(H_0 - \lambda)^{-1} + 2\lambda(H_0 - \lambda)^{-2},$$

где все выкладки становятся законными в применении к векторам из $\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$. Поскольку $(H_0 - \lambda)^{-1}$ равномерно ограничен как отображение из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$, нужно только доказать, что $[A, (H_0 - \lambda)^{-1}]$ — ограниченный оператор из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$ равномерно по λ в области $a \leqslant \operatorname{Re}\lambda \leqslant b$ и $0 < \operatorname{Im}\lambda \leqslant 1$. А потому достаточно доказать, что $\rho^{-\delta}(x_j\partial_j)(H_0 - \lambda)^{-1}\rho^{-\delta}$ ограничен на L^2 равномерно по λ. Напишем

$$(H_0 - \lambda)^{-1} = (H_0 + 1)^{-1} + (\lambda + 1)(H_0 + 1)^{-1}(H_0 - \lambda)^{-1}.$$

Конечно, $(\rho^{-\delta}x_j)[\partial_j(H_0 + 1)^{-1}]\rho^{-\delta}$ ограничен на L^2. Более того, оператор

$$\rho^{-1}x_j[\rho^{-\delta+1}(\partial_j(H_0 + 1)^{-1})\rho^{\delta-1}](\rho^{-\delta+1}(H_0 - \lambda)^{-1}\rho^{-\delta+1})\rho^{-1}$$

ограничен, поскольку первый и последний множители, как легко видеть, ограничены, третий ограничен по лемме 5, а ограниченность второго доказывается подобно лемме 1 (задача 66с). ∎

Лемма 7. Пусть $\delta > 1/2$, и пусть $x > 0$. Тогда предел $(H_0 - x - i0)^{-1} = \lim_{y \downarrow 0}(H_0 - x - iy)^{-1}$ существует в смысле нормы как отображение из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$. Более того,

(a) оператор $V(H_0 - x - i0)^{-1}$ компактен как отображение из L^2_δ в L^2_δ, если V — агмонов потенциал, такой, что $\rho^{2\delta}V = W$ относительно H_0-компактен;

(b) $\operatorname{Im}(\varphi, (H_0 - x - i0)^{-1}\varphi) = (\pi/2)\, x^{1/2n-1} \int_{S^{n-1}} |\hat{\varphi}(x^{1/2}\Omega)|^2 d\Omega$, где $\hat{\varphi} \restriction S_{x^{1/2}}$ определено теоремой IX.39, а $d\Omega$ — обычная мера на сфере.

Доказательство. Пусть $\delta' = \delta + 1$. Тогда, понимая соответствующие операторы как отображения из $L^2_{\delta'}$ в $L^2_{-\delta'}$, имеем

$$\|(H_0 - \lambda_1)^{-1} - (H_0 - \lambda_2)^{-1}\| \leqslant |\lambda_2 - \lambda_1| \sup_{0 \leqslant t \leqslant 1} \|[H_0 - t\lambda_1 - (1 - t)\lambda_2]^{-2}\|.$$

Согласно лемме 6, $(H_0-x-iy)^{-1}$ — направленность Коши по норме при $y\downarrow 0$. Пусть $\delta''=1/2\,(\delta+1/2)$. Тогда по лемме 5 оператор $(H_0-x-iy)^{-1}$ ограничен по норме при $y\downarrow 0$ как отображение из $L^2_{\delta''}$ в $L^2_{-\delta''}$. Поскольку $\delta''<\delta<\delta'$, можно провести интерполяцию между результатами для δ' и δ'' (см. пример 3 из дополнения к § IX.4) и заключить, что как отображения из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$ операторы $(H_0-x-iy)^{-1}$ образуют направленность Коши по норме при $y\downarrow 0$. Чтобы доказать (а), напишем

$$W(H_0-x-i0)^{-1}=W(H_0+1)^{-1}+(x+1)\,W(H_0+1)^{-1}(H_0-x-i0)^{-1};$$

тогда по лемме 1 оператор $W(H_0-x-i0)^{-1}$ компактен как отображение из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$. Поскольку $\rho^{-2\delta}$ — изометрия из $L^2_{-\delta}$ в L^2_δ, отсюда следует (а). Наконец, (b) выполняется в силу формулы (V.4) (см. также задачу 22 к гл. V) для $\varphi\in\mathscr{S}$. По теореме IX.39 это равенство продолжается тогда на все $\varphi\in L^2_\delta$. ∎

Лемма 8. Пусть $\delta>1/2$, и пусть $\varphi\in L^2_\delta$ удовлетворяет уравнению $\varphi=-V(H_0-x-i0)^{-1}\varphi$, где $x>0$, а V — агмонов потенциал, такой, что оператор $\rho^{2\delta}V=W$ относительно H_0-компактен, и где $V(H_0-x-i0)^{-1}$ понимается как композиция отображений $W(H_0-x-i0)^{-1}$ из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$ и $\rho^{-2\delta}$ из $L^2_{-\delta}$ в L^2_δ. Тогда

(а) $\psi\equiv(H_0-x-i0)^{-1}\varphi$ принадлежит L^2;

(b) если $\varphi\neq 0$, то x — собственное значение $H=H_0+V$ как оператора в L^2.

Доказательство очень похоже на доказательство пункта (а) теоремы XIII.33. Поскольку

$$(H_0-x-i0)^{-1}=(H_0+1)^{-1}+(x+1)(H_0+1)^{-1}(H_0-x-i0)^{-1},$$

то $\psi\in(H_0+1)^{-1}[L^2_{-\delta}]$, так что $W\psi\in L^2_{-\delta}$ по лемме 1. Следовательно, интеграл $\int V(\xi)\,|\psi(\xi)|^2\,d\xi=(\rho^{-\delta}\psi,\rho^{-\delta}W\psi)$ абсолютно сходится и, очевидно, веществен. Но $V\psi=-\varphi$, так что $(\varphi,(H_0-x-i0)^{-1}\varphi)$ вещественно. В силу пункта (b) леммы 7, $\hat\varphi\restriction S_{x^{1/2}}\equiv 0$. Таким образом, применима теорема IX.41, и можно провести следующее построение типа «бутстрапа». Пусть $\delta=1/2+\varepsilon$. Поскольку $\varphi\in L^2_\delta$, то $\psi\in L^2_{\delta-1-\varepsilon}$ по теореме IX.41. Применяя лемму 1 и равенство

$$W\psi=W(H_0+1)^{-1}\varphi+(x+1)\,W(H_0+1)^{-1}\psi,$$

мы видим, что и $W\psi\in L^2_{\delta-1-\varepsilon}$. Итак, $\varphi=-V\psi=-\rho^{2\delta}W\psi$ принадлежит $L^2_{\delta-1-\varepsilon+2\delta}=L^2_{\delta+\varepsilon}$. С помощью этого рассуждения оценка улучшается: вместо $\varphi\in L^2_\delta$ получаем $\varphi\in L^2_{\delta+\varepsilon}$. Ничто не мешает нам проделать то же самое еще раз! Итак, $\varphi\in L^2_{\delta+n\varepsilon}$ для всех n, а потому $\psi\in L^2_{\delta-1+(n-1)\varepsilon}$ для всех n. В частности, $\psi\in L^2$. Для

$\eta \in \mathscr{S}$ имеем

$$(H_0\eta, \psi) = \lim_{y \downarrow 0} (\eta, H_0 (H_0 - x - iy)^{-1}\varphi) = \lim_{y \downarrow 0} (\eta, (x+iy)\psi + \varphi) = \\ = (\eta, x\psi + \varphi).$$

Следовательно, $\psi \in D(H_0)$ и $H_0\psi = x\psi + \varphi = x\psi - V\psi$, так что x — собственное значение H как оператора в L^2. ∎

Завершение доказательства теоремы XIII.33. Выберем $\delta > 1/2$, так что $\rho^{2\delta}V = W$ относительно H_0-компактен. Для заданного компактного подынтервала $K \subset (0, \infty)\diagdown\mathscr{E}_+$ рассмотрим операторнозначную функцию $A(\mu) = V(H_0 - \mu)^{-1}$ на $K \times [0, 1]$, где $(H_0 - \mu)^{-1}$ понимается как $(H_0 - \mu - i0)^{-1}$, если $\operatorname{Im}\mu = 0$. Тогда $A(\mu)$ — функция со значениями во множестве компактных операторов на L^2_δ, непрерывная в области $K \times [0, 1]$ и аналитическая внутри нее. Более того, уравнение $A(\mu)\varphi = -\varphi$ не имеет ненулевых решений при $\mu \in K \times [0, 1]$. Когда $\operatorname{Im}\mu = 0$, это следует из предположения, что $K \cap \mathscr{E}_+ = \varnothing$, и леммы 8. Когда $\operatorname{Im}\mu \neq 0$, это вытекает из формулы $(1 + V(H_0 - \mu)^{-1})(H_0 - \mu) = H - \mu$ и обратимости (по лемме 1) $H_0 - \mu$ и $H - \mu$ как отображений из L^2_δ в $L^{2\delta}$. Простое обобщение аналитической теоремы Фредгольма (теорема VI.14) показывает, что $(1 + A(\mu))^{-1}$ — непрерывная функция на $K \times [0, 1]$; в частности, она равномерно ограничена. Но при $\operatorname{Im}\mu \neq 0$ имеем $(H - \mu)^{-1} = (H_0 - \mu)^{-1}(1 + A(\mu))^{-1}$. Поскольку оператор $(H_0 - \mu)^{-1}$ по лемме 5 равномерно ограничен как отображение из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$, а $(1 + A(\mu))^{-1}$ равномерно ограничен как отображение из L^2_δ в L^2_δ, то $(H - \mu)^{-1}$ — равномерно ограниченный оператор из L^2_δ в $L^2_{-\delta}$ при $\mu \in K \times [0, 1]$. А это просто другая формулировка пункта (b) доказываемой теоремы. ∎

XIII.9. Спектр тензорных произведений операторов

В § VIII.10 мы доказали, что если A и B — самосопряженные операторы в гильбертовых пространствах $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$ с областями определения D_1 и D_2, то оператор $A \otimes I + I \otimes B$ в существенном самосопряжен на $D_1 \otimes D_2$ и спектр $\sigma(A \otimes I + I \otimes B) = \sigma(A) + \sigma(B)$. Цель данного раздела — распространить этот результат на случай, когда A и B m-секториальны (см. § VIII.6). При этом мы будем пользоваться связью между m-секториальными операторами и ограниченными голоморфными полугруппами (см. § X.8). В самосопряженном случае доказательство было «легким» в том смысле, что утверждение было довольно прямым следствием спектральной теоремы. В m-секториальном случае вместо спектральной теоремы применяется теория коммутативных банаховых алгебр и формулы преобразования Лапласа, связывающие ограниченные голоморфные полугруппы с резольвентами их генераторов. Литературные ссылки в связи с коммутативными банаховыми алгебрами читатель найдет в Замечаниях. Этот раздел состоит из двух частей. В первой части мы доказываем, что $\sigma(A\otimes B)=\sigma(A)\sigma(B)$, если A и B — ограниченные операторы на $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$. Во второй части этот результат применяется к тензорному произведению $e^{-tA}\otimes e^{-tB}$, где A и B — генераторы ограниченных голоморфных полугрупп, чтобы получить требуемое утверждение для m-секториальных операторов.

Пусть A — ограниченный оператор на гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$. Обозначим через $\mathscr{R}(A)$ банахову алгебру операторов, порождаемую единицей и всеми резольвентами A, т. е. $\mathscr{R}(A)$ есть не что иное, как замыкание по операторной норме семейства полиномов от конечного числа переменных по резольвентам A в различных точках. Это коммутативная банахова алгебра, которая содержит A, поскольку $\lambda^2(\lambda-A)^{-1}-\lambda I\to A$ по норме при $\lambda\to\infty$. Поскольку все резольвенты A лежат в $\mathscr{R}(A)$, имеем $\sigma(A)=\sigma_{\mathscr{R}(A)}(A)$, где $\sigma_{\mathscr{R}(A)}(A)$ обозначает гельфандов спектр A по отношению к $\mathscr{R}(A)$.

Пусть $\mathscr{R}(A)$ и $\mathscr{R}(B)$ — резольвентные алгебры операторов A и B на $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$ соответственно. Тогда, если $C\in\mathscr{R}(A)$ и $D\in\mathscr{R}(B)$, то $C\otimes D$ — корректно определенный ограниченный оператор на $\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2$ и $\|C\otimes D\|=\|C\|\|D\|$ (см. второе предложение из § VIII.10). Обозначим через $\mathscr{A}$ замыкание по норме в $\mathscr{L}(\mathscr{H}_1\otimes\mathscr{H}_2)$ конечных линейных комбинаций таких операторов $C\otimes D$. Тогда $\mathscr{A}$ — коммутативная банахова алгебра, а отображения $A\mapsto A\otimes I$, $B\mapsto I\otimes B$ — изометрические изоморфизмы, вкладывающие $\mathscr{R}(A)$ и $\mathscr{R}(B)$ в $\mathscr{A}$. Если $\lambda\in\sigma(A\otimes B)$, то λ тем более лежит в спектре $A\otimes B$ по отношению к алгебре $\mathscr{A}$, так что, согласно теории Гельфанда, на $\mathscr{A}$ имеется такой мультипликативный линейный функционал l, что $\lambda=l(A\otimes B)=l(A\otimes I)\,l(I\otimes B)$. Поскольку сужения l на $\mathscr{R}(A)\otimes I$ и $I\otimes\mathscr{R}(B)$ мультипликативны, то $l(A\otimes I)\in\sigma(A)$ и $l(I\otimes B)\in\sigma(B)$. Это показывает, что

$$\sigma(A\otimes B)\subset\sigma(A)\sigma(B)\equiv\{\lambda_1\lambda_2\mid\lambda_1\in\sigma(A),\ \lambda_2\in\sigma(B)\}. \tag{64}$$

Чтобы доказать обратное включение, придется потрудиться немножко больше. Введем сначала новое подмножество спектра.

Определение. Пусть A — замкнутый линейный оператор в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$. Пусть S — множество таких $\lambda\in\mathbb{C}$, что для некоторой константы $c_\lambda>0$ выполняется $\|(A-\lambda)\varphi\|\geqslant c_\lambda\|\varphi\|$ для всех $\varphi\in D(A)$. Определим аппроксимативно точечный спектр как $\sigma_{ap}(A)\equiv\mathbb{C}\setminus S$. Определим, кроме того, $\sigma_r(A)\equiv\sigma(A)\setminus\sigma_{ap}(A)$.

Термин «аппроксимативно точечный спектр» выбран потому, что если $\lambda\in\sigma_{ap}(A)$, то существует последовательность $\varphi_n\in D(A)$, $\|\varphi_n\|=1$, такая, что $(A-\lambda)\varphi_n\to 0$. Читатель может проверить сам, что σ_r — подмножество остаточного спектра, определенного в § VI.3.

Следующая лемма содержит два важных свойства $\sigma_r(A)$.

Лемма 1. (a) Если $\lambda \in \sigma_r(A)$, то $\bar\lambda \in \sigma_{ap}(A^*)$.
(b) Множество $\sigma_r(A)$ открыто.

Доказательство. Часть (a) доказать легко. Действительно, пусть $\lambda \in \sigma_r(A)$. Поскольку оператор $A-\lambda$ необратим, а $\|(A-\lambda)\varphi\| \geqslant c_\lambda \|\varphi\|$ для некоторого $c_\lambda > 0$, то $\operatorname{Ran}(\lambda - A)$ не плотно. Поэтому $\bar\lambda$ лежит в точечном спектре оператора A^*.

Для доказательства (b) предположим, что $\lambda \in \sigma_r(A)$. Тогда, поскольку $\|(A-\lambda)\varphi\| \geqslant c_\lambda\|\varphi\|$, множество $\operatorname{Ran}(A-\lambda)$ — замкнутое подпространство в $\mathscr{H}$; но $\lambda \in \sigma_r(A)$, поэтому $\operatorname{Ran}(A-\lambda) \neq \mathscr{H}$. Далее, если $|z| \leqslant c_\lambda/2$, то $\|(A-(\lambda+z))\varphi\| \geqslant {}^1/_2 c_\lambda \|\varphi\|$, так что для доказательства того, что $\lambda + z \in \sigma_r(A)$ при достаточно малых z, нужно только показать, что $\operatorname{Ran}(A-(\lambda+z)) \neq \mathscr{H}$. Предположим, что $\operatorname{Ran}(A-(\lambda+z)) = \mathscr{H}$, и пусть $\psi \in [\operatorname{Ran}(A-\lambda)]^\perp$ и $\|\psi\| = 1$. Тогда существует вектор $\varphi_z \in \mathscr{H}$, такой, что $(A-(\lambda+z))\varphi_z = \psi$ и $\|(A-(\lambda+z))\varphi_z\| \geqslant {}^1/_2 c_\lambda \|\varphi_z\|$, если $|z| \leqslant c_\lambda/2$. Таким образом, $\|\varphi_z\| \leqslant 2/c_\lambda$. К тому же

$$1 = \|\psi\|^2 = ((A-(\lambda+z))\varphi_z, \psi) = -z(\varphi_z, \psi) \leqslant |z| \|\varphi_z\| \leqslant |z| \frac{2}{c_\lambda}.$$

Для малых z тем самым получается противоречие, так что $\operatorname{Ran}(A-(\lambda+z)) \neq \mathscr{H}$, если z достаточно мало. ∎

Заметим, что, как отмечено выше при доказательстве теоремы X.1, из доказательства пункта (b) видно, что коразмерность множества $\operatorname{Ran}(A-\lambda)$ постоянна на каждой компоненте связности $\sigma_r(A)$.

Лемма 2. Пусть A и B — ограниченные операторы. Пусть $\langle\lambda_1, \lambda_2\rangle$ — внутренняя точка множества $\sigma(A) \times \sigma(B)$, причем $\lambda_1 \neq 0$. Тогда существует точка $\langle\lambda_1', \lambda_2'\rangle$ на топологической границе $\sigma(A) \times \sigma(B)$, такая, что $\lambda_1\lambda_2 = \lambda_1'\lambda_2'$.

Доказательство. Пусть $s_1 = \sup\{t \in \mathbb{R} \mid t\lambda_1 \in \sigma(A)\}$, $s_2 = \sup\{t \in \mathbb{R} \mid \lambda_2/t \in \sigma(B)\}$ и $s = \min\{s_1, s_2\}$. Поскольку A ограничен, то $s_1 < \infty$, а тогда и $s < \infty$. Поскольку либо $s\lambda_1$ лежит на $\partial\sigma(A)$ — топологической границе $\sigma(A)$, либо λ_2/s лежит на $\partial\sigma(B)$, то $\langle s\lambda_1, \lambda_2/s\rangle$ лежит на топологической границе $\sigma(A) \times \sigma(B)$. ∎

Теорема XIII.34. Пусть A и B — ограниченные операторы на гильбертовых пространствах $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$ соответственно. Тогда $\sigma(A \otimes B) = \sigma(A)\sigma(B)$.

Доказательство. Поскольку уже доказано равенство (64), осталось лишь показать, что $\sigma(A)\sigma(B) \subset \sigma(A \otimes B)$. Пусть $\lambda_1 \in \sigma(A)$ и $\lambda_2 \in \sigma(B)$. Если $\lambda_1 = 0$, то, как легко видеть, $0 \in \sigma(A \otimes B)$, так что предположим, что $\lambda_1 \neq 0 \neq \lambda_2$. По лемме 2 можно считать, что $\langle\lambda_1, \lambda_2\rangle$ лежит на топологической границе множества $\sigma(A)\times\sigma(B)$. Без потери общности допустим, что $\lambda_1\in\partial\sigma(A)$. Поскольку $\sigma(A)$ замкнуто, то $\lambda_1\in\sigma(A)$. С другой стороны, $\sigma_r(A)$ открыто, так что $\lambda_1\in\sigma_{ap}(A)$ и аналогично $\overline{\lambda}_1\in\sigma_{ap}(A^*)$. Теперь у нас два случая, которые надо рассмотреть отдельно. Предположим, что $\lambda_2\in\sigma_{ap}(B)$. Тогда существует последовательность $\varphi_n\in\mathscr{H}_1$ с $\|\varphi_n\|=1$ и $(A-\lambda_1)\varphi_n\to 0$ и последовательность $\psi_n\in\mathscr{H}_2$ с $\|\psi_n\|=1$ и $(B-\lambda_2)\psi_n\to 0$. Положим $\eta_n=\varphi_n\otimes\psi_n$. Тогда

$$(A\otimes B-\lambda_1\lambda_2 I)\eta_n=(A-\lambda_1)\varphi_n\otimes B\psi_n+\lambda_1\varphi_n\otimes(B-\lambda_2)\psi_n\to 0$$
$$\text{при } n\to\infty.$$

Итак, $\lambda_1\lambda_2\in\sigma_{ap}(A\otimes B)$. Напротив, предположим теперь, что $\lambda_2\in\sigma_r(B)$. Тогда $\overline{\lambda}_2\in\sigma_{ap}(B^*)$ и $\overline{\lambda}_1\in\sigma_{ap}(A^*)$. То же построение, что и выше, показывает, что $\overline{\lambda}_1\overline{\lambda}_2\in\sigma_{ap}((A\otimes B)^*)\subset\sigma(A^*\otimes B^*)$. Значит, $\lambda_1\lambda_2\in\sigma(A\otimes B)$ по теореме VI.7. ∎

Мы воспользуемся теоремой XIII.34, чтобы доказать, что $\sigma(A\otimes I+I\otimes B)=\sigma(A)+\sigma(B)$; при этом сначала мы получим отображения спектров, которые свяжут спектр генератора ограниченной голоморфной полугруппы со спектром его резольвенты, а также самой полугруппы. Пусть C порождает ограниченную голоморфную полугруппу на банаховом пространстве X; положим $\mathscr{C}\equiv\{e^{-tC}\mid t\geqslant 0\}''$, где $\{\cdot\}'$ означает коммутант семейства операторов, а $\{\cdot\}''$ — двойной коммутант. В явной записи:

$$\mathscr{A}'=\{B\mid AB=BA \text{ для всех } A\in\mathscr{A}\},\qquad \mathscr{A}''=\{\mathscr{A}'\}'.$$

Лемма 3. Если C — генератор ограниченной голоморфной полугруппы, то

$$\mathscr{C}\equiv\{e^{-tC}\mid t\geqslant 0\}''=\{R_\lambda(C)\mid\lambda\in\rho(C)\}''.$$

Более того, $\mathscr{C}$ — абелева банахова алгебра.

Доказательство. Достаточно доказать, что

$$\{e^{-tC}\mid t\geqslant 0\}'=\{R_\lambda(C)\mid\lambda\in\rho(C)\}'.$$

Это легко следует из (X.98):

$$(\lambda+C)^{-1}\varphi=\int_0^\infty e^{-\lambda t}e^{-tC}\varphi\,dt$$

и (X.102):

$$e^{-zC}=-\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma e^{-\lambda z}(\lambda-C)^{-1}\,d\lambda,$$

где Γ — подходящий путь.

Последнее утверждение леммы представляет собой общий факт из теории операторных алгебр. Поскольку полугруппа

$\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}$ абелева, то $\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\} \subset \{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}'$. Таким образом, $\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}'' \subset \{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}'$. Следовательно, если A и B принадлежат $\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}''$, то A принадлежит $\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}'$, так что A и B коммутируют. ∎

Поскольку алгебра $\mathscr{C}$ — коммутант, она обладает следующим очень важным свойством. Гельфандов спектр по отношению к этой алгебре любого оператора $D \in \mathscr{C}$ совпадает с его спектром как оператора на X. Причина этого в том, что, когда D коммутирует с $\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}'$, все резольвенты D также коммутируют с $\{e^{-tC} \mid t \geqslant 0\}'$, т. е. все они лежат в $\mathscr{C}$. Поэтому для элемента $D \in \mathscr{C}$ мы будем писать просто $\sigma(D)$, имея в виду его спектр по отношению к $\mathscr{C}$.

Следующая лемма есть, по существу, переформулировка леммы 2 из § 4.

Лемма 4. Пусть C — замкнутый оператор с непустым резольвентным множеством на банаховом пространстве X. Предположим, что $\lambda \in \rho(C)$, и рассмотрим h: $z \mapsto (\lambda - z)^{-1}$ как отображение расширенной комплексной плоскости на себя. Тогда

(a) если C ограничен, то h — гомеоморфизм $\sigma(C)$ на $\sigma((\lambda - C)^{-1})$;

(b) если C не ограничен, то h — гомеоморфизм $\sigma(C) \cup \{\infty\}$ на $\sigma((\lambda - C)^{-1})$.

Теперь мы в состоянии доказать теорему об отображении спектра для полугруппы, порождаемой оператором C.

Лемма 5. Пусть C — генератор ограниченной голоморфной полугруппы на банаховом пространстве X. Тогда

(a) $\sigma(e^{-tC}) = e^{-t\sigma(C)} \equiv \{e^{-tz} \mid z \in \sigma(C)\}$, если C ограничен;

(b) $\sigma(e^{-tC}) = e^{-t\sigma(C)} \cup \{0\}$, если C неограничен.

Доказательство. Если l принадлежит множеству $\sigma(\mathscr{C})$ мультикативных линейных функционалов на $\mathscr{C}$, то первая резольвентная формула показывает, что либо $l((\lambda - C)^{-1}) = 0$ для всех $\lambda \in \rho(C)$, либо это не выполняется ни для одного $\lambda \in \rho(C)$. Пусть $\mathscr{M}_\infty = \{l \in \sigma(\mathscr{C}) \mid l((\lambda - C)^{-1}) = 0\}$ и $\mathscr{M}_0 \equiv \sigma(\mathscr{C}) \setminus \mathscr{M}_\infty$. Для $l \in \mathscr{M}_0$ определим

$$\hat{C}(l) \equiv \lambda - [l((\lambda - C)^{-1})]^{-1}.$$

Из первой резольвентной формулы следует, что это определение не зависит от того, какое выбрано $\lambda \in \rho(C)$. Поскольку $l((\lambda - C)^{-1}) = 0$ при $l \in \mathscr{M}_\infty$ и $l((\lambda - C)^{-1}) = (\lambda - \hat{C}(l))^{-1}$ при $l \in \mathscr{M}_0$, отсюда следует, что в случае, когда C неограничен, $\sigma((\lambda - C)^{-1}) = \{(\lambda - \hat{C}(l))^{-1} \mid l \in \mathscr{M}_0\} \cup \{0\}$. Итак, по лемме 4, $\sigma(C) = \operatorname{Ran} \hat{C} \restriction \mathscr{M}_0$. То же самое справедливо, если C ограничен. Допустим теперь, что $l \in \mathscr{M}_0$; тогда по (X.102) и теореме Коши

$$l(e^{-tC}) = \frac{-1}{2\pi i}\int_{\Gamma} e^{-\lambda t} l((\lambda - C)^{-1})\, d\lambda = e^{-\lambda \hat{C}(l)}.$$

Если $l \in \mathscr{M}_\infty$, та же формула показывает, что $l(e^{-tC}) = 0$ для всех $t > 0$. Поскольку $\sigma(e^{-tC}) = \{l(e^{-tC}) \mid l \in \sigma(\mathscr{C})\}$, заключаем, что $\sigma(e^{-tC}) = e^{-t\sigma(C)} \cup \{0\}$, если C неограничен, и $\sigma(e^{-tC}) = e^{-t\sigma(C)}$, если C ограничен. ∎

Следующая теорема и ее доказательство обобщаются на случай банаховых пространств. Мы же формулируем и доказываем ее только для случая гильбертовых пространств, поскольку не рассматривали тензорные произведения банаховых пространств, а также потому, что случай гильбертовых пространств — это все, что потребуется нам в следующем разделе.

Теорема XIII.35. Пусть A и B — генераторы ограниченных голоморфных полугрупп на гильбертовых пространствах $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$. Пусть C — замыкание оператора $A \otimes I + I \otimes B$, определенного на $D(A) \otimes D(B)$. Тогда C порождает ограниченную голоморфную полугруппу и

$$\sigma(C) = \sigma(A) + \sigma(B).$$

Доказательство. Предположим, что e^{-zA} и e^{-zB} — ограниченные голоморфные полугруппы с углами θ_1 и θ_2 соответственно. Тогда $W(z) = e^{-zA} \otimes e^{-zB}$ — ограниченная голоморфная полугруппа с углом $\theta = \min\{\theta_1, \theta_2\}$. Пусть G — генератор $W(z)$. Полугруппа $W(t)$ сильно дифференцируема на $D(A) \otimes D(B)$ и $G \restriction D(A) \otimes D(B) = A \otimes I + I \otimes B$. Поскольку $W(z)$: $D(A) \otimes D(B) \to D(A) \otimes D(B)$, то из теоремы X.49 следует, что $D(A) \otimes D(B)$ — существенная область определения для G. Таким образом, $G = C$.

По теореме XIII.34, $\sigma(e^{-tC}) = \sigma(e^{-tA})\,\sigma(e^{-tB})$. Следовательно, по лемме 5,

$$e^{-t\sigma(C)} = \tilde{\sigma}(e^{-tC}) = \tilde{\sigma}(e^{-tA})\,\tilde{\sigma}(e^{-tB}) = e^{-t(\sigma(A)+\sigma(B))},$$

где $\tilde{\sigma}(\cdot)$ обозначает $\sigma(\cdot)\setminus\{0\}$. Итак, если $\mu \in \sigma(A)$ и $\lambda \in \sigma(B)$, то для всех t существует такое $\gamma_t \in \sigma(C)$, что $e^{-t\gamma_t} = e^{-t(\mu+\lambda)}$, т. е. $\gamma_t = \mu + \lambda + t^{-1} 2\pi i n_t$, где n_t — целое. Поскольку $\gamma_t \in \overline{S}_{\frac{1}{2}\pi - \theta} = \{z \mid |\arg z| \leqslant \frac{1}{2}\pi - \theta\}$, то n_t должно быть нулем при достаточно малом t. Итак, $\gamma = \mu + \lambda \in \sigma(C)$. Обратно, предположим, что $\gamma \in \sigma(C)$. Тогда для каждого t существуют такое $\mu_t \in \sigma(A) \subset \overline{S}_{\frac{1}{2}\pi - \theta}$ и такое $\lambda_t \in \sigma(B) \subset \overline{S}_{\frac{1}{2}\pi - \theta}$, что $\gamma = \mu_t + \lambda_t + t^{-1} 2\pi i n'_t$, где n'_t — целое. Поскольку γ, μ_t, $\lambda_t \in \overline{S}_{\frac{1}{2}\pi - \theta}$, снова видно, что при достаточно малом t мы имеем $\gamma = \mu_t + \lambda_t$. Итак, $\sigma(C) = \sigma(A) + \sigma(B)$. ∎

Следствие 1. Если A и B — ограниченные операторы на гильбертовых пространствах $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$, то

$$\sigma(A\otimes I+I\otimes B)=\sigma(A)+\sigma(B).$$

Доказательство. $A+2\|A\|$ и $B+2\|B\|$ порождают ограниченные голоморфные полугруппы, так что по предыдущей теореме

$$\sigma(A\otimes I+I\otimes B)+2\|A\|+2\|B\|=\sigma((A+2\|A\|)\otimes I+ \\ +I\otimes(B+2\|B\|))= \\ =\sigma(A+2\|A\|)+\sigma(B+2\|B\|)=\sigma(A)+\sigma(B)+2\|A\|+2\|B\|. \quad \blacksquare$$

Следствие 2 (лемма Итиносэ). Пусть $\bar{S}_{\omega,\varphi,\theta}$ обозначает сектор $\{z\,|\,\varphi-\theta\leqslant\arg(z-\omega)\leqslant\varphi+\theta,\ \ \theta<\pi/2\}$. Пусть A и B — строго $\mathfrak{m}$-секториальные операторы на гильбертовых пространствах $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ с секторами $\bar{S}_{\omega_1,\varphi,\theta_1}$ и $\bar{S}_{\omega_2,\varphi,\theta_2}$ (одно и то же φ!). Пусть C — замыкание оператора $A\otimes I+I\otimes B$, определенного на $D(A)\otimes D(B)$. Тогда C — строго $\mathfrak{m}$-секториальный оператор с сектором $\bar{S}_{\omega_1+\omega_2,\varphi,\min\{\theta_1,\theta_2\}}$ и $\sigma(C)=\sigma(A)+\sigma(B)$.

Доказательство. Утверждение немедленно получается, если сдвинуть и повернуть A и B так, чтобы они стали строго $\mathfrak{m}$-аккретивны, а затем применить следствие 1 теоремы X.52 и предыдущую теорему. $\blacksquare$

XIII.10. Отсутствие сингулярного спектра IV: потенциалы, аналитические относительно масштабных преобразований

До сих пор мы доказали отсутствие сингулярного спектра для трех типов операторов Шредингера: широкого класса двухчастичных операторов, n-частичных систем с потенциалами отталкивания и n-частичных систем со слабыми потенциалами. Общее свойство всех этих систем — наличие только одного канала рассеяния, или, что эквивалентно, отсутствие связанных состояний у их подсистем. В этом разделе мы обсудим один метод доказательства отсутствия сингулярного спектра для многоканальных n-частичных систем, где $n\geqslant 3$. Класс парных взаимодействий, который можно здесь исследовать, весьма узок, однако он содержит кулонов потенциал и обобщенный потенциал Юкавы.

Определение. Группа унитарных операторов $u(\theta)$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$, задаваемых посредством

$$(u(\theta)\psi)(r)=e^{3\theta/2}\psi(e^{\theta}r),$$

называется **группой операторов масштабных преобразований (растяжений) на $\mathbb{R}^3$.**

Множитель $e^{3\theta/2}$ введен для того, чтобы сделать u унитарными. На протяжении этого раздела $u(\theta)$ будет всюду обозначать введенное семейство операторов.

Идея, лежащая в основе применения масштабных преобразований в спектральном анализе, состоит в том, что при их действии очень просто преобразуется кинетическая энергия $H_0 = -\Delta$. Действительно,

$$u(\theta) H_0 u(\theta)^{-1} = e^{-2\theta} H_0 \equiv H_0(\theta).$$

Из этого равенства следует, что оператор $u(\theta) H_0 u(\theta)^{-1}$, определенный a priori при вещественных θ, допускает аналитическое продолжение на комплексные θ. Мы ограничим класс рассматриваемых потенциалов так, чтобы то же самое выполнялось для $H = -\Delta + V$ вместо H_0. Ниже мы увидим, что $H(\theta)$ обладает дискретным спектром, который «локально» не зависит от θ. Однако непрерывный спектр — как это видно уже на примере H_0, для которого $\sigma(H_0(\theta)) = \{z \mid \arg z = -2 \operatorname{Im} \theta\}$, — заметно изменяется при изменении θ. Это позволяет отделить непрерывный спектр от вещественной оси.

Определение. Пусть $\alpha > 0$. Говорят, что квадратичная форма V на $L^2(\mathbb{R}^3)$ принадлежит классу $\mathcal{F}_\alpha$ в том и только том случае, когда

(1) V — симметрическая форма, причем $Q(V) \supset Q(H_0)$, где $H_0 = -\Delta$;

(2) оператор $(H_0 + I)^{-1/2} V (H_0 + I)^{-1/2}$ компактен;

(3) семейство операторов

$$F(\theta) = (H_0 + I)^{-1/2} (u(\theta) V u(\theta)^{-1}) (H_0 + I)^{-1/2},$$

определенных при $\theta \in \mathbb{R}$, имеет продолжение до аналитической ограниченной операторнозначной функции в полосе B_α, где

$$B_\alpha \equiv \{\theta \mid |\operatorname{Im} \theta| < \alpha\}.$$

Множество $\bigcup_{\alpha > 0} \mathcal{F}_\alpha$ называется **семейством потенциалов, аналитических относительно растяжений.**

Если функция $F(\theta)$ в (3) имеет продолжение в полосу $\{\theta \mid |\operatorname{Im} \theta| \leqslant \alpha\}$, аналитическое внутри нее и непрерывное по норме вплоть до границы, то говорят, что V принадлежит классу $\overline{\mathcal{F}}_\alpha$.

В предыдущем определении $u(\theta) V u(\theta)^{-1} \equiv V(\theta)$ обозначает квадратичную форму $V(\theta)(\psi, \varphi) = V(u(-\theta)\psi, u(-\theta)\varphi)$. Определение потенциалов, аналитических относительно растяжений, удобно переформулировать в терминах шкалы пространств

$\mathscr{H}_{+1}\subset\mathscr{H}\subset\mathscr{H}_{-1}$, определенной по квадратичной форме, ассоциированной с оператором H_0 (см. § VIII.6). В самом деле, (1) и (2) говорят о том, что V задает компактный оператор из $\mathscr{H}_{+1}$ в $\mathscr{H}_{-1}$, являющийся самодвойственным. Чтобы сформулировать (3), заметим сначала, что

$$(H_0+I)^{1/2}u(\theta)(H_0+I)^{-1/2}=(H_0+I)^{1/2}(e^{-2\theta}H_0+I)^{-1/2}u(\theta),$$

так что $u(\theta)$ определяет ограниченное отображение из $\mathscr{H}_{+1}$ в $\mathscr{H}_{+1}$, а поскольку $u(-\theta)^*=u(\theta)$, то и из $\mathscr{H}_{-1}$ в $\mathscr{H}_{-1}$. Итак, поскольку V — ограниченное отображение из $\mathscr{H}_{+1}$ в $\mathscr{H}_{-1}$, для любого вещественного θ $u(\theta)Vu(\theta)^{-1}$ есть компактный оператор из $\mathscr{H}_{+1}$ в $\mathscr{H}_{-1}$. Утверждение (3) тогда гласит, что этот оператор имеет $\mathscr{L}(\mathscr{H}_{+1}, \mathscr{H}_{-1})$-значное аналитическое продолжение по θ.

Когда V аналитичен относительно растяжений и $|\operatorname{Im}\theta|<\alpha$, мы будем через $V(\theta)$ обозначать квадратичную форму, ассоциированную с оператором, принадлежащим $\mathscr{L}(\mathscr{H}_{+1}, \mathscr{H}_{-1})$ и полученным посредством описанного выше продолжения. Поскольку предыдущее построение показывает, что $V(\theta)$ — компактный оператор из $\mathscr{H}_{+1}$ в $\mathscr{H}_{-1}$, когда θ вещественно, и поскольку аналитическое продолжение операторнозначной функции с компактными значениями на вещественной оси также компактно (лемма 5 из § 5), заключаем, что $V(\theta)$ — относительно компактное в смысле форм возмущение H_0 при всех θ и, в частности, ограниченное в смысле форм возмущение с нулевой относительной гранью (см. задачу 38). В результате имеем следующее

Предложение 1. Пусть $V\in\mathscr{F}_\alpha$, и пусть $H_0=-\Delta$. Пусть $H_0(\theta)=e^{-2\theta}H_0$ для $\theta\in B_\alpha$. Определим квадратичную форму $H(\theta)=H_0(\theta)+V(\theta)$ на $Q(H_0)$ как сумму форм $H_0(\theta)$ и $V(\theta)$. Тогда

(a) для любого $\theta\in B_\alpha$ форма $H(\theta)$ строго m-секториальна, а именно: для любого ε существует такое z_0, что

$$S_{z_0,\,\operatorname{Im}\theta,\,\varepsilon}=\{\omega\mid 2\operatorname{Im}\theta-\varepsilon<\arg(\omega-z_0)<2\operatorname{Im}\theta+\varepsilon\}$$

— сектор для $H(\theta)$;

(b) $H(\theta)$ — аналитическое семейство типа (B) в области B_α;

(c) для любого вещественного φ имеем $u(\varphi)H(\theta)u(\varphi)^{-1}=H(\theta+\varphi)$.

Доказательство. Пусть $A(\theta)\equiv e^{2\theta}H(\theta)=H_0+e^{2\theta}V(\theta)$. Поскольку H_0 самосопряжен, а $e^{2\theta}V(\theta)$ — ограниченное в смысле форм возмущение H_0 с относительной гранью, равной 0, то для любого δ можно найти такое b, что

$$|(\varphi,\ e^{2\theta}V(\theta)\varphi)|<\delta(\varphi,\ (H_0+b)\varphi).$$

Полагая $\varepsilon=\arcsin\delta$, имеем $\arg[(\varphi,\ (H_0+e^{2\theta}V(\theta)+b)\varphi]<\varepsilon$. Это доказывает (a). Очевидно, $A(\theta)$ есть аналитическое семейство типа (B), так что это справедливо и для $H(\theta)$. Для доказательства (c) фиксируем $\varphi \in \mathbb{R}$ и заметим, что как $u(\varphi)H(\theta)u(\varphi)^{-1}$, так и $H(\theta+\varphi)$ аналитичны в B_α, а если $\theta \in \mathbb{R}$, то они, очевидно, совпадают. ∎

Прежде чем обратиться к некоторым примерам, отметим, что существует операторная версия понятия потенциала, аналитического относительно растяжения, однако соответствующий класс $\mathscr{C}_\alpha$ содержится в $\mathscr{F}_\alpha$ (см. задачу 73).

Пример 1. Пусть V — центральный потенциал, задаваемый вещественнозначной функцией $V(r)$. Тогда при θ вещественном $V(\theta)$ — оператор умножения на функцию $V(e^\theta r)$. Теперь легко видеть (задача 74), что если $V(r)$ обладает аналитическим продолжением $V(z)$ в сектор $\{z \mid |\arg z| < \alpha\}$, причем для каждого $\beta < \alpha$

$$\lim_{\substack{|z| \to \infty \\ |\arg z| < \beta}} V(z) = 0$$

и

$$\sup_{0 < |\varphi| < \beta} \int_{|r|, |r'| \leqslant 1} |V(e^{i\varphi} r)| \, |V(e^{i\varphi} r')| \, |r - r'|^{-2} d^3r \, d^3r' < \infty,$$

то V аналитичен относительно растяжений. Действительно, для каждого $\theta \in B_\alpha$ оператор $V(\theta)$ есть умножение на функцию $V(e^\theta r)$, принадлежащую $R + (L^\infty)_\varepsilon$. В частности, кулонов потенциал $V(r) = r^{-1}$ лежит в $\mathscr{F}_\infty$, а потенциал Юкавы $V(r) = e^{-\mu r}/r$, $\mu > 0$, — в $\mathscr{F}_{\pi/2}$.

Пример 2. Потенциалы, аналитические относительно растяжений, не обязаны быть «локальными», т. е. не обязаны быть операторами умножения. Пусть, например, $\psi \in L^2$ — аналитический вектор инфинитезимального генератора группы $u(\theta)$. Тогда $\{u(\theta)\psi\}_{\theta \in \mathbb{R}}$ обладает аналитическим продолжением в полосу $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \alpha\}$ (задача 75). Пусть V — оператор единичного ранга $(\psi, \cdot)\psi$. Тогда V аналитичен относительно растяжений; в самом деле, $V(\theta) = (\psi(\bar\theta), \cdot)\psi(\theta)$.

Наша конечная цель в этом разделе — анализ спектра гамильтониана H на $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, получаемого посредством отделения движения центра масс в гамильтониане $\tilde H = -\sum_{i=1}^{N} (2\mu_i)^{-1}\Delta_i + \sum_{i<j} V_{ij}(r_i - r_j)$ где каждый V_{ij} — оператор в $L^2(\mathbb{R}^3)$, аналитический относительно растяжений. Мы начнем с рассмотрения двухчастичного случая, а затем применим двухчастичный метод в общей ситуации, дополнив его уравнениями Вайнберга — ван Винтера и леммой Итиносэ.

Теорема XIII.36. Пусть $H_0 = -\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$, и пусть $V \in \mathcal{F}_\alpha$ для некоторого $\alpha > 0$. Предположим, что $\theta \in B_\alpha$, и пусть $H(\theta) = e^{-2\theta} H_0 + V(\theta)$. Тогда

(a) $\sigma(H(\theta))$ зависит лишь от $\operatorname{Im}\theta$;

(b) $\sigma(H(\theta))$ состоит из $\{e^{-2\theta}\lambda \mid \lambda \in [0, \infty)\} \cup \sigma_d(\theta)$, где σ_d — множество, не имеющее предельных точек, за исключением, возможно, нуля; каждое $\mu \in \sigma_d(\theta)$ — собственное значение конечной кратности;

(c) $\sigma_d(\bar\theta) = \overline{\sigma_d(\theta)}$;

(d) если $0 < \operatorname{Im}\theta < \pi/2$, то $\sigma_d(\theta) \subset \mathbb{R} \cup \{\mu \mid -2\operatorname{Im}\theta < \arg\mu < 0\}$ и $\mathbb{R} \cap \sigma_d(\theta) = \sigma_{pp}(H(0)) \setminus \{0\}$; более того, если $0 < \operatorname{Im}\varphi < \operatorname{Im}\theta < \pi/2$, то $\sigma_d(\varphi) \subset \sigma_d(\theta)$;

(e) $\sigma_{\text{sing}}(H(0)) = \varnothing$.

Доказательство. (a) и (c) следуют из предложения 1, утверждающего, что $H(\theta)$ и $H(\theta+\varphi)$ унитарно эквивалентны, если $\varphi \in \mathbb{R}$, и равенства $H(\theta)^* = H(\bar\theta)$. Из следствия 2 теоремы XIII.14 вытекает $\sigma_{ess}(e^{2\theta} H(\theta)) = \sigma_{ess}(H_0) = [0, \infty)$. Это доказывает (b), за исключением того, что a priori $\sigma_d(\theta)$ может иметь предельные точки где угодно в $e^{-2\theta}\mathbb{R}_+$. Помимо этого остается доказать (d) и (e). Фиксируем θ_0 и предположим, что $E \in \sigma_d(\theta_0)$. Поскольку $H(\theta)$ — аналитическое семейство типа (B), из теоремы XII.13 вытекает, что для θ, близких к θ_0, оператор $H(\theta)$ имеет собственные значения, близкие к E, и что эти близкие собственные значения определяются всеми ветвями одной или нескольких функций $f_1(\theta), \ldots, f_n(\theta)$, аналитических вблизи θ_0 и обладающих в худшем случае алгебраическими точками ветвления около θ_0. С другой стороны, если φ вещественно, то $H(\theta_0)$ и $H(\theta_0+\varphi)$ унитарно эквивалентны, так что единственное собственное значение $H(\theta_0+\varphi)$ около E есть E. Мы заключаем, что $f_i(\theta) = E$, если θ близко к θ_0 и $\theta - \theta_0$ вещественно. Но из аналитичности тогда следует, что $f_i(\theta) = E$ для всей области, где f_i определена! Итак, доказано, что множество $\sigma_d(\theta)$ локально постоянно в том смысле, что если $\lambda \in \sigma_d(\theta_0)$, то оно лежит в $\sigma_d(\theta)$ и для всех θ, близких к θ_0. С другой стороны, если $\theta_n \to \theta$ и $\lambda \in \sigma_d(\theta_n)$ для каждого n, то $\lambda \in \sigma(H(\theta))$, поскольку $H(\theta_n) \to H(\theta)$ в смысле равномерной резольвентной сходимости. Поэтому простое рассуждение, основанное на связности (задача 76), доказывает следующее утверждение. Если $\gamma(t)$, где $0 \leqslant t \leqslant 1$, — кривая в B_α и $\lambda \in \sigma_d(\gamma(0))$, то либо $\lambda \in \sigma_d(\gamma(1))$, либо $\lambda \in \sigma_{ess}(H(\gamma(t)))$ для некоторого $t \in (0, 1]$. В частности, если $\lambda \notin \{\mu \mid -2\operatorname{Im}\theta \leqslant \arg\mu \leqslant 0\}$ и $0 < \operatorname{Im}\theta < \pi/2$, то $\lambda \in \sigma_d(\theta)$ тогда и только тогда, когда $\lambda \in \sigma_d(0)$, поскольку можно выбрать кривую $\gamma(t) = t\theta$. Итак,

$$\sigma_d(\theta) \cap \{\mu \mid 0 < \arg\mu < 2\pi - 2\operatorname{Im}\theta\} = \sigma_{pp}(H) \cap (-\infty, 0).$$

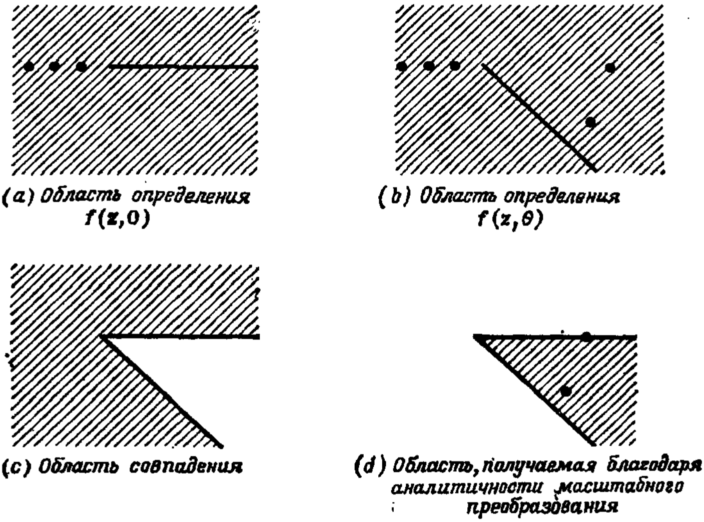


Рис. XIII.5. Аналитическое продолжение матричных элементов резольвенты.

Аналогично, если $0 < \operatorname{Im} \varphi < \operatorname{Im} \theta$, то $\sigma_d(\varphi) \subset \sigma_d(\theta)$. Это показывает, что $\sigma_d(\theta)$ не может иметь никаких предельных точек, кроме нуля. Чтобы завершить доказательство пункта (d), нужно только показать, что $\sigma_d(\theta) \cap (0, \infty) = \sigma_{pp}(H) \cap (0, \infty)$. Для этого требуется дополнительная идея, которая понадобится также при доказательстве (e). Пусть

$$N_\alpha = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid u(\theta)\psi \text{ обладает аналитическим продолжением из } \mathbb{R} \text{ в } B_\alpha\}.$$

N_α есть не что иное, как множество аналитических векторов ψ инфинитезимального генератора D группы $u(\theta)$, для которых $\sum_{n=0}^{\infty} t^n \| D^n \psi \| / n!$ имеет радиус сходимости не меньший α. Пусть $\psi \in N_\alpha$, и пусть $\psi(\theta)$ — продолжение $u(\theta)\psi$. Рассмотрим функцию $f(z, \theta) = (\psi(\bar{\theta}), (H(\theta) - z)^{-1}\psi(\theta))$. Для каждого фиксированного $\theta \in B_\alpha$ функция $f(z, \theta)$ аналитична по z при $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma(H(\theta))$ и мероморфна в области $\mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(H(\theta))$. С другой стороны, фиксируем z с $\operatorname{Im} z > 0$. Тогда $f(z, \theta)$ аналитична по θ в области

$$R_z = \{\theta \mid -\min\{\alpha, {}^1/_2 \arg z\} < \operatorname{Im} \theta < \min\{\alpha, {}^1/_2 \pi\}\}.$$

Поскольку для $\varphi \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} f(z, \varphi) &= (u(\varphi)\psi, (H(\varphi) - z)^{-1} u(\varphi)\psi) = \\ &= (u(\varphi)\psi, u(\varphi)(H(0) - z)^{-1}\psi) = f(z, 0), \end{aligned}$$

заключаем, пользуясь аналитичностью, что $f(z, \cdot)$ — константа на R_z. В частности, если $0 < \operatorname{Im}\theta_0 < \min\{\alpha, {}^1/_2\pi\}$, то $f(z, \theta_0)$ обеспечивает аналитическое продолжение $f(z, 0)$ с $\mathbb{C}\setminus\sigma(H(0))$ в $\mathbb{C}\setminus\sigma(H(\theta_0))$ (см. рис. XIII.5). В частности, если $\psi\in N_\alpha$, то $(\psi, (H-z)^{-1}\psi)$ имеет непрерывные граничные значения при $z\to\mu+i0$, когда $\mu\in\mathbb{R}\setminus\sigma_d(\theta_0)$. Поскольку N_α плотно, а $\sigma_d(\theta_0)\cap\mathbb{R}$ дискретно, то, обращаясь к теореме XIII.20, заключаем, что $\sigma_{\text{sing}}(H(0))=\varnothing$.

Вернемся, наконец, к доказательству того, что $\sigma_d(\theta)\cap(0, \infty)=$ $=\sigma_{pp}(H(0))\cap(0, \infty)$, если $0<\operatorname{Im}\theta<\min\{\alpha, \pi/2\}$. Поскольку $H(0)$ самосопряжен, из функционального исчисления немедленно вытекает, что $\operatorname{s-lim}_{\varepsilon\downarrow 0} i\varepsilon(H-x-i\varepsilon)^{-1}=P_{\{x\}}$ для любого $x\in\mathbb{R}$. Предположим, что $x\notin\sigma_d(\theta)\cap(0, \infty)$. Тогда, в силу предыдущего построения, $(\psi, (H-z)^{-1}\psi)$ имеет аналитическое продолжение из $\{z\mid\operatorname{Im}z>0\}$ в некоторую окрестность x, если $\psi\in N_\alpha$. В частности, $\lim_{\varepsilon\downarrow} i\varepsilon(\psi, (H-x-i\varepsilon)^{-1}\psi)=0$, так что $P_{\{x\}}\psi=0$. Поскольку N_α плотно, $P_{\{x\}}=0$, т. е. $x\notin\sigma_{pp}(H(0))\cap(0, \infty)$. Обратно, пусть $x\in\sigma_d(\theta)\cap(0, \infty)$. Пусть η — собственный вектор $H(\theta)$ с собственным значением x. Тогда $(\varphi, (H(\theta)-z)^{-1}\eta)$ имеет полюс при $z=x$ для некоторых φ. Поскольку $N_{2\alpha}$ плотно, можно найти φ_n, $\eta_n\in N_{2\alpha}$, такие, что $\varphi_n\to\varphi$, $\eta_n\to\eta$. При $z\notin\sigma(H(\theta))$ последовательность $(\varphi_n, (H(\theta)-z)^{-1}\eta_n)$ сходится к $(\varphi, (H(\theta)-z)^{-1}\eta)$, так что по принципу аргумента (который связывает число полюсов мероморфной функции f внутри некоторого контура с интегралом от f'/f по этому контуру) заключаем, что для всех больших n функции $(\varphi_n, (H(\theta)-z)^{-1}\eta_n)$ имеют полюс при $z=x$. Пусть $\psi=\eta_n(-\theta)$, $\varkappa=\varphi_n(-\theta)$. Тогда $(\psi, (H-z)^{-1}\varkappa)=(\varphi_n, (H(\theta)-$ $-z)^{-1}\eta_n)$, если $\operatorname{Im}z>0$, и мы получаем, что $(\psi, (H-z)^{-1}\varkappa)$ имеет полюс при $z=x$. Итак, $(\psi, P_{\{x\}}\varkappa)\neq 0$, и поэтому $x\in\sigma_{pp}(H)$. ∎

Решающую роль в предыдущем доказательстве сыграло то, что мы смогли явно найти $\sigma_{ess}(H(\theta))$, пользуясь теоремой Вейля. В N-частичном случае нам придется заменить теорему Вейля какой-то теоремой типа ХВЖ-теоремы. Имеется одно важное различие между тем, что требуется нам сейчас для анализа $H(\theta)$, и исследованием, проведенным в § 5, а именно то, что потенциалы $V_{ij}(\theta)$ не самосопряжены. В качестве подготовки к N-частичному аналогу теоремы XIII.36 докажем поэтому

Предложение 2. Пусть $\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^{3N-3}$ — разложение $\mathbb{R}^{3N}$ в декартово произведение с выделенной координатой r_i-r_j. Пусть $\tilde{H}=\tilde{H}_0+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant N}\tilde{V}_{ij}$, где

(i) $\tilde{H}_0=-\sum_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}\Delta_i$;

(ii) $\tilde{V}_{ij}=V_{ij}\otimes I$ в соответствии с разложением $\mathbb{R}^{3N}=\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^{3N-3}$;

(iii) каждое V_{ij} есть относительно компактное в смысле форм возмущение оператора $-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$ (однако не обязательно симметрическое).

Пусть H — оператор $\tilde{H}$ с отделенным движением центра масс. Для каждого кластера $C \subset \{1, \ldots, N\}$ определим $H(C_i)$ в соответствии с предписаниями § XI.5. Для каждого кластерного разложения $D = \{C_1, \ldots, C_k\}$ назовем семейство чисел $\{E_1 + \ldots + E_k \mid E_i \in \sigma_{\rm disc}(H(C_i))\}$ множеством **D-порогов** и обозначим его через Σ_D. Пусть Σ — объединение Σ_D по всем D с не менее чем двумя кластерами. Тогда

$$\sigma_{\rm ess}(H) \subset \bigcup_{\lambda \in \Sigma} (\lambda + [0, \infty)).$$

Доказательство. Мы укажем лишь на изменения, которые необходимо сделать в доказательстве § 5, а детали оставим читателю (задача 77). Если $N = 2$, то $\Sigma = \{0\}$ и утверждение теоремы — часть теоремы Вейля о существенном спектре. Таким образом, предположим, что теорема справедлива для всех M-частичных систем, где $M \leqslant N-1$, и докажем ее для N-частичных систем. Первый шаг состоит в доказательстве того, что

$$\sigma(H_D) \subset \bigcup_{\lambda \in \Sigma} (\lambda + [0, \infty)) \tag{65}$$

для любого D с по крайней мере двумя кластерами. Чтобы в этом убедиться, положим $D = \{C_1, \ldots, C_k\}$, так что $H_D = \sum_{i=1}^{k} H(C_i) + T_D$. Теперь каждое V_{ij} есть ограниченное в смысле форм возмущение оператора H_0 с нулевой относительной гранью, а потому каждый $H(C_i)$ — строго m-секториальный оператор с произвольно малым углом раскрытия. Более того, при естественном разбиении $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^{3N-3}) = \mathcal{H}_D \otimes \mathcal{H}_{C_1} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_{C_k}$ каждое слагаемое в $\sum_{i=1}^{k} H(C_i) + T_D$ действует на своем множителе в тензорном произведении. Следовательно, применима лемма Итиносэ (теорема XIII.35 и ее следствие) и $\sigma(H_D) = \sum_{i=1}^{k} \sigma(H(C_i)) + \sigma(T_D)$. Пользуясь тем, что $\sigma(H(C_i)) = \sigma_{\rm disc}(H(C_i)) \cup \sigma_{\rm ess}(H(C_i))$, и предположением индукции, легко доказать (65).

Далее доказательство очень близко к доказательству ХВЖ-теоремы. Поскольку $\sum V_{ij}$ — ограниченное в смысле форм возмущение с нулевой относительной гранью, ряд теории возмущений для $G(E) = (H_0 + \sum V_{ij} - E)^{-1}$ сходится в равномерной топологии, если E — большое по модулю отрицательное число. Полагая

$R(E)=(H_0-E)^{1/2}G(E)(H_0-E)^{1/2}$, как и в § 5, можно получить, что $R(E)=D_R(E)+I_S(E)R(E)$. Как $D_R(E)$, так и $I_S(E)$ могут быть выражены через резольвенты $(H_D-E)^{-1}$, где D имеет по крайней мере два кластера. В силу проведенного выше анализа оба эти оператора имеют аналитические продолжения в $\mathbb{C}\setminus S$, где $S=\bigcup\limits_{\lambda\in\Sigma}(\lambda+[0,\infty))$. На этом шаге докажем замкнутость S по индукции. Наконец, остается показать, что каждая связная диаграмма компактна, с помощью этого доказать компактность $I_S(E)$ и для завершения доказательства применить аналитическую теорему Фредгольма. ∎

Теперь легко доказать основной результат этого раздела. Для облегчения его формулировки дадим сначала

Определение. Пусть $V_{ij}\in\mathcal{F}_\alpha$ для каждой пары $1\leqslant i<j\leqslant N$, и пусть $\tilde V_{ij}=V_{ij}\otimes I$ в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ в соответствии с разложением $\mathbb{R}^{3N}=\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^{3N-3}$, для которого первая координата есть r_i-r_j. Пусть $\tilde H_0=-\sum\limits_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}\Delta_i$, и пусть $\tilde H=\tilde H_0+\sum\tilde V_{ij}$. Для $\theta\in B_\alpha$ пусть $\tilde H(\theta)=e^{-2\theta}\tilde H_0+\sum\tilde V_{ij}(\theta)$. Пусть $H(\theta)$ и H обозначают $\tilde H(\theta)$, $\tilde H$ с отделенным движением их центров масс. Для каждого кластерного разложения $D=\{C_1,\ \ldots,\ C_k\}$ пусть $\Sigma_D(\theta)\equiv\{E_1+\ldots+E_k\mid E_i\in\sigma_{\rm disc}(H_{C_i}(\theta))\}$ и $\Sigma(\theta)=\bigcup\limits_{\#(D)\geqslant 2}\Sigma_D(\theta)$. Наконец, положим $\Sigma_{\min}=$ $=\min\{\lambda\mid\lambda\in\Sigma(0)\}$.

Теорема XIII.37. Пусть H есть N-частичный гамильтониан в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$ с аналитическими относительно растяжений парными потенциалами типа, описанного в последнем определении. Тогда

(a) $\sigma(H(\theta))$ и $\Sigma(\theta)$ зависят только от $\operatorname{Im}\theta$;

(b) $\sigma(H(\theta))=\sigma_{\rm ess}(\theta)\cup\sigma_{\rm d}(\theta)$, где $\sigma_{\rm ess}(\theta)=\{\mu+e^{-2\theta}\lambda\mid\mu\in\Sigma(\theta)$ $\lambda\in[0,\infty)\}$ и где $\sigma_{\rm d}(\theta)$ — дискретный спектр $H(\theta)$;

(c) $\sigma_{\rm d}(\bar\theta)=\overline{\sigma_{\rm d}(\theta)}$; $\Sigma(\bar\theta)=\overline{\Sigma(\theta)}$.

(d1) Если $0\leqslant\operatorname{Im}\theta<\min\{\alpha,\ \pi/2\}$, то

$$\Sigma(\theta)\subset\mathbb{R}\cup\{\Sigma_{\min}+\mu\mid -2\operatorname{Im}\theta<\arg\mu<0\}$$

и $R\cap\Sigma(\theta)=\Sigma(0)$. Более того, если $0<\operatorname{Im}\varphi<\operatorname{Im}\theta<\pi/2$, то $\Sigma(\varphi)\subset\Sigma(\theta)$.

(d2) Если $0<\operatorname{Im}\theta<\pi/2$, то $\sigma_{\rm d}(\theta)\subset\mathbb{R}\cup\{\Sigma_{\min}+\mu\mid -2\operatorname{Im}\theta<\arg\mu<0\}$ и $\mathbb{R}\cap\sigma_{\rm d}(\theta)=\sigma_{\rm pp}(H)\setminus\Sigma(0)$. Далее, если $0<\operatorname{Im}\varphi<\operatorname{Im}\theta<\pi/2$, то $\sigma_{\rm d}(\varphi)\subset\sigma_{\rm d}(\theta)$.

(e) $\sigma_{\rm sing}(H)=\varnothing$.

Доказательство. Поскольку доказательство получается непосредственно из теоремы XIII.36, мы оставляем детали читателю (задачи 78, 79). Утверждения (a) и (c) вытекают из равенств $U(\varphi)H(\theta)U(\varphi)^{-1} = H(\theta+\varphi)$ и $H(\bar\theta) = H(\theta)^*$, а включение $\sigma_{ess}(\theta) \subset \{\mu + e^{-2\theta}\lambda \mid \mu \in \Sigma(\theta),\ \lambda \in [0, \infty)\}$ — из предложения 2. Включение $\{\mu + e^{-2\theta}\lambda \mid \mu \in \Sigma(\theta),\ \lambda \in [0, \infty)\} \subset \sigma_{ess}(\theta)$ нуждается в отдельном доказательстве (задача 78). (d1) для N-частичных систем следует из (d2) для $(N-1)$-частичных систем, а потому только (d2) нуждается в доказательстве. Оно проводится, как в теореме XIII.36, в два этапа. Сначала применяется теория возмущений дискретного спектра, чтобы показать, что $\sigma_d(\theta)$ локально постоянно, что в свою очередь применяется для доказательства всех утверждений (d2), за исключением равенства $[\Sigma_{min}, \infty) \cap \sigma_d(\theta) = \sigma_{pp}(H) \setminus (\Sigma(0) \cup (-\infty, \Sigma_{min}))$. Это последнее доказывается аналитическим продолжением матричных элементов $(\psi, (H-z)^{-1}\psi)$ при $\psi \in N_\alpha$. Попутно это рассуждение доказывает (e). ∎

Следствие. Сингулярный спектр N-частичных квантовых гамильтонианов с отделенным движением центра масс и с парными потенциалами Кулона или Юкавы пуст.

Собственные значения $H(\theta)$ в $\sigma_d(\theta) \setminus \sigma_d(0)$ называются **резонансными собственными значениями** оператора H. Мы уже указывали на их важность в § XII.6. Точки множества $\Sigma(\theta) \setminus \Sigma$ называются **комплексными порогами** или **порогами резонансов**.

XIII.11. Свойства собственных функций

Не считая доказательства равенства $\sigma_{pp} = \sigma_{disc}$ (к которому мы вернемся в § 13), намеченное исследование спектров различных типов операторов Шредингера в неограниченном пространстве с парными потенциалами, стремящимися к нулю на бесконечности, завершено. Обратимся теперь к ряду проблем, которые непосредственно не входят в спектральный анализ, но близко к нему примыкают. В этом разделе мы рассмотрим свойства регулярности и убывания на бесконечности собственных функций. Существует тесная связь между двумя этими наборами свойств, поскольку, как мы уже видели (см. § IX.2, 3), гладкость функции ψ непосредственно связана со свойствами убывания ее фурье-образа $\hat\psi$. Ниже все теоремы формулируются через $\psi(x)$ — функции в x-пространстве, но в доказательствах часто будут встречаться $\hat\psi(p)$ — функции в p-пространстве. Сначала мы обсуждаем гладкость $\psi(x)$, затем убывание ψ в том смысле, что при некоторых обстоятельствах $\psi \in D(\exp(a|x|))$. Наконец, мы комбинируем эти два ряда идей для доказательства поточечных оценок $|\psi(x)| \leqslant C\exp(-a|x|)$.

Для формулировки утверждений относительно гладкости введем пространство функций, **равномерно непрерывных по Гёльдеру**.

Определение. Пусть $0<\theta<1$. Тогда говорят, что $f\in C_\theta(\mathbb{R}^n)$, если функция $f\colon \mathbb{R}^n\to\mathbb{C}$ ограничена и удовлетворяет условию

$$|f(x)-f(y)|\leqslant C|x-y|^\theta$$

для некоторого фиксированного C и всех x, $y\in\mathbb{R}^n$. Положим

$$\|f\|_{(\theta)}\equiv\|f\|_\infty+\sup_{x\neq y}|x-y|^{-\theta}|f(x)-f(y)|.$$

Говорят, что $f\in C^1_\theta(\mathbb{R}^n)$, если f ограничена, принадлежит C^1 и $\partial f/\partial x_j\in C_\theta(\mathbb{R}^n)$ для каждого $j=1, \ldots, n$. Положим

$$\|f\|_{\theta,1}=\|f\|_\infty+\sum_{j=1}^n\|D_jf\|_{(\theta)}.$$

Связь между непрерывностью по Гёльдеру и свойствами фурье-образа демонстрирует следующая

Лемма 1. Пусть $(1+k^2)^{\beta/2}\hat{f}(k)\in L^1(\mathbb{R}^n)$. Тогда

(a) если $0<\beta<1$, то $f\in C_\beta$ и $\|f\|_{(\beta)}\leqslant c\|(1+k^2)^{\beta/2}\hat{f}(\cdot)\|_1$;

(b) если $1<\beta<2$, то $f\in C^1_{\beta-1}$ и $\|f\|_{\beta-1,1}\leqslant c_n\|(1+k^2)^{\beta/2}\hat{f}\|_1$.

Доказательство. (a) При каждом вещественном s имеем $|e^{is}-1|\leqslant 2$ и $|e^{is}-1|\leqslant\left|\int\limits_0^s e^{it}\,dt\right|\leqslant s$, так что $|e^{is}-1|\leqslant s^\beta 2^{1-\beta}$. Итак,

$$|e^{ik\cdot x}-e^{ik\cdot y}|=|e^{ik\cdot(x-y)}-1|\leqslant 2^{1-\beta}|k|^\beta|x-y|^\beta,$$

так что

$$\begin{aligned}|f(x)-f(y)|&\leqslant(2\pi)^{-n/2}\int|\hat{f}(k)|\,|e^{ik\cdot x}-e^{ik\cdot y}|\,dk\leqslant\\&\leqslant\left[2^{1-\beta}(2\pi)^{-n/2}\int|\hat{f}(k)|\,|k|^\beta\,dk\right]|x-y|^\beta\leqslant\\&\leqslant 2^{1-\beta}(2\pi)^{-n/2}\|(1+k^2)^{\beta/2}\hat{f}\|_1|x-y|^\beta.\end{aligned}$$

Поскольку $\|f\|_\infty\leqslant\|\hat{f}\|_1$, отсюда следует (a).

Доказательство (b) аналогично (a), и мы оставляем его читателю (задача 80). ∎

Теперь понятно, какого типа утверждений о гладкости можно ожидать, рассматривая $H=-\Delta+V$ на $\mathbb{R}^3$, когда $V\in L^2+L^\infty$. Тогда по теореме Като $D(H)=D(-\Delta)$. Но если $\psi\in D(-\Delta)$, то $(1+k^2)\hat{\psi}\in L^2$, так что для любого $\beta<1/2$ имеем $(1+k^2)^{\beta/2}\hat{\psi}\in L^1$, поскольку тогда $(1+k^2)^{-(1-\beta/2)}$ принадлежит $L^2(\mathbb{R}^3)$. Итак, приходим к выводу, что $D(H)\subset C_\theta$, если $\theta<1/2$. Естественно ожидать, что для N-частичных гамильтонианов с парным взаимодействием собственные функции имеют особенности не хуже тех, которые порождаются соответствующими парными потенциалами в двухчастичном случае. Для формулировки точного утверждения мы введем специальный класс потенциалов.

Определение. Пусть дано n, и предположим, что $\sigma \geqslant 1$ и $\sigma > n/2$. Говорят, что вещественнозначная измеримая функция V на $\mathbb{R}^n$ принадлежит классу $M_\sigma^{(n)}$, тогда и только тогда, когда $\hat{V} \in L^{\sigma'} + L^1$, где $\sigma' = (1-\sigma^{-1})^{-1}$ — индекс, дуальный к σ.

Пример 1. Пусть $V(r) = |r|^{-1}$ на $\mathbb{R}^3$ — потенциал Кулона. Тогда $\hat{V}(k) = c|k|^{-2} \in L^{\sigma'} + L^1$, если $\sigma' > 3/2$, так что $V \in M_\sigma^{(3)}$, если $\sigma < 3$. То же утверждение справедливо для потенциала Юкавы $V(r) = e^{-\mu|r|}/|r|$.

Предложение. (a) Если $\sigma \geqslant 2$ и $\sigma > n/2$ и если $V \in M_\sigma^{(n)}$, то V ограничен относительно $-\Delta$ с нулевой относительной гранью.

(b) Если $\sigma \geqslant 1$ и $\sigma > n/2$ и если $V \in M_\sigma^{(n)}$, то V ограничен относительно $-\Delta$ в смысле форм с нулевой относительной гранью.

Доказательство. (a) Согласно теореме Планшереля, нужно только доказать, что $\|(p^2+a)^{-1}\hat{V} * \psi\|_2 \leqslant C_a\|\psi\|_2$ для всех $\psi \in L^2$, где константа C_a не зависит от ψ и может быть выбрана произвольно малой за счет увеличения a. Все это следует из неравенств Юнга и Гёльдера. Так же доказывается (b). ∎

Следующая теорема описывает свойства регулярности собственных функций, поскольку любая собственная функция $\tilde{H}$ с очевидностью принадлежит $C^\infty(\tilde{H})$. Поскольку $C^\infty(\tilde{H})$ остается инвариантным под действием $e^{-it\tilde{H}}$, из нее также следуют свойства регулярности решений нестационарного уравнения Шредингера при достаточно регулярных начальных данных.

Теорема XIII.38 (теорема Като—Саймона). Пусть задан

$$\tilde{H} = -\sum_{i=1}^{N} (2\mu_i)^{-1}\Delta_i + \sum_{i<j} V_{ij}(r_i - r_j)$$

как оператор в $L^2(\mathbb{R}^{Nn})$, где точка в $\mathbb{R}^{Nn}$ записывается как $\langle r_1, \ldots, r_N\rangle$, $r_i \in \mathbb{R}^n$. Предположим, что $\sigma \geqslant 1$, $\sigma > n/2$ и каждый V_{ij} принадлежит $M_\sigma^{(n)}$. Тогда

(a) если $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$, то $\psi \in C_\theta$ для любого $\theta < \min\{1, 2-\sigma^{-1}n\}$;

(b) если $\sigma > n$ и $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$, то $\psi \in C_\theta^1$ для любого $\theta < 1-\sigma^{-1}n$.

Более того, эти вложения непрерывны в том смысле, что для заданного θ существуют такие m и C, что $\|\psi\|_{(\theta)} \leqslant C[\|\tilde{H}^m\psi\| + \|\psi\|]$ для всех $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$. Идентичные результаты справедливы, если $\tilde{H}$

заменяется на H — оператор в $L^2(\mathbb{R}^{(N-1)n})$, получаемый отделением движения центра масс из $\tilde{H}$.

Доказательство. Мы рассматриваем лишь случай $\sigma \geqslant 2$, избегая тем самым обращения к технике квадратичных форм. Общий случай $\sigma \geqslant 1$ исследован в работах, цитированных в Замечаниях. Мы также оставляем читателю доказательство того, что вложения непрерывны (задача 82).

Пусть $H_0 = -\sum_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}\Delta_i$, и пусть $t_0(k)$ — функция $\sum_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}k_i^2$ на $\mathbb{R}^{Nn}$. Прежде всего утверждается, что

$$\|(t_0(k)+1)^{-\beta}\hat{V}_{ij} * \eta\|_p \leqslant C\|\eta\|_p \tag{66}$$

для любых $p \in [1, 2]$, $\eta \in L^p(\mathbb{R}^{Nn})$ и β, где $\beta > (2\sigma)^{-1}n$. В (66) константа C не зависит от η и p (она зависит только от V_{ij}, t_0 и β), а $\hat{V}_{ij}$ — фурье-образ по всем Nn переменным, так что

$$(\hat{V}_{ij} * \eta)(k_1, \ldots, k_N) =$$
$$= \int (2\pi)^{(Nn-n)/2} f(l)\, \eta(k_1, \ldots, k_i - l, \ldots, k_j + l, \ldots, k_N)\, d^n l,$$

где f — фурье-образ V_{ij} в $\mathbb{R}^n$. Для доказательства оценки (66) отметим, что, поскольку $p \leqslant 2$ и $\sigma \geqslant 2$, из неравенств Гёльдера и Юнга вытекает оценка

$$\|(k^2+1)^{-\beta} f * \varphi\|_p \leqslant C_2\|\varphi\|_p, \tag{67}$$

если $\varphi \in L^p(\mathbb{R}^n)$, так как $\beta > (2\sigma)^{-1}n$ означает, что $(k^2+1)^{-\beta} \in L^\sigma$. Из (67) немедленно выводим, что

$$\|[(k_i - k_j)^2 + 1]^{-\beta}\hat{V}_{ij} * \eta\|_p \leqslant C_1\|\eta\|_p$$

для всех $\eta \in L^p(\mathbb{R}^{Nn})$; это доказывается возведением обеих частей (67) в p-ю степень и интегрированием по всем не затронутым в (67) переменным. Поскольку функция $[(k_i - k_j)^2 + 1]^\beta \times [t_0(k)+1]^{-\beta}$ ограничена, то (66) выполняется.

Предположим далее, что $p \in [1, 2]$, $\beta > (2\sigma)^{-1}n$, что $\psi \in D(\tilde{H})$, причем $\hat{\psi}$ и $\mathcal{F}(\tilde{H}\psi)$ лежат в L^p. Тогда утверждается, что $(t_0(k)+1)^{(1-\beta)}\hat{\psi} \in L^p$. Действительно, можно написать

$$\hat{\psi} = \mathcal{F}[(H_0 + I)^{-1}(\tilde{H} + I - V)\psi] =$$
$$= (t_0(k)+1)^{-1}(\mathcal{F}(\tilde{H}\psi) + \hat{\psi}) - (2\pi)^{-Nn/2}(t_0(k)+1)^{-1}\sum_{i<j}\hat{V}_{ij} * \hat{\varphi},$$

так что (66) показывает, что $(t_0(k)+1)^{(1-\beta)}\hat{\psi} \in L^p$.

Теперь можно завершить доказательство. Поскольку $\sigma > n/2$, выберем β так, чтобы выполнялось $(2\sigma)^{-1}n < \beta < 1$. Предположим, что $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$. Тогда по предыдущему

$$(k^2+1)^{1-\beta}\mathcal{F}(\tilde{H}^m\psi)\in L^2$$

для всех m. Поскольку $(k^2+1)^{-(1-\beta)}\in L^r$ для всех $r\in(r_0, \infty)$ при некотором $r_0<\infty$, заключаем, что $\mathcal{F}(\tilde{H}^m\psi)\in L^q$, коль скоро $q^{-1}-r_0^{-1}<1/2$ и $q\geqslant 1$. Повторяя этот прием j раз, видим, что $\mathcal{F}(\tilde{H}^m\psi)\in L^q$, коль скоро $q^{-1}-jr_0^{-1}<1/2$. Выбирая подходящее j, заключаем, что $\mathcal{F}(\tilde{H}\psi)$ и $\hat{\psi}$ лежат в L^1. Еще раз прибегая к утверждению из предыдущего абзаца, видим, что $(k^2+1)^{1-\beta}\hat{\psi}\in L^1$, если только $\beta>(2\sigma)^{-1}n$ и $\psi\in C^\infty(\tilde{H})$. Лемма 1 завершает доказательство. ∎

Следствие. Пусть H — гамильтониан атома. Тогда любая $\psi\in C^\infty(H)$ есть C^∞-функция на $\mathbb{R}^{3N-3}\setminus\{\langle r_1, \ldots, r_{N-1}\rangle \mid$ какие-либо $r_i=0$ или какие-либо $r_i=r_j\}$ и равномерно непрерывна по Гёльдеру порядка θ для любого $\theta<1$ на всем $\mathbb{R}^{3N-3}$.

Доказательство. Первое утверждение получается с помощью методов теоремы об эллиптической регулярности (задача 83); второе — из теоремы XIII.38. ∎

* * *

Вторая проблема, рассматриваемая в этом разделе, — экспоненциальное убывание собственных функций дискретного спектра. Сначала мы приводим утверждения для пространств L^2 в различных формах, а затем — поточечные оценки. Начнем с результата в L^2, который легко доказывается, а потом приведем более сильное утверждение для L^2, которое потребует некоторых предварительных сведений из кинематики.

Теорема XIII.39. Пусть $\tilde{H}=-\sum_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}\Delta_i+\sum_{i<j}V_{ij}(r_i-r_j)$ в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, и пусть H — оператор в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, полученный из $\tilde{H}$ отделением движения центра масс. Предположим, что каждое V_{ij} — ограниченное в смысле форм возмущение оператора $-\Delta$ на $\mathbb{R}^3$ с нулевой относительной гранью. Пусть $E\in\sigma_{\text{disc}}(H)$, и пусть $H\psi=E\psi$. Тогда $\psi\in D(e^{ar})$ для некоторого $a>0$, где $r=\left(\sum_{j=1}^{3N-3}x_j^2\right)^{1/2}$ в некоторой системе координат на $\mathbb{R}^{3N-3}$.

Доказательство. Поскольку

$$e^{ar}\leqslant\exp\left(a\sqrt{3N-3}\max|x_j|\right)\leqslant\sum_{j=1}^{3N-3}\exp\left(a|x_j|\sqrt{3N-3}\right),$$

нужно только показать, что ψ — аналитический вектор для каждого оператора координаты x_j. Гамильтониан H можно представить в виде H_0+V, причем $H_0=t(p)$, где $t(v)=\sum_{i<j} a_{ij}v_iv_j$, а p есть набор $3N-3$ операторов $p_j=-i\partial/\partial x_j$, и матрица $\{a_{ij}\}$ положительно определена.

Идея состоит в применении метода аналитического продолжения с помощью масштабных преобразований, как в § 10, но с другой группой. Фиксируем j, и пусть $W(\alpha)=e^{i\alpha x_j}$. Тогда

$$H_0(\alpha)\equiv W(\alpha)H_0W(\alpha)^{-1}=t(p_1, \ldots, p_j-\alpha, \ldots, p_{3N-3})$$

и

$$V(\alpha)\equiv W(\alpha)VW(\alpha)^{-1}=V.$$

Как $H_0(\alpha)$, так и $V(\alpha)$ обладают аналитическими продолжениями на всю комплексную плоскость α. Более того, легко видеть, что для каждого фиксированного α: $^1/_2H_0 \leqslant \operatorname{Re} H_0(\alpha)+c_\alpha$, где c_α — зависящая от α константа. Отсюда следует, что $H(\alpha)\equiv\equiv H_0(\alpha)+V(\alpha)$ — целое аналитическое семейство типа (B).

Тем самым применима теория, развитая в § XII.2, так что существует константа a и функции $f_1, \ldots, f_k$ на множестве $\{\alpha \mid |\alpha|<a\}$ с не хуже чем алгебраическими особенностями при $\alpha=0$ и такие, что ветви $f_1(\alpha), \ldots, f_k(\alpha)$ дают все собственные значения $H(\alpha)$ вблизи E. Более того, существует такая проекторнозначная аналитическая функция $P(\alpha)$ на $\{\alpha \mid |\alpha|<a\}$, что $\operatorname{Ran} P(\alpha)$ есть множество собственных векторов $H(\alpha)$ с собственными значениями $f_1(\alpha), \ldots, f_k(\alpha)$. Далее, при α вещественных $H(\alpha)=W(\alpha)HW(\alpha)^{-1}$, так что $f_1(a)=\ldots=f_k(\alpha)=E$ и $W(\alpha)P(0)W(\alpha)^{-1}=P(\alpha)$ для таких α. По аналитичности f_i всегда равны E и

$$W(\alpha_0)P(\alpha)W(\alpha_0)^{-1}=P(\alpha+\alpha_0),$$

если α_0 вещественно и $|\alpha|<a$, $|\alpha+\alpha_0|<a$. То, что ψ — аналитический вектор для x_j, следует теперь из приводимого ниже предложения. ∎

Предложение (лемма О'Коннора). Пусть $W(\alpha)=e^{i\alpha A}$ — однопараметрическая унитарная группа, и пусть D — связная область в $\mathbb{C}$, причем $0\in D$. Предположим, что проекторнозначная аналитическая функция $P(\alpha)$ задана на D, причем множество $\operatorname{Ran} P(0)$ конечномерно, так что

$$W(\alpha_0)P(\alpha)W(\alpha_0)^{-1}=P(\alpha+\alpha_0)$$

для всех пар $\langle\alpha, \alpha_0\rangle$ с вещественными α_0 и таким α, что $\alpha+\alpha_0\in D$. Пусть $\psi\in\operatorname{Ran} P(0)$. Тогда функция $\psi(\alpha)\equiv W(\alpha)\psi$ обладает аналитическим продолжением с $D\cap\mathbb{R}$ на D. В частности, ψ — аналитический вектор для A.

Доказательство. Пусть $\mathcal{A}_D$ — множество векторов φ, для которых $\varphi(\alpha) \equiv W(\alpha)\varphi$ обладает аналитическим продолжением с $D \cap \mathbb{R}$ на D. Тогда $\mathcal{A}_D$ плотно в соответствующем гильбертовом пространстве (см. § X.6), так что $P(0)[\mathcal{A}_D]$ плотно в $\operatorname{Ran} P(0)$. Поскольку $\operatorname{Ran} P(0)$ конечномерно, $P(0)[\mathcal{A}_D] = \operatorname{Ran} P(0)$. Итак, следует доказать лишь, что $P(0)[\mathcal{A}_D] \subset \mathcal{A}_D$. Пусть $\varphi \in \mathcal{A}_D$, и пусть $\eta(\alpha) = P(\alpha)\varphi(\alpha)$ при $\alpha \in D$. Очевидно, $\eta(\alpha)$ аналитичен и для $\alpha \in D \cap \mathbb{R}$

$$\eta(\alpha) = P(\alpha) W(\alpha)\varphi = W(\alpha)(P(0)\varphi),$$

так что $P(0)\varphi \in \mathcal{A}_D$. ∎

Чтобы получить более точные результаты о том, сколь велика константа a в утверждении $\psi \in D(e^{ar})$, необходимо ввести некоторые кинематические понятия, связанные с физическим смыслом r.

Определение. Для частиц с массами $\mu_1, \ldots, \mu_N$, расположенных в точках $\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N$, определим **полную массу** $M = \sum \mu_i$, **центр масс** $\mathbf{R} = M^{-1} \sum_{i=1}^{N} \mu_i \mathbf{r}_i$ и **радиус инерции** $r = [M^{-1} \times \sum \mu_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{R})^2]^{1/2}$.

Определение. Для заданного N-частичного свободного квантового гамильтониана $\tilde{H}_0$ в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ система координат $\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}$, ортогональных к $\mathbf{R}$, называется **системой нормальных координат** тогда и только тогда, когда

$$\tilde{H}_0 = -(2M)^{-1} \left[\Delta_{\mathbf{R}} + \sum_{i=1}^{N-1} \Delta_{\zeta_i} \right].$$

Чтобы убедиться в существовании нормальных координат, перейдем сначала в систему якобиевых координат $\xi_1, \ldots, \xi_{n-1}$, так что

$$\tilde{H}_0 = -(2M)^{-1}\Delta_{\mathbf{R}} + \sum_j (-2M_j)^{-1} \Delta_{\xi_j},$$

и положим $\zeta_j = (M_j/M)^{1/2} \xi_j$.

Предложение. (a) Радиус инерции r есть функция координат, ортогональных $\mathbf{R}$.

(b) Если $\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}$ — система нормальных координат, то

$$r = \left(\sum_{i=1}^{N-1} |\zeta_i|^2 \right)^{1/2}.$$

Доказательство. Заметим сначала, что $Mr^2 + MR^2 = \sum_{i=1}^{N} \mu_i r_i^2$. Пусть

$\eta_i = (\mu_i/M)^{1/2} r_i$, так что

$$\tilde{H}_0 = -(2M)^{-1} \sum_{i=1}^{N} \Delta_{\eta_i}, \tag{68a}$$

$$Mr^2 + MR^2 = M \sum_{i=1}^{N} \eta_i^2. \tag{68b}$$

В силу (68a), преобразование координат от $\langle \eta_1, \ldots, \eta_N \rangle$ к $\langle \mathbf{R}, \zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1} \rangle$ ортогонально, если $\langle \zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1} \rangle$ — система нормальных координат, а тогда, в силу (68b),

$$r^2 + R^2 = R^2 + \sum_{i=1}^{N-1} \zeta_i^2. \ \blacksquare$$

Теорема XIII.40 (теорема О'Коннора — Комба — Томаса). Пусть $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \sum_{i<j} V_{ij}(r_i - r_j)$ есть N-частичный гамильтониан в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, где каждое $V_{ij} \in R + (L^\infty)_\varepsilon$. Пусть H — оператор в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, полученный из $\tilde{H}$ отделением движения центра масс. Пусть $\Sigma = \inf \sigma_{\text{ess}}(H)$, и пусть ψ — собственная функция H с собственным значением $E < \Sigma$. Тогда $\psi \in D(e^{ar})$, где r — радиус инерции, во всех случаях, когда $a^2 < 2M(\Sigma - E)$.

Доказательство. Мы даем лишь набросок доказательства, а детали оставляем читателю. Пусть $\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}$ — система нормальных координат; введем $W(\alpha) = \exp(i(\alpha_1 \cdot \zeta_1 + \ldots + \alpha_{N-1} \cdot \zeta_{N-1}))$ для $\alpha = \langle \alpha_1, \ldots, \alpha_{N-1} \rangle \in \mathbb{C}^{3N-3}$. Пусть мы можем доказать, что $\psi \in D(W(\alpha))$, если $|\alpha| \equiv (|\alpha_1|^2 + \ldots + |\alpha_{N-1}|^2)^{1/2} < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$. Тогда простое геометрическое построение (задача 86a) показывает, что $\varphi \in D(e^{ar})$, если $a < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$.

Итак, достаточно доказать, что функция $W(\alpha)\psi$, заданная при $\alpha \in \mathbb{R}^{3N-3}$, имеет продолжение в область $\{\alpha \mid |\operatorname{Im} \alpha|^2 < 2M(\Sigma - E)\}$. Положим

$$H_0(\alpha) = -(2M)^{-1} \sum_{i=1}^{N-1} (\nabla_{\zeta_i} - i\alpha_i)^2$$

и $H(\alpha) = H_0(\alpha) + V$. Тогда анализ, аналогичный проведенному в § 10 (задача 86b), показывает, что

$$\sigma_{\text{ess}}(H(\alpha)) = \bigcup_D \{\lambda + \mu \mid \lambda \in \Sigma_D(\alpha),\ \mu \in K_D\},$$

где $\Sigma_D(\alpha)$ — пороги, ассоциированные с кластерным разложением D, а $K_D = \{t_D(p - \alpha) \mid p \in \mathbb{R}^{3N-3}\}$, где t_D — кинетическая энергия взаимного движения кластеров в D. По индукции легко показать (задача 86с), что

$$\sigma_{ess}(H(\alpha)) \subset \{\lambda \mid \operatorname{Re}\lambda \geqslant \Sigma - (2M)^{-1}(\operatorname{Im}\alpha)^2\}.$$

Итак, если $(\operatorname{Im}\alpha)^2 < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$, то E отделено от $\sigma_{ess}(H(\alpha))$. Следуя аргументации § 10, видим, что T — собственное значение $H(\alpha)$ при всех таких α. Доказательство завершается (задача 86d) повторением доказательства теоремы XIII.39 и применением леммы О'Коннора. ∎

Если потенциалы аналитичны относительно масштабных преобразований, то можно доказать также и экспоненциальное убывание собственных функций, отвечающих собственным значениям в непрерывном спектре. Этот результат найдет свои применения в § 13.

Теорема XIII.41. Пусть $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \sum_{i<j} V_{ij}$, где каждый оператор умножения V_{ij} — потенциал, аналитический относительно масштабных преобразований, из некоторого $\mathcal{F}_\beta$. Пусть E — непороговое собственное значение H с собственной функцией ψ. Тогда

(a) $\psi \in D(e^{ar})$ для некоторого $a > 0$;

(b) если $U(\theta)$ — семейство операторов растяжения и $\beta_0 = \min\{\beta, \pi/2\}$, то $U(\theta)\psi \equiv \psi(\theta)$ обладает продолжением в полосу $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$ и для каждого θ в этой полосе $\psi(\theta) \in D(e^{ar})$ при некотором $a > 0$;

(c) если E больше наибольшего порога, то β_0 в (b) можно выбрать равным $\min\{\beta, \pi\}$;

(d) если каждое V_{ij} обладает тем свойством, что $V_{ij}(\theta)$ допускает продолжение в полосу $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| \leqslant \beta\}$, аналитическое внутри нее и непрерывное на всей полосе, и если $\beta < \pi/2$ (или, когда E больше наибольшего порога, если $\beta < \pi$), то $\psi(\theta)$ допускает продолжение в ту же полосу, аналитическое внутри нее и непрерывное на всей полосе, причем $\psi(\theta) \in D(e^{ar})$ для некоторого $a > 0$.

Доказательство. В соответствии с исследованием в § 10 E — собственное значение $H(\theta)$ для всех θ в полосе $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$ или, в случае (d), в $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| \leqslant \beta_0\}$. Пусть $P(\theta)$ — соответствующий проектор, определенный как спектральный проектор, если θ вещественно, и по методу § XII.2, если $\operatorname{Im}\theta \neq 0$. Очевидно, $P(\theta)$ аналитичен в областях $\{\theta \mid 0 < |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$, и, в силу аргументации из § 10, непрерывен в $\{\theta \mid 0 \leqslant |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$. Далее, $P(\theta)$ самосопряжен, если θ вещественно. По принципу симметрии Шварца $P(\theta)$ аналитичен во всей полосе $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$. Свойство аналитичности $\psi(\theta)$ следует теперь из леммы О'Коннора.

Если $\operatorname{Im}\theta \neq 0$, то E — дискретное собственное значение, поэтому можно доказать, что $\psi(\theta) \in D(e^{ar})$ для некоторого $a > 0$, следуя методу доказательства теоремы XIII.39. Предположим, что $\psi(\theta_0) \in D(\exp(a_0 e^{\theta_0} r))$, где $|\operatorname{Im}\theta_0| < \pi/4$. Покажем, что $\psi \in D(e^{a_0 r})$. Пусть дано $\varepsilon > 0$, пусть $\eta \in L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, и введем

$$F(\theta) = (\eta, \exp(-\varepsilon r^2 e^{2\theta}) \exp(a_0 e^{\theta} r) \psi(\theta)).$$

Очевидно, функция $F(\theta)$ аналитична в полосе $\{\theta \,|\, |\operatorname{Im}\theta| < |\operatorname{Im}\theta_0| + \delta\}$ при подходящем δ. Более того, $F(\theta)$ равномерно ограничена на этой полосе, а для $\operatorname{Im}\theta = \pm |\operatorname{Im}\theta_0|$ имеем $|F(\theta)| \leqslant \|\eta\| \|\exp(a_0 e^{\theta_0} r) \psi(\theta_0)\|$. По принципу максимума это последнее неравенство выполняется для всех θ, в частности

$$|(\eta, e^{-\varepsilon r^2} e^{a_0 r} \psi)| \leqslant C \|\eta\|$$

для всех η и ε. Отсюда следует, что $\psi \in D \exp(a_0 r))$. ∎

Подобно теореме XIII.39, теорема XIII.41 справедлива и в более сильной форме, содержащей оценку величины a_0 (см. Замечания).

В заключение обратимся к доказательству поточечных экспоненциальных оценок.

Теорема XIII.42. Пусть H есть N-частичный гамильтониан в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$ с потенциалами из $M_\sigma^{(3)}$ для некоторого $\sigma > 3/2$. Предположим, что $\psi \in C^\infty(H)$ и $H^n \psi \in D(e^{ar})$ для некоторого a и всех n, где r — радиус инерции. Тогда для каждого ε существует константа C_ε, такая, что при всех ζ

$$|\psi(\zeta)| \leqslant C_\varepsilon e^{-(a-\varepsilon) r}.$$

В частности, если выполняются условия теоремы XIII.40 и, кроме того, каждое $V_{ij} \in M_\sigma^{(3)}$, то

$$|\psi(\zeta)| \leqslant C_\alpha e^{-ar}$$

для любого $a < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$.

Доказательство. Мы воспользуемся теорией преобразования Фурье, особенно идеями, лежащими в основе теоремы Пэли — Винера. Перейдем к нормальным координатам, так что $r = \left(\sum_{i=1}^{N-1} |\zeta_i|^2 \right)^{1/2}$. Если $\varphi \in D(e^{ar})$, то для любого $k \in \mathbb{C}^{3N-3}$ с $|\operatorname{Im} k| < a$ функция $\varphi_k \equiv e^{-ik\cdot\zeta} \varphi(\zeta)$ лежит в $L^1(\mathbb{R}^{3N-3})$, поскольку $\exp(-br) \in L^2$ для любого $b > 0$. Более того, отображение $k \mapsto \varphi_k$ аналитично по k как L^1-значная функция. Итак, функция

$$\hat{\varphi}(k) = (2\pi)^{-(3N-3)/2} \int \varphi_k(\zeta)\, d\zeta$$

аналитична в трубе $\{k \mid |\operatorname{Im} k| < a\}$. По теореме Планшереля для любого $b < a$ существует константа C_b, такая, что

$$\int_{k \in \mathbb{R}^{3N-3}} |\hat{\varphi}(k+i\varkappa)|^2 d^{3N-3}k < C_b, \tag{69}$$

если $|\varkappa| \leqslant b$. Далее мы следуем доказательству теоремы XIII.38. Выполнив аналитическое продолжение, видим, что $\hat{\varphi}(k)$ удовлетворяет уравнению

$$(2M)^{-1}k^2\hat{\varphi}(k)+(2\pi)^{-(3N-3)/2}\int \hat{V}(l)\,\hat{\varphi}(k-l)\,d^{3N-3}l=\widehat{H\varphi}(k)$$

для всех k с $|\operatorname{Im} k| < a$, как только φ и $H\varphi$ лежат в $D(e^{ar})$. Следуя доказательству теоремы XIII.38 и пользуясь неравенством (69), можно показать (задача 88), что для любого $b < a$ существует константа D_b, такая, что

$$\int |\hat{\psi}(k+i\varkappa)|\,d^{3N-3}\varkappa < D_b, \tag{70}$$

если $|\varkappa| \leqslant b$ и $\psi, H\psi, \ldots, H^m\psi \in D(\exp(ar))$ для подходящего m. Поскольку $\hat{\psi}(\cdot+i\varkappa)$ — преобразование Фурье от $e^{\varkappa\cdot\zeta}\psi(\zeta)$, оценка (70) влечет за собой неравенство

$$|e^{\varkappa\cdot\zeta}\psi(\zeta)| \leqslant D_b(2\pi)^{-(3N-3)/2},$$

если $|\varkappa| \leqslant b$. Взяв точную верхнюю грань по таким $\varkappa$, видим, что

$$|e^{br}\psi(\zeta)| \leqslant D_b(2\pi)^{-(3N-3)/2}. \ \blacksquare$$

Следствие. Пусть H — гамильтониан атома. Тогда любая собственная функция ψ, отвечающая точке дискретного спектра, удовлетворяет оценке вида

$$|\psi(\zeta)| \leqslant C_a e^{-ar}$$

для некоторого положительного a.

XIII.12. Невырожденность основного состояния

Основной результат этого раздела относится к самосопряженному оператору H, который ограничен снизу и имеет собственное значение в качестве низшей точки своего спектра. Мы покажем, что при определенных условиях собственное пространство, отвечающее этому собственному значению, одномерно и что соответствующий собственный вектор есть строго положительная функция при некоторой специальной реализации рассматриваемого гильбертова пространства L^2. Это собственное значение называется **энергией основного состояния**, а собственный вектор —

основным состоянием. Как часто бывает в спектральном анализе, метод проверки упомянутых условий на практике основан на теории возмущений. На первый взгляд это удивительно, поскольку мы будем интересоваться шредингеровыми операторами, а $H_0 = -\Delta$ не обладает ни одной собственной функцией. Поэтому важно, чтобы все наши результаты выражались посредством заключений вида: «либо H не имеет собственных значений ниже существенного спектра, либо он имеет невырожденную энергию основного состояния, а соответствующий собственный вектор строго положителен». Наконец, отметим, что, как обычно, легче изучать ограниченные операторы e^{-tH} и $(H+1)^{-1}$, чем H. Если E_0 — энергия основного состояния для H, то e^{-tE_0} — *наибольшее* собственное значение оператора e^{-tH}, поэтому мы начинаем с изучения ограниченного оператора A и его наибольшего собственного значения.

Определение. Пусть $\langle M, \mu\rangle$ — пространство с σ-конечной мерой. Функция $f \in L^2(M, d\mu)$ называется **положительной**, если f неотрицательна почти всюду и не является нулевой функцией; f называется **строго положительной**, если $f(x) > 0$ почти всюду. Ограниченный оператор A на L^2 называется **сохраняющим положительность**, если функция Af положительна, когда положительна f. Оператор A называется **усиливающим положительность**, если Af строго положительна при положительной f. Наконец, A называется **эргодическим** тогда и только тогда, когда он сохраняет положительность, и для любых функций u, $v \in L^2$, которые обе положительны, существует некоторое $n > 0$, для которого $(u, A^n v) \neq 0$.

Заметим, что по определению нулевая функция не положительна. Таким образом, если A сохраняет положительность, то Af — ненулевая функция для любой положительной функции f. Более того, можно так переформулировать понятие строгой положительности, что станет ясно, что каждое усиливающее положительность отображение эргодично. А именно: функция $g \in L^2(M, d\mu)$ строго положительна тогда и только тогда, когда $(f, g) > 0$ для всех положительных функций f. Итак, ограниченный оператор A на $L^2(M, d\mu)$ усиливает положительность в том и только в том случае, когда $(u, Av) > 0$ для всех положительных функций u, $v \in L^2(M, d\mu)$.

Пример 1. Пусть $A = (-\Delta+1)^{-1}$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$. Уравнение (IX.30) утверждает, что

$$(f, Ag) = \int \overline{f(x)} g(y) \frac{e^{-|x-y|}}{4\pi|x-y|} d^3x\, d^3y.$$

Поскольку $(4\pi|x-y|)^{-1}e^{-|x-y|}$ строго положительна, то A усиливает положительность. Аналогично явная форма для $e^{t\Delta}$ на

$L^2(\mathbb{R}^n)$ показывает, что этот оператор также усиливает положительность.

Пример 2. Пусть $\langle M, \mu\rangle$ — пространство с вероятностной мерой, т. е. $\mu(M)=1$, и пусть T: $M \to M$ — отображение, сохраняющее меру. Пусть $(Af)(x)=f(Tx)$. Тогда A — унитарный оператор, который, очевидно, сохраняет положительность. Однако он не усиливает ее. Оператор A эргодичен тогда и только тогда, когда эргодичен T в смысле определения из § II.5 (задача 90).

Пример 3 (вторично квантованные операторы в пространстве Фока). В ходе доказательства теоремы X.61 (§ X.9) мы видели, что $\Gamma(e^{-tA})$ сохраняет положительность как оператор на Q-пространстве, если A — положительный самосопряженный оператор на одночастичном пространстве, коммутирующий с заданным комплексным сопряжением. Позже мы выясним, когда этот оператор эргодичен, а когда он усиливает положительность.

Основной абстрактный результат этого раздела — следующая

Теорема XIII.43. Пусть A — ограниченный положительный оператор на $L^2(M, d\mu)$. Предположим, что A сохраняет положительность и что $\|A\|$ — собственное значение. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(a) $\|A\|$ — простое собственное значение, а соответствующий собственный вектор строго положителен;

(b) A эргодичен;

(c) множество операторов $L^\infty(M) \cup \{A\}$ действует неприводимым образом, т. е. ни одно нетривиальное замкнутое подпространство не остается инвариантным относительно действия A и множества всех ограниченных операторов умножения.

Доказательство. Докажем, что (a) $\Rightarrow$ (b) $\Rightarrow$ (c) $\Rightarrow$ (a).

(a) $\Rightarrow$ (b). Пусть $B=A/\|A\|$, и пусть $\{P_\Omega\}$ — спектральные проекторы B. Поскольку $x^n \to 0$, если $0 \leqslant x < 1$ и $x^n \to 1$, если $x=1$, из функционального исчисления вытекает, что

$$\operatorname*{s-lim}_{n\to\infty} B^n = P_{\{1\}}.$$

По предположению $P_{\{1\}}=(\psi, \cdot)\psi$, где ψ строго положительна. Итак, для любых положительных u, v

$$\lim_{n\to\infty} (u, B^n v) = (u, \psi)(\psi, v) > 0.$$

В результате для некоторого n имеем $(u, A^n v) = \|A\|^n (u, B^n v) > 0$.

(b) $\Rightarrow$ (c) Допустим, что (c) не выполняется. Пусть S — нетривиальное подпространство, инвариантное под действием

$L^\infty(M) \cup \{A\}$. Пусть $f \in S$, и пусть $h = \bar{f}/|f| \in L^\infty(M)$. Тогда $|f| = hf \in S$. Аналогично, если $g \in S^\perp$, то $|g| \in S^\perp$. Выберем $f \in S$, $g \in S^\perp$, $f \neq 0 \neq g$. Поскольку A оставляет S инвариантным, то $A^n|f| \in S$, так что $(|g|, A^n|f|) = 0$ для всех n. Но тогда A не эргодичен.

(c) $\Rightarrow$ (a) По предположению $\|A\|$ — собственное значение. Пусть ψ — собственный вектор A с собственным значением $\|A\|$, и предположим, что ψ вещественнозначен. Поскольку $|\psi| \pm \psi \geqslant 0$, то $A(|\psi| \pm \psi) \geqslant 0$, так что $|A\psi| \leqslant A|\psi|$. Итак,

$$(|\psi|, A|\psi|) \geqslant (|\psi|, |A\psi|) \geqslant (\psi, A\psi) = \|A\| \|\psi\|^2.$$

В результате $A|\psi| = \|A\| |\psi|$, так что $|\psi|$ также собственный вектор. Покажем, что $|\psi|$ строго положителен. Пусть $S = \{f \in L^2(M, d\mu) \mid f\psi = 0$ почти всюду$\}$. Очевидно, S — подпространство, инвариантное относительно действия $L^\infty(M)$. Пусть $S_+ = \{g \in S \mid g \geqslant 0\}$. Тогда для $f \in S_+$ имеем $(Af, |\psi|) = (f, A|\psi|) = \|A\|(f, |\psi|) = 0$. Поскольку Af положительна, $(Af)\psi = 0$ почти всюду, т. е. $Af \in S_+$. Итак, A оставляет S_+ инвариантным. Поскольку $S = S_+ - S_+ + i(S_+ - S_+)$, то A оставляет инвариантным и S. Итак, по условию (c), $S = \{0\}$ или $S = \mathscr{H}$. Поскольку $\psi \notin S$ и $\psi \neq 0$, то $S = \{0\}$, откуда следует, что $|\psi| > 0$ почти всюду.

Итак, мы знаем, что каждый вещественный собственный вектор с собственным значением $\|A\|$ почти всюду не равен нулю, а также что $A|\psi| = \|A\| |\psi|$. Таким образом, разность $|\psi| - \psi$ либо есть собственный вектор с собственным значением $\|A\|$, либо тождественно равна нулю. Поэтому она либо почти всюду исчезает, либо почти всюду не исчезает. Это означает, что каждый вещественный собственный вектор с собственным значением $\|A\|$ или почти всюду строго положителен, или почти всюду строго отрицателен. Если бы A обладал двумя вещественными собственными векторами с собственным значением $\|A\|$, то он обладал бы двумя ортогональными почти всюду положительными собственными векторами. Поскольку это невозможно, заключаем, что A имеет только один собственный вектор с собственным значением $\|A\|$ и этот собственный вектор строго положителен.

Пусть, наконец, ψ — произвольный собственный вектор с собственным значением $\|A\|$. Поскольку A переводит положительные функции в положительные, он переводит вещественные функции в вещественные, так что $\mathrm{Re}(A\psi) = A(\mathrm{Re}\,\psi)$. Значит, $\mathrm{Re}\,\psi$ и $\mathrm{Im}\,\psi$ — собственные векторы с собственным значением $\|A\|$. Отсюда следует, что ψ — произведение все того же единственного вещественного собственного вектора на комплексное число. ∎

Чтобы применить этот результат к низшему собственному значению самосопряженного оператора, можно воспользоваться либо резольвентой, либо полугруппой, порожденной этим оператором. Заметим сначала, что справедливо такое

Предложение. Пусть H — самосопряженный оператор, ограниченный снизу. Пусть $E = \inf \sigma(H)$. Оператор e^{-tH} сохраняет положительность при *всех* $t > 0$ тогда и только тогда, когда $(H-\lambda)^{-1}$ сохраняет положительность при *всех* $\lambda < E$.

Доказательство. Предложение следует из формул

$$(H-\lambda)^{-1}\varphi = \int_0^\infty e^{\lambda t} e^{-tH}\varphi\, dt \qquad \lambda < E,$$

$$e^{-tH}\varphi = \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{tH}{n}\right)^{-n}\varphi, \qquad t > 0, \tag{71}$$

знакомых нам из теории полугрупп (§ X.8). В случае самосопряженного оператора их легко доказать посредством функционального исчисления.

Теорема XIII.44. Пусть H — самосопряженный ограниченный снизу оператор в $L^2(M, d\mu)$. Предположим, что e^{-tH} сохраняет положительность при всех $t > 0$ и что $E = \inf \sigma(H)$ — собственное значение. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(a) E — простое собственное значение со строго положительным собственным вектором;

(b) оператор $(H-\lambda)^{-1}$ эргодичен при некотором $\lambda < E$;

(c) оператор e^{-tH} эргодичен при некотором $t > 0$;

(d) $(H-\lambda)^{-1}$ усиливает положительность для всех $\lambda < E$;

(e) e^{-tH} усиливает положительность для всех $t > 0$.

Доказательство. По теореме XIII.43 эквивалентны (a), (b) и (c) и очевидно, что (d) $\Rightarrow$ (b) и (e) $\Rightarrow$ (c). Мы завершим доказательство, показав, что (c) $\Rightarrow$ (d) и (e).

(c) $\Rightarrow$ (d) Пусть u и v — положительные векторы. Поскольку e^{-tH} при некотором t эргодичен, $(u, e^{-sH}v) > 0$ для некоторого $s > 0$. Но функция $(u, e^{-sH}v)$ непрерывна, поэтому она больше нуля при s из некоторого интервала. Итак,

$$(u, (H-\lambda)^{-1}v) = \int_0^\infty e^{\lambda s}(u, e^{-sH}v)\, ds > 0.$$

(c) $\Rightarrow$ (e) Пусть u, v положительны, и пусть $B = \{t > 0 \mid (u, e^{-tH}v) > 0\}$. Поскольку B непусто и функция $(u, e^{-tH}v)$ аналитична в окрестности положительной вещественной оси, то множество $(0, \infty)\setminus B$ может иметь в качестве предельной точки только 0. В частности, B содержит произвольно малые числа. Итак, если можно показать, что из $t>s$ и $s\in B$ следует $t\in B$, то можно заключить, что $B=(0, \infty)$. Фиксируем $s\in B$. Тогда $(u, e^{-sH}v)>0$, так что произведение $u(\cdot)(e^{-sH}v)(\cdot)$ не есть тождественный нуль. Пусть $w=\min\{u, e^{-sH}v\}$. Тогда функция $w(m)$ не равна тождественно нулю. Поскольку $e^{-\tau H}$ сохраняет положительность, то

$$(u, e^{-\tau H}(e^{-sH}v))\geqslant(u, e^{-\tau H}w)=(e^{-\tau H}u, w)\geqslant(e^{-\tau H}w, w)=$$
$$=\|e^{-\tau H/2}w\|^2>0.$$

Мы воспользовались тем, что w положительна и что $e^{-\tau H/2}$ сохраняет положительность, откуда заключили, что $e^{-\tau H/2}w\neq 0$. Итак, из $s\in B$ и $\tau>0$ вытекает $s+\tau\in B$. ∎

Пример 3 (заново). Пусть A — оператор в комплексном гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$, коммутирующий с заданным комплексным сопряжением, а также удовлетворяющий неравенству $A\geqslant cI$ для некоторого $c>0$. Пусть $H=d\Gamma(A)$ — вторичное квантование A в $\mathscr{F}_s(\mathscr{H})$, рассматриваемое как оператор в $L^2(Q, d\mu)$ (см. § X.7). Тогда $H\Omega_0=0$, хотя $A\upharpoonright\{\Omega_0\}^\perp\geqslant cI$. Таким образом, H обладает невырожденным строго положительным основным состоянием. Мы заключаем, что оператор $\Gamma(e^{-tA})=e^{-tH}$ усиливает положительность при всех $t>0$.

В приложениях теоремы XIII.44 очень полезна следующая теорема теории возмущений. Помимо нее в теории возмущений имеется другой результат, основанный на резольвенте, а не на полугруппе, который также весьма полезен (см. задачи 91, 92).

Теорема XIII.45. Пусть H и H_0 — полуограниченные самосопряженные операторы в $L^2(M, d\mu)$, где $\langle M, \mu\rangle$ — пространство с σ-конечной мерой. Предположим, что существует последовательность ограниченных операторов умножения V_n, такая, что последовательность H_0+V_n сходится к H в сильном резольвентном смысле, а $H-V_n$ сходится к H_0 в сильном резольвентном смысле. Предположим далее, что $H-V_n$ и H_0+V_n равномерно ограничены снизу. Тогда

(a) e^{-tH} сохраняет положительность в том и только том случае, когда сохраняет положительность e^{-tH_0};

(b) семейство операторов $\{e^{-tH}\}\cup L^\infty(M, d\mu)$ неприводимо на $L^2(M, d\mu)$ в том и только том случае, когда $\{e^{-tH_0}\}\cup L^\infty(M, d\mu)$ неприводимо на $L^2(M, d\mu)$.

Доказательство. По формуле Троттера для произведения (теорема VIII.31) и по непрерывности, гарантируемой функциональным исчислением (теорема VIII.20),

$$e^{-tH} = \underset{n\to\infty}{\text{s-lim}} \left(\underset{m\to\infty}{\text{s-lim}} \left[e^{-tH_0/m} e^{-tV_n/m}\right]^m \right), \tag{72a}$$

$$e^{-tH_0} = \underset{n\to\infty}{\text{s-lim}} \left(\underset{m\to\infty}{\text{s-lim}} \left[e^{-tH/m} e^{+tV_n/m}\right]^m \right). \tag{72b}$$

Поскольку операторы $e^{\pm tV_n/m}$ сохраняют положительность, мы видим, что (a) выполняется. Более того, из (72) и того, что $e^{\pm tV_n/m} \in L^\infty(M)$, следует инвариантность относительно e^{-tH} любого подпространства, инвариантного относительно действия e^{-tH_0} и $L^\infty(M)$. ▮

Теперь можно применить теорему XIII.44 к шредингеровым операторам и к пространственно обрезанным $P(\varphi)_2$-гамильтонианам.

Теорема XIII.46. Пусть H — гамильтониан N-частичной шредингеровой системы с отделенным движением центра масс. Предположим, что потенциалы V_{ij} лежат в $R+(L^\infty)_\varepsilon$. Тогда, если H имеет собственное значение в качестве нижней грани своего спектра, то оно невырожденно, а соответствующая собственная функция строго положительна.

Доказательство. Согласно теоремам XIII.43 и XIII.44, нужно только доказать, что e^{-tH} сохраняет положительность и что семейство $\{e^{-tH}\} \cup L^\infty(\mathbb{R}^{3N-3})$ действует неприводимым образом. Согласно примеру 1 и доказательству части (b) $\Rightarrow$ (c) теоремы XIII.43, мы знаем, что это так для e^{-tH_0}. Пусть $V_{ij}^{(n)}$ определены посредством

$$V_{ij}^{(n)}(x) = \begin{cases} V_{ij}(x), & \text{если } |V_{ij}(x)| \leqslant n, \\ n, & \text{если } V_{ij}(x) > n, \\ -n, & \text{если } V_{ij}(x) < -n. \end{cases}$$

Легко доказать, что $V_{ij} - V_{ij}^{(n)} \to 0$ по норме Рольника. По теореме VIII.25 (c), $H_0 + \sum V_{ij}^{(n)} \to H$ и $H - \sum V_{ij}^{(n)} \to H_0$ в равномерном резольвентном смысле. Поэтому применима теорема XIII.45, что завершает доказательство. ▮

Следствие. Пусть H удовлетворяет условиям теоремы XIII.46 и $H\psi = E\psi$, где $E = \inf \sigma(H)$. Пусть U — произвольный сохраняющий положительность унитарный оператор, коммутирующий с H. Тогда $U\psi = \psi$.

Доказательство. Поскольку U коммутирует с H, то $H(U\psi) = E(U\psi)$. Но E невырожденно, поэтому $U\psi = \alpha\psi$. Поскольку U унитарно, то $|\alpha| = 1$, а поскольку U сохраняет положительность и ψ положительно, то $\alpha = 1$. ▮

Например, если все V_{ij} сферически симметричны и H имеет собственное значение в качестве нижней грани спектра, то соответствующий собственный вектор остается инвариантным при поворотах и отражениях.

Мы обращаем внимание читателя на то, что в теореме XIII.46 речь идет о низшем собственном значении H как оператора во всем $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$. Если H коммутирует с семейством $\mathcal{P}$ перестановок координат и мы сужаем его на некоторое подпространство из $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$ с определенной симметрией относительно перестановок, то наинизшее собственное значение суженного оператора не обязано быть невырожденным. Действительно, в силу следствия, если только мы не следим за подпространством, *поточечно* инвариантным относительно $\mathcal{P}$, основное состояние суженного оператора есть возбужденное состояние несуженного оператора. Отсюда вытекает утверждение, что *основные состояния бозонных систем невырожденны, в то время как основные состояния фермионных систем могут быть вырожденными.*

Теорема XIII.47. Пусть функция $V \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^m)$ положительна и $\lim_{|x|\to\infty} V(x) = \infty$. Тогда оператор $-\Delta + V$ имеет невырожденное строго положительное основное состояние.

Доказательство. В § 14 мы увидим, что оператор $-\Delta+V$ имеет чисто дискретный спектр, так что нижняя грань его спектра наверняка есть собственное значение. Доказательство оставшихся заключений близко к доказательству теоремы XIII.46 с точностью до одной детали. Пусть $V_n = \min\{V, n\}$. Тогда все операторы $-\Delta+V_n$, $-\Delta+V$, $-\Delta$ и $-\Delta+(V-V_n)$ в существенном самосопряжены на $C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ по теореме X.28. Более того, для любого $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ имеем $V_n\psi \to V\psi$ в L^2. Таким образом, по теореме XIII.25(a) мы имеем сильную резольвентную сходимость. ∎

Если включить в рассмотрение очень сингулярные потенциалы V, то оператор $-\Delta+V$, определенный как сумма квадратичных форм, может обладать вырожденным основным состоянием (см. пример 2 из § 13 и задачу 95). (Ссылки по поводу следующего результата даны в Замечаниях.)

Теорема XIII.48. Пусть G — замкнутое подмножество нулевой меры в $\mathbb{R}^n$, и пусть $V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n \setminus G)$, $V \geqslant 0$. Пусть оператор $H = -\Delta + V$ определен как сумма квадратичных форм. Тогда:

(a) если $\mathbb{R}^n \setminus G$ связно и $\inf \sigma(H)$ — собственное значение, то это простое собственное значение и соответствующая собственная функция строго положительна;

(b) если $\mathbb{R}^n \setminus G$ несвязно, то V можно выбрать так, что H имеет вырожденное основное состояние.

И наконец, мы обращаемся к проблеме существования и единственности основных состояний в рамках теории гиперсжимающих полугрупп (см. § X.9).

Теорема XIII.49. Пусть H_0 порождает усиливающую положительность гиперсжимающую полугруппу на вероятностном пространстве с мерой $\langle M, \mu\rangle$. Предположим, что V есть (не обязательно ограниченный) оператор умножения, причем V и e^{-V} лежат в $\bigcap\limits_{p<\infty} L^p(M, d\mu)$. Пусть $H = H_0 + V$. Тогда:

(a) $E = \inf \sigma(H)$ — собственное значение;

(b) E невырожденно;

(c) собственная функция основного состояния строго положительна.

В частности, свойства (a)—(c) выполняются для пространственно обрезанных $P(\varphi)_2$-гамильтонианов.

Доказательство. Докажем сначала (b) и (c), предполагая, что выполнено (a), а затем докажем (a). Пусть V_n определено посредством

$$V_n(q) = \begin{cases} V(q), & \text{если} \quad |V(q)| \leqslant n, \\ n, & \text{если} \quad V(q) > n, \\ -n, & \text{если} \quad V(q) < -n. \end{cases}$$

Поскольку $V_n \to V$ в каждом L^p $(p < \infty)$ и $\sup\limits_n \{\|e^{-V_n}\|_p, \|e^{-(V-V_n)}\|_p\} < \infty$, то по теореме X.60 $H_0 + V_n \to H_0 + V$ и $H_0 + V - V_n \to H_0$ в равномерном резольвентном смысле. Поскольку e^{-tH_0} — усиливающая положительность полугруппа, то применима теорема XIII.45, а потому (b) и (c) выполняются, если справедливо (a).

Для доказательства (a) будем действовать следующим образом. Пусть t выбрано так, что $A = \exp(-tH)$ — ограниченный оператор из L^2 в L^4. Нужно только доказать, что $\|A\|$ — собственное значение A. **Конечное разбиение** пространства M есть семейство $\{S_1, \ldots, S_n\} = \alpha$ попарно непересекающихся измеримых подмножеств в M, объединение которых есть M. Если α и β — разбиения, то будем писать $\beta > \alpha$, если каждое множество из β есть подмножество некоторого множества из α. Для каждого разбиения α определим проектор

$$P_\alpha = \sum_{S \in \alpha} \mu(S)^{-1} (\chi_S, \cdot) \chi_S$$

и положим $A_\alpha = P_\alpha A P_\alpha$. Докажем сначала следующие свойства набора $\{P_\alpha\}$:

(i) $\operatorname{s-lim}_{\alpha} P_\alpha = 1$;

(ii) P_α сохраняет положительность;

(iii) P_α есть сжатие на каждом $L^p(M, d\mu)$.

Для доказательства (i) заметим, что $P_\alpha\psi = \psi$ для любой простой функции ψ при достаточно большом α. Поскольку множество простых функций плотно, отсюда следует (i). Свойство (ii) очевидно, а (iii) следует из (ii), равенства $P_\alpha 1 = 1$ и теоремы X.55а. Итак, $\{A_\alpha\}$ удовлетворяет условиям

(iv) $\operatorname{s-lim}_{\alpha} A_\alpha = A$;

(v) $\|A\| = \lim_{\alpha} \|A\|_\alpha$;

(vi) существует такое K, что $\|A_\alpha\psi\|_4 \leqslant K\|A_\alpha\|\|\psi\|_2$ для всех $\psi \in L^2$ и всех α.

Свойство (iv) следует из (i); (vi) следует из (iii) и того факта, что $\|A\psi\|_4 \leqslant \tilde{K}\|\psi\|_2$ для некоторого $\tilde{K}$, а также неравенства $\|A_\alpha\| \geqslant (A1, 1)$. Для доказательства (v) заметим сначала, что $\|A_\alpha\| \leqslant \|A\|$, поскольку $\|P_\alpha\| = 1$. С другой стороны, в силу (iv), $\|A\| \leqslant \underline{\lim}\|A_\alpha\|$. Итак, $\lim\|A_\alpha\|$ существует и равен $\|A\|$.

Фиксируем разбиение $\alpha = \{S_1, \ldots, S_n\}$. Тогда $\operatorname{Ran} P_\alpha$ естественно изоморфен $\mathbb{C}^n$ посредством отображения $\sum c_i\chi_{S_i} \mapsto (c_1, \ldots, c_n)$. Представим $\mathbb{C}^n$ как $L^2(\{1, \ldots, n\}, d\nu)$, где $\nu(i) = \mu(S_i)$. Тогда A_α сохраняет положительность на $\mathbb{C}^n$. Поскольку A_α — положительно определенная конечномерная матрица, то $\|A_\alpha\|$ — собственное значение, так что можно найти такое $\varphi_\alpha \in \operatorname{Ran} P_\alpha$, что $A_\alpha\varphi_\alpha = \|A_\alpha\|\varphi_\alpha$. По построению в доказательстве теоремы XIII.43 $\psi_\alpha = |\varphi_\alpha|$ — собственный вектор. Нормируем ψ^αтак, чтобы $\|\psi_\alpha\|_2 = 1$. Тогда, с одной стороны, $\|\psi_\alpha\|_4 \leqslant K$, а с другой, $1 = \|\psi_\alpha\|_2 \leqslant \leqslant \|\psi_\alpha\|_1^{1/3}\|\psi_\alpha\|_4^{2/3}$ по неравенству Гёльдера. Итак, $\|\psi_\alpha\|_1 \geqslant K^{-2}$. Пусть ψ — слабая предельная точка направленности $\{\psi_\alpha\}$, и пусть $\{\psi_\beta\}$ — поднаправленность, сходящаяся к ψ. Тогда для любого $\varphi \in L^2$

$$(\varphi, A\psi) = (A\varphi, \psi) = \lim_{\beta} (A\varphi, \psi_\beta) = \lim_{\beta} \|A_\beta\|(\varphi, \psi_\beta) = \|A\|(\varphi, \psi),$$

так что $A\psi = \|A\|\psi$. Более того, поскольку $\psi_\beta \geqslant 0$, то $\|\psi_\alpha\|_1 = (1, \psi_\alpha) \geqslant K^{-2}$. Итак, $(1, \psi) \geqslant K^{-2}$. В частности, $\psi \neq 0$. Таким образом, $\|A\|$ — собственное значение. ∎

Дополнение 1 к § XIII.12. Критерии Бёрлинга — Дени

Существует один особенно простой критерий того, что положительный самосопряженный оператор H в $L^2(M, d\mu)$ порождает сохраняющую положительность полугруппу.

Теорема XIII.50 (первый критерий Бёрлинга—Дени). Пусть $H \geqslant 0$ — самосопряженный оператор в $L^2(M, d\mu)$. Продолжим матричный элемент $(\psi, H\psi)$ на все L^2, полагая его равным бесконечности, когда $\psi \notin Q(H)$. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(a) e^{-tH} сохраняет положительность при всех $t > 0$;

(b) $(|u|, H|u|) \leqslant (u, Hu)$ для всех $u \in L^2$;

(c) e^{-tH} сохраняет вещественность и $(u_+, Hu_+) \leqslant (u, Hu)$ для всех вещественнозначных $u \in L^2$ (здесь $u_+(x) \equiv \max\{u(x), 0\}$);

(d) e^{-tH} сохраняет вещественность и $(u_+, Hu_+) + (u_- Hu_-) \leqslant \leqslant (u, Hu)$ для всех вещественнозначных $u \in L^2$ (здесь $u_- = u_+ - u$).

Доказательство. Мы докажем, что (a)$\Rightarrow$(b)$\Rightarrow$(a). Доказательства остальных импликаций аналогичны и оставлены читателю (задача 96).

(a)$\Rightarrow$(b) При нашем способе продолжения $(\cdot, H\cdot)$ на L^2

$$(u, Hu) = \lim_{t \to 0} t^{-1}[(u, (1 - e^{-tH})u)]. \tag{73}$$

По предположению (a), $|e^{-tH}u| \leqslant e^{-tH}|u|$, так что

$$(u, e^{-tH}u) = \|e^{-tH/2}u\|^2 \leqslant \|e^{-tH/2}|u|\|^2 = (|u|, e^{-tH}|u|).$$

Отсюда, поскольку $(u, u) = (|u|, |u|)$, имеем

$$(u, (e^{-tH} - 1)u) \leqslant (|u|, (e^{-tH} - 1)|u|),$$

так что (b) следует из (73).

(b)$\Rightarrow$(a) Предположим, что u — положительная функция и $a > 0$. Пусть $w = (H + a)^{-1}u$; определим $Q(\varphi) = (\varphi, H\varphi) + a(\varphi, \varphi)$ на всем L^2. Заметим сначала, что для $\varphi \in D(H)$ и любого ψ

$$Q(\varphi + \psi) = Q(\varphi) + Q(\psi) + 2\operatorname{Re}((H + a)\varphi, \psi).$$

Итак, если $\operatorname{Re} v \geqslant 0$, то

$$Q(w + v) = Q(w) + Q(v) + 2\operatorname{Re}(u, v) \geqslant Q(w) + Q(v).$$

Другими словами, если $\varphi \equiv w + v$ удовлетворяет неравенству $\operatorname{Re}\varphi \geqslant \operatorname{Re} w$, то $Q(\varphi) \geqslant Q(w)$, причем равенство имеет место только при $\varphi = w$. По предположению (b), $Q(|w|) \leqslant Q(w)$. Поскольку $\operatorname{Re}|w| \geqslant \operatorname{Re} w$, мы видим, что $|w| = w$, т. е. $w \geqslant 0$. Таким образом, мы убедились, что $(H + a)^{-1}$ сохраняют положительность для любого $a > 0$. Поэтому, согласно предложению, предшествующему теореме XIII.44, наша полугруппа сохраняет положительность. ∎

Пример 1. Из критерия (d) следует, что конечномерная положительно определенная матрица порождает сохраняющую положительность полугруппу тогда и только тогда, когда все ее внедиагональные элементы отрицательны. Это довольно легко доказать непосредственно в более общей форме (задача 97).

Пример 2. Можно обнаружить непосредственно, без обращения к формуле Троттера для произведения, что если V — положительный оператор умножения и H_0 порождает сохраняющую положительность полугруппу, то тем же свойством обладает и оператор H_0+V, определенный как сумма форм. Действительно, когда $Q(H)=Q(H_0)$, критерий (b) справедлив для H_0 в том и только том случае, когда он выполняется для H.

Пример 3. Легко видеть (задача 99), что лапласианы Дирихле и Неймана, определенные в § 15, удовлетворяют критерию (b) и, таким образом, порождают сохраняющие положительность полугруппы; иными словами, интегральные ядра их резольвент («функции Грина») — положительные функции.

Существует и несколько более тонкий критерий того, что e^{-tH} — сжатие на всех пространствах L^p, в случае, если оно сохраняет положительность.

Теорема XIII.51 (второй критерий Бёрлинга — Дени). Пусть $H\geqslant 0$ — самосопряженный оператор, порождающий сохраняющую положительность полугруппу на $L^2(M, d\mu)$. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(a) e^{-tH} — сжатие на каждом $L^p(M, d\mu)$ для всех p и всех $t\geqslant 0$;
(b) e^{-tH} — сжатие на $L^\infty(M, d\mu)$ для всех $t>0$;
(c) пусть $(f\wedge 1)(x)\equiv\min\{f(x), 1\}$; для каждого $f\geqslant 0$ имеем $((f\wedge 1), H(f\wedge 1))\leqslant(f, Hf)$;
(d) пусть F — произвольная функция из $\mathbb{C}$ в $\mathbb{C}$, удовлетворяющая условиям $|F(x)|\leqslant|x|$ и $|F(x)-F(y)|\leqslant|x-y|$. Тогда $(F(f), HF(f))\leqslant(f, Hf)$ для всех $f\in L^2$.

Доказательство. Покажем, что (c) $\Rightarrow$ (b) и (a) $\Rightarrow$ (d). Импликация (b) $\Rightarrow$ (a) вытекает из простой модификации интерполяционного построения в доказательстве теоремы X.55 (a), а (d) $\Rightarrow$ (c) получается, если заметить, что $F(z)=\min\{\operatorname{Re} z, 1\}$ удовлетворяет условиям пункта (d).

(c) $\Rightarrow$ (b) Фиксируем такое $u\in L^2$, что $0\leqslant u\leqslant 1$. Определим

$$\psi(v)=(v, Hv)+\|u-v\|^2=(v, (H+1)v)+\|u\|^2-2\operatorname{Re}(u, v).$$

Пусть $R=(H+1)^{-1}$. Тогда $\psi(Ru)=\|u\|^2-(u, Ru)$ и

$$((Ru-v), (H+1)(Ru-v))=(u, Ru)+(v, (H+1)v)-2\operatorname{Re}(u, v),$$

так что

$$\psi(v)=\psi(Ru)+((Ru-v), (H+1)(Ru-v)).$$

Это означает, что $\psi(v)$ принимает свое минимальное значение тогда и только тогда, когда $v=Ru$. Теперь, поскольку $u\leqslant 1$,

$$|(u-(v\wedge 1))(x)|\leqslant|(u-v)(x)|,$$

и по предположению $(v\wedge 1,\ H(v\wedge 1))\leqslant(v,\ Hv)$, если $v\geqslant 0$. Итак,

$$\psi(Ru\wedge 1)\leqslant\psi(Ru).$$

Поскольку Ru минимизирует ψ, получаем, что $Ru\wedge 1=Ru$, т. е. $Ru\leqslant 1$. Итак, R — сжатие на L^∞. Аналогично, $(1+\varepsilon H)^{-1}$ — сжатие на L^∞ для всех ε, так что $e^{-tH}=\lim\limits_{n\to\infty}(1+tH/n)^{-n}$ — сжатие на L^∞.

(a)$\Rightarrow$(d) В силу (73), достаточно показать, что

$$(F(f),\ (1-e^{-tH})F(f))\leqslant(f,\ (1-e^{-tH})f)$$

для всех $t>0$. Пусть K — конечномерное подпространство в $L^2(M,\ d\mu)$ функций вида $\sum\limits_{i=1}^n\alpha_i\chi_{A_i}$, где $\{A_i\}_{i=1}^n$ — непересекающиеся множества конечной меры. При упорядочении $K'>K$, если $K\subset K'$, множество таких K становится направленным. Если $P(K)$ — проекция на K, то $\text{s-}\lim\limits_K P(K)=1$, поэтому достаточно показать, что

$$(F(P(K)f),\ (1-e^{-tH})F(P(K)f))\leqslant(P(K)f,\ (1-e^{-tH})P(K)f)$$

для каждого K. Пусть $b_{ij}=(\chi_{A_i},(1-e^{-tH})\chi_{A_j})$. Тогда нужно только доказать, что

$$\sum_{i,j}\overline{F(\alpha_i)}\,F(\alpha_j)\,b_{ij}\leqslant\sum_{i,j}\bar\alpha_i\alpha_j b_{ij}. \tag{74}$$

Пусть $\lambda_i=(\chi_{A_i},\ \chi_{A_i})$ и $a_{ij}=(\chi_{A_i},\ e^{-tH}\chi_{A_j})$. Тогда $a_{ij}\geqslant 0$ и, поскольку $\|e^{-tH}\chi_{A_j}\|_1\leqslant\lambda_j$, имеем

$$\sum_i a_{ij}\leqslant\lambda_j.$$

Пусть $m_j=\lambda_j-\sum\limits_i a_{ij}\geqslant 0$. Тогда $b_{ij}=\lambda_i\delta_{ij}-a_{ij}$, так что

$$\sum_{i,j}\bar z_i z_j b_{ij}=\sum_{i<j}a_{ij}|z_i-z_j|^2+\sum_j m_j|z_j|^2.$$

Из этих равенств следует (74). ∎

Пример 3 (заново). Применяя критерий (c), легко видеть, что лапласианы Неймана и Дирихле порождают сжимающие полугруппы на L^p (задача 99).

Дополнение 2 к § XIII.12. Формула Леви — Хинчина

Для применения теорем из § 12 необходимы методы доказательства того, что полугруппы сохраняют положительность. Если генераторы имеют вид $-\Delta+V(x)$, то, как мы видели, порождаемые ими полугруппы сохраняют положительность: явное представление оператора $e^{t\Delta}$ на $L^2(\mathbb{R}^n)$ показывает, что он обладает этим свойством, а формула Троттера для произведения позволяет вывести отсюда, что и $e^{t(\Delta-V)}$ также сохраняет положительность. Естественно задать вопрос: для каких еще функций $F(\cdot)$ оператор $F(-i\nabla)+V(x)$ порождает полугруппу, сохраняющую положительность? Конечно, если

$$F(-i\nabla)=-\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}+c,$$

где $\{a_{ij}\}$ — строго положительно определенная матрица, то ответ утвердительный, поскольку заменой переменных $F(-i\nabla)$ можно свести к $-\Delta+c$. Однако a priori не ясно, какие другие функции допустимы.

Пусть F — непрерывная комплекснозначная функция на $\mathbb{R}^n$, вещественная часть которой ограничена снизу. Как в § IX.7, введем

$$F(-i\nabla)\varphi=(F(p)\hat{\varphi})^{\vee}.$$

В силу полуограниченности вещественной части F, оператор $F(-i\nabla)$ порождает сильно непрерывную полугруппу на $L^2(\mathbb{R}^n)$. Для не слишком «скверных» функций V теорема X.50 показывает, что $F(-i\nabla)+V(x)$ также порождает сильно непрерывную полугруппу, а формула Троттера (теорема X.51) сводит вопрос о том, сохраняет ли положительность $\exp(-t(F(-i\nabla)+V(x)))$, к тому же вопросу, но для $\exp(-t(F(-i\nabla)))$. Назначение этого дополнения — охарактеризовать различными способами множество функций, для которых это справедливо.

Сначала положим $G(x)=e^{-tF(x)}$, и пусть f и g — положительные функции из $\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$. Тогда

$$(f,\ G(-i\nabla)g)=(G(p)\hat{g})^{\vee}\,(\bar{f})=(2\pi)^{-n/2}(\check{G}*g)(\bar{f})=$$
$$=(2\pi)^{-n/2}(\check{G}*(g*\bar{\bar{f}}))(0).$$

Итак, если $\check{G}$ — полиномиально ограниченная положительная мера, то $(f,\ G(-i\nabla)g)\geqslant 0$ для таких f и g. Таким образом, по теореме Бохнера — Шварца (теорема IX.10), если функция G положительно определена, то оператор $G(-i\nabla)$ сохраняет положительность. Обратно, если $G(-i\nabla)$ сохраняет положительность и мы положим $g_y(x) = f(x+y)$, то

$$(2\pi)^{-n/2}(\check{G} * f * \bar{\bar{f}})(y) = (2\pi)^{-n/2}(\check{G} * g_y * \bar{\bar{f}})(0) = (f, G(-i\nabla) g_y) \geqslant 0.$$

Поскольку $\check{G}$ умеренного роста, левая часть — полиномиально ограниченная функция (теорема IX.4 (a)). Итак, по теореме Бохнера $\mathcal{F}(\check{G} * f * \bar{\bar{f}}) = (2\pi)^n |\hat{f}|^2 G$ — положительно определенная функция. Если теперь заменить $f(x)$ аппроксимативной единицей $j_\varepsilon(x)$, то $|\hat{j}_\varepsilon|^2 G \to G$ при $\varepsilon \downarrow 0$ равномерно на компактных множествах, так что функция G положительно определена.

Это доказывает характеристику, содержащуюся в первом из эквивалентных утверждений следующей теоремы. Второе утверждение дает характеристику в терминах самой F.

Теорема XIII.52. Пусть $F(x)$ — комплекснозначная функция на $\mathbb{R}^n$, вещественная часть которой ограничена снизу. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(a) $e^{-tF(-i\nabla)}$ — сохраняющая положительность полугруппа;

(b) $e^{-tF(x)}$ для каждого $t > 0$ — положительно определенная обобщенная функция в смысле Бохнера;

(c) $\overline{F(x)} = F(-x)$ и

$$\sum_{i,j=1}^{m} F(x_i - x_j)\bar{z}_i z_j \leqslant 0 \tag{75}$$

для всех $x_1, \ldots, x_m \in \mathbb{R}^n$ и $z \in \mathbb{C}^m$, удовлетворяющих условию $\sum_{i=1}^{m} z_i = 0$.

Доказательство. Уже доказано, что (a) и (b) эквивалентны. Чтобы доказать эквивалентность (b) и (c), достаточно показать, что если $A = \{a_{ij}\}$ есть $m \times m$-матрица, а $M(t)$ — матрица с элементами $M(t)_{ij} = e^{ta_{ij}}$, то $M(t)$ положительно определена при всех $t \geqslant 0$ тогда и только тогда, когда A **условно положительно определена**, т. е. $(A\zeta, \zeta) \geqslant 0$ для всех $\zeta \in \mathbb{C}^m$, удовлетворяющих $\sum_{i=1}^{m} \zeta_i = 0$. Таким образом, предположим, что $M(t)$ положительно определена при $t \geqslant 0$, и пусть $\sum_{i=1}^{m} \zeta_i = 0$. Тогда $(\zeta, M(t)\zeta) = 0$ при $t = 0$ и $(\zeta, M(t)\zeta) \geqslant 0$ при $t \geqslant 0$. Следовательно,

$$(\zeta, A\zeta) = \frac{d}{dt}(\zeta, M(t)\zeta)\Big|_{t=0} \geqslant 0,$$

так что A условно положительно определена.

Обратно, предположим, что A условно положительно определена. Пусть e — вектор, все компоненты которого равны $1/\sqrt{m}$, и пусть P — проектор на ортогональное дополнение к e. Предположение относительно A означает, что произведение PAP положительно определено. Итак, если определить $\tilde{a}_{ij} = (PAP)_{ij}$ и написать

$$A = PAP + (1-P)A(1-P) + PA(1-P) + (1-P)AP,$$

то легко проверить, что

$$a_{ij} = \tilde{a}_{ij} + \bar{b}_i + b_j$$

для некоторого вектора b. Следовательно, $M(t)_{ij} = \tilde{M}(t)_{ij} C(t)_{ij}$, где $\tilde{M}(t)_{ij} = e^{t\tilde{a}_{ij}}$, а $C(t)_{ij} = e^{t\bar{b}_i} e^{tb_j}$. Пользуясь теперь приведенной ниже леммой, по индукции получаем, что $\{e^{D_{ij}}\}$ положительно определена, если положительно определена $\{D_{ij}\}$. Применяя этот результат, видим, что матрица $\tilde{M}(t)_{ij}$ положительно определена. Очевидно, и $C(t)_{ij}$ обладает этим свойством, так что, снова пользуясь леммой, заключаем, что матрица $\{M(t)_{ij}\}$ положительно определена. ∎

Доказательство теоремы завершается следующей леммой.

Лемма. Пусть $\{D_{ij}\}$ и $\{F_{ij}\}$ — положительно определенные матрицы. Тогда матрица $\{D_{ij}F_{ij}\}$ положительно определена.

Доказательство. Пусть $\{\mu_k, d_k\}$ и $\{\lambda_l, f_l\}$ — собственные значения и отвечающие им собственные функции матриц $\{D_{ij}\}$ и $\{F_{ij}\}$ соответственно. Если $\{e_i\}$ — стандартный базис в $\mathbb{C}^n$, то

$$D_{ij}F_{ij} = \sum_{l,\, k=1}^{n} \mu_k \lambda_l (e_i, d_k)(e_i, f_l)(d_k, e_j)(f_l, e_j).$$

Фиксируем теперь k и l, и пусть $s_i = (e_i, d_k)(e_i, f_l)$. Тогда матрица $\{s_i \bar{s}_j\}$ положительно определена. Поэтому $\{D_{ij}F_{ij}\}$, будучи суммой (с положительными коэффициентами) положительно определенных матриц, положительно определена. ∎

Функции, удовлетворяющие (75), называются **условно отрицательно определенными**. Хотя мы уже охарактеризовали эти интересующие нас функции, очень важно иметь другие характеристики, поскольку, во-первых, неравенство (75) нелегко проверить, а во-вторых, из (75) трудно выделить другие необходимые условия. Две дальнейшие характеристики дает следующая

Теорема XIII.53. Пусть $F(x)$ — комплекснозначная функция на $\mathbb{R}^n$, вещественная часть которой ограничена снизу. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(a) $e^{-tF(-i\nabla)}$ — сохраняющая положительность полугруппа;

(b) для каждого $a \in \mathbb{C}^n$ выражение $-D^*DF$, где $D = \sum_{i=1}^{n} a_i \partial_i$, а $D^* = -\sum_{i=1}^{n} \bar{a}_i \partial_i$, есть положительно определенная обобщенная функция;

(c) (формула Леви — Хинчина) существуют положительная конечная мера ν на $\mathbb{R}^n$ с $\nu(\{0\}) = 0$, положительно определенная матрица $A = \{a_{ij}\}$, вещественный вектор β и вещественное число α, такие, что

$$F(\mathbf{x}) = \alpha + i\beta \cdot \mathbf{x} + \mathbf{x} \cdot A\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^n} \left[e^{-\mathbf{x}\cdot\mathbf{y}} - 1 - \frac{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{y}}{1+y^2} \right] \frac{1+y^2}{y^2}\, d\nu(\mathbf{y}). \quad (76)$$

Доказательство. Покажем сначала, что (75) эквивалентно (b) и (c). Итак, пусть справедливо (75). Тогда простое рассуждение, основанное на аппроксимации, показывает, что

$$F(f * f) = \int F(x-y) f(x) \overline{f(y)}\, dx\, dy \leqslant 0$$

для любой функции $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, удовлетворяющей условию $\int f(x)\, dx = 0$. Если $D = \sum a_i \partial_i$, то $\int Df(x)\, dx = 0$ для всех $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, так что

$$0 \leqslant -F(\widetilde{\overline{Df}} * Df) = -F(D^*D(\tilde{\bar{f}} * f)) = -D^*DF(\tilde{\bar{f}} * f).$$

Следовательно, $-D^*DF$ — положительно определенная обобщенная функция.

Покажем теперь, что из (b) вытекает (c). Хотя идея здесь проста, но это самая длинная часть доказательства. Во-первых, возникают некоторые усложнения, связанные с многомерностью рассматриваемого случая, и, во-вторых, имеются технические усложнения, обусловленные тем фактом, что a priori F — лишь обобщенная функция. Поскольку мы хотим рассматривать фурье-образ F, введем пространство $\mathscr{Z}$ фурье-образов функций из C_0^∞ с топологией, при которой $g_\alpha \to g$ в $\mathscr{Z}$ тогда и только тогда, когда $\check{g}_\alpha \to \check{g}$ в C_0^∞. Благодаря теореме Пэли — Винера (теорема IX.11) пространство $\mathscr{Z}$ имеет описание во внутренних терминах, однако здесь нас это не интересует. Пусть G — фурье-образ F — определяется как линейный функционал на $\mathscr{Z}$, заданный равенством

$$(G, g) = (F, \hat{g}).$$

Выберем такую функцию $\alpha \in \mathscr{Z}$, что $\alpha(x) = 1 + O(x^3)$ при $x = 0$. Чтобы убедиться в существовании такой α, выберем любое $\beta \in \mathscr{Z}$

с условием $\beta(0)=1$. Тогда

$$\beta(x)=1+\sum_i b_i x_i+\sum_{i,j} a_{ij}x_i x_j+O(x^3).$$

Пусть $p(x)$ — полином $p(x)=1+\sum_i c_i x_i+\sum_{i,j} d_{ij}x_i x_j$, где $c_i=-b_i$, $d_{ij}=-a_{ij}+b_i b_j$. Тогда $\alpha(x)=p(x)\beta(x)$ лежит в $\mathscr{Z}$, поскольку C_0^∞ замкнуто относительно дифференцирований и $\alpha(x)=1+O(x^3)$.

Наша цель — доказать, что существует положительная мера σ умеренного роста и вещественные числа a_0, b_i $(i=1, \ldots, n)$, c_{ij} $(i, j=1, \ldots, n)$, такие, что

$$(2\pi)^{n/2}F(x)=-\int\limits_{|\lambda|>0}[e^{i\lambda x}-\alpha(\lambda)(1+i\lambda\cdot x)]\,d\sigma(\lambda)+$$
$$+a_0+i\sum_{j=1}^{n} b_j x_j+\sum_{i,j=1}^{n} c_{ij}x_i x_j \tag{77}$$

с положительно определенной матрицей $\{c_{ij}\}$ и $\int\limits_{0<|\lambda|<1}|\lambda|^2 d\sigma+$ $+\int\limits_{|\lambda|\geqslant 1} d\sigma<\infty$. Приведение формулы (77) к виду (76) мы предоставим читателю (задача 100).

Считая G фурье-образом F, находим, что (77) эквивалентно равенству

$$(G, \varphi)=-\int\limits_{|\lambda|>0}[\varphi(\lambda)-\alpha(\lambda)(\varphi(0)+\lambda\cdot\nabla\varphi(0))]\,d\sigma(\lambda)+$$
$$+a_0\varphi(0)+\sum_{j=1}^{n} b_j(\partial_j\varphi)(0)-\sum_{i,j=1}^{n} c_{ij}(\partial_i\partial_j\varphi)(0) \tag{78}$$

для всех $\varphi\in\mathscr{Z}$. Пусть мы можем доказать, что

$$(G, \varphi)=-\int\limits_{|\lambda|\geqslant 0}\varphi(\lambda)\,d\sigma(\lambda)-\sum_{i,j=1}^{n} c_{ij}(\partial_i\partial_j\varphi)(0) \tag{79}$$

для всех φ, обращающихся в нуль в точке $\lambda=0$ вместе с производной. Тогда (78) получается применением формулы (79) к $\varphi(\lambda)-\alpha(\lambda)[\varphi(0)+\lambda\cdot\nabla\varphi(0)]$. Далее, заметим, что правая часть (79) определяет непрерывный функционал на $\{\varphi\in\mathscr{Z}\,|\,\varphi(0)=0=$ $=\partial_j\varphi(0),\ j=1, \ldots, n\}$, если только

$$\int\limits_{0<|\lambda|\leqslant 1}|\lambda|^2\,d\sigma+\int\limits_{|\lambda|\geqslant 1}d\sigma<\infty$$

(задача 101), и что суммы функций вида $\lambda_i\lambda_j\psi$, где $\psi\in\mathscr{Z}$, совпадают с суммами функций $\varphi\in\mathscr{Z}$, удовлетворяющих условию $\varphi(0)=0=\partial_j\varphi(0)$ (задача 102).

Итак, для доказательства формулы (76) достаточно убедиться, что существуют мера $d\sigma$, удовлетворяющая указанной оценке, и положительно определенная матрица c_{ij}, такая, что (79) справедливо для всех φ вида $\lambda_i\lambda_j\psi$, где $\psi \in \mathscr{Z}$. Прежде всего мы утверждаем, что существует знаконеопределенная мера $d\nu_{ij}$ на $\mathbb{R}^n$, такая, что

$$(G,\ \lambda_i\lambda_j\psi) = -\int \psi(\lambda)\, d\nu_{ij}(\lambda) \tag{80}$$

для всех $\psi \in \mathscr{Z}$. Действительно, $-(\lambda_i \pm \lambda_j)^2 G$ определяет положительную меру умеренного роста по предположению (b) и теореме Бохнера, и

$$\lambda_i\lambda_j = {}^1/_4\,[(\lambda_i + \lambda_j)^2 - (\lambda_i - \lambda_j)^2].$$

Поскольку

$$(G,\ \lambda_i\lambda_j\,(\lambda_k\lambda_l\eta)) = (G,\ \lambda_k\lambda_l\,(\lambda_i\lambda_j\eta)),$$

мы видим, что меры $d\nu_{ij}$ удовлетворяют условию

$$\lambda_k\lambda_l\, d\nu_{ij} = \lambda_i\lambda_j\, d\nu_{kl}. \tag{81}$$

Поэтому можно определить меру $d\sigma$ на $\mathbb{R}^n\diagdown\{0\}$, имеющую умеренный рост на ∞ и такую, что $\int\limits_{0<|\lambda|<1} |\lambda|^2\, d|\sigma| < \infty$, действуя следующим образом. Пусть $\Omega_{ij} = \{\lambda \mid \lambda_i\lambda_j \neq 0\}$. На Ω_{ij} положим $d\mu = (\lambda_i\lambda_j)^{-1}\, d\nu_{ij}$. В силу (81) эта мера корректно определена на $\bigcup \Omega_{ij} = \mathbb{R}^n\diagdown\{0\}$. В частности, согласно (81), $\mu\,\{\lambda \mid \lambda_i\lambda_j = 0,\ \lambda \neq 0\} = 0$, так что, в силу (80),

$$(G,\ \lambda_i\lambda_j\psi) = -\int\limits_{|\lambda|>0} (\lambda_i\lambda_j\psi(\lambda))\, d\mu - \nu_{ij}(\{0\})\,\psi(0).$$

Полагая теперь $\varphi = \lambda_i\lambda_j\psi$, получаем $\psi(0) = (\partial_i\partial_j\varphi)(0)$ и, более того, $(\partial_k\partial_l\varphi)(0) = 0$ во всех случаях, кроме $\{k,\ l\} = \{i,\ j\}$. Итак, (79) доказано с $c_{ij} = \nu_{ij}(\{0\})$.

Остается только доказать, что $d\sigma$ положительна, причем $\int\limits_{|\lambda|>1} d\sigma < \infty$, а $\{c_{ij}\}$ положительно определена. Чтобы убедиться в положительности σ, заметим, что по предположению $\lambda_i^2\, d\sigma$ положительна при любом i, а потому положительна и $\lambda^2\, d\sigma$. Более того, $\sum \bar{\zeta}_i\zeta_j c_{ij} = \nu_\zeta(\{0\}) \geqslant 0$ для любого $\zeta \in \mathbb{C}^n$, где ν_ζ — фурье-образ $-D_\zeta^* D_\zeta F$, а $D_\zeta = \sum\limits_{i=1}^{n} \zeta_i\partial_i$. Наконец, $\int\limits_{|\lambda|>1} d\sigma < \infty$ в силу рассуждения (задача 103), основанного на формальном соотношении $F(0) = -\int\limits_{|\lambda|>0} (1 - \alpha(\lambda))\, d\sigma + a_0$. Итак, доказано, что из (b) следует (c).

Остается показать, что из формулы Леви — Хинчина вытекает формула (75). Прежде всего заметим, что

$$\left|e^{ixy}-1-\frac{ixy}{1+y^2}\right|\leqslant C\left[\frac{y^2}{1+y^2}\right](1+x^2). \tag{82}$$

Действительно, когда $|y|\geqslant 1$, левая часть ограничена функцией $2+{}^1/_2x$, а когда $|y|\leqslant 1$, функцией $C|xy|^2+|xy|\ (y^2/(1+y^2))$. В силу (82), любая F вида (76) есть обобщенная функция умеренного роста, удовлетворяющая оценке

$$|F(x)|\leqslant C(1+|x|^2), \tag{83}$$

а непосредственное вычисление показывает, что каждая обобщенная функция $-(D^*D)F$ положительно определена. Поскольку F умеренного роста, она имеет фурье-образ $\hat{F}$. Более того, как и при доказательстве импликации (b) $\Rightarrow$ (c), фурье-образ $\partial_i\partial_jF$ есть знаконеопределенная мера $d\nu_{ij}$ с условием, что $d\nu_\zeta=$ $=\sum\bar{\zeta}_i\zeta_j\,d\nu_{ij}$ — положительная мера для каждого $\zeta\in\mathbb{C}^n$. Итак, для любых функций $f_i(k)$ $(i=1,\ \ldots,\ n)$ имеем

$$\sum_{i,j}\int\overline{f_i(k)}\,f_j(k)\,d\nu_{ij}(k)\geqslant 0.$$

Предположим теперь, что $\int f(x)\,dx=0$. Тогда $\hat{f}(0)=0$, так что, по простым соображениям, $\hat{f}(k)=\sum k_if_i(k)$, где $f_i(k)\in\mathscr{S}$. Отсюда следует, что

$$\int F(x-y)\overline{f(x)}\,f(y)\,dx\,dy=-\sum_{i,j}\int\overline{f_i(k)}\,f_j(k)\,d\nu_{ij}(k)\leqslant 0. \blacksquare$$

Пример 1. Ответим теперь на вопрос о том, какие самосопряженные дифференциальные операторы в частных производных с постоянными коэффициентами порождают сохраняющие положительность полугруппы. Пусть $F(p)$ — ограниченный снизу полином от n переменных, и предположим, что $\exp(-tF(-i\nabla))$ сохраняет положительность. Тогда, по теореме XIII.52, F условно отрицательно определена, а согласно (83), F должна иметь порядок не более 2. Кроме того, из условия самосопряженности $\overline{F(p)}=F(p)$ и условия $F(p)=F(-p)$ (из (75)) вытекает, что члены первого порядка отсутствуют. Итак, $F(p)=\sum a_{ij}p_ip_j+c$. Наконец, при $\zeta\in\mathbb{C}^n$ и $D_\zeta=\sum_{i=1}^n\zeta_i\partial_i$ имеем

$$(D_\zeta^*D_\zeta F)(0)=-\sum a_{ij}\bar{\zeta}_i\zeta_j.$$

Поскольку $D_\zeta^*D_\zeta F$ отрицательно определена в силу части (b) теоремы XIII.53, матрица $\{a_{ij}\}$ должна быть положительно определенной. Итак, самосопряженные дифференциальные операторы в частных производных с постоянными коэффициентами, которые порождают сохраняющие положительность полугруппы, исчерпываются операторами следующего вида:

$$F(-i\nabla) = -\sum_{i=1}^{n} a_{ij}\partial_i\partial_j + c,$$

где матрица $\{a_{ij}\}$ положительно определена. С другой стороны, каждый из таких операторов заменой переменных может быть сведен к виду $-\Delta + c$, так что все они действительно порождают сохраняющие положительность полугруппы.

Из этого примера ясно, что если мы хотим найти новые условно отрицательные функции (удовлетворяющие условию $\overline{F(p)} = F(p)$), то следует искать нечто более сложное, чем полиномы. С этой целью полезно упростить условие (b) теоремы XIII.53.

Теорема XIII.54. Пусть F — сферически симметричная полиномиально ограниченная непрерывная функция с $F(0)=0$. Предположим далее, что функция ΔF положительно определена. Тогда F условно отрицательно определена.

Доказательство. Пусть $G = -\hat{F}$. Тогда $k^2 G$ — полиномиально ограниченная положительная мера. Поэтому G продолжается с $\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$ на множество включающее все функции вида $k^2 f(k)$, где f непрерывна и $k^n f(k) \to 0$ при $|k| \to \infty$. В частности, если $g \in \mathscr{S}$, то к этому виду относится функция $k_i k_j k_l g = k^2[(k_i k_j k_l) k^{-2}] g$, а потому, как и при доказательстве теоремы XIII.53, существует мера μ на $\mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, такая, что

$$G(k_i k_j k_l g) = \int k_i k_j k_l g(k)\, d\mu$$

для всех g из $\mathscr{S}$. Более того, $\int\limits_{|k|<1} k^2\, d\mu(k) < \infty$. Таким образом, опять-таки, как при доказательстве теоремы XIII.53, имеем

$$G(f) = \int\limits_{|\lambda|>0} \left[\varphi(\lambda) - \alpha(\lambda)\left(\varphi(0) + \lambda\cdot\nabla\varphi(0) + \frac{1}{2}\sum \lambda_i\lambda_j \partial_i\partial_j\varphi(0)\right)\right] d\mu -$$
$$- a_0\varphi(0) - \sum_{j=1}^{n} b_j \partial_j \varphi(0) + \sum_{i,j=1}^{n} c_{ij}(\partial_i\partial_j\varphi)(0),$$

где функция $\alpha \in C_0^\infty$ тождественно равна 1 вблизи нуля. Поскольку $\int k^2\, d\mu(k) < \infty$, можно выделить из интеграла $\lambda_i\lambda_j(\partial_i\partial_j\varphi)(0)$

и включить его в член с c_{ij}. Тогда

$$(2\pi)^{n/2} F(x) = -\int\limits_{|\lambda|>0} [e^{i\lambda x} - \alpha(\lambda)(1+\lambda\cdot x)]\, d\mu(\lambda) + \\ + \alpha_0 + i\beta\cdot x + \sum_{i,j} \gamma_{ij} x_i x_j, \qquad (84)$$

и, чтобы доказать, что F условно отрицательно определена, остается только показать, что матрица $\{\gamma_{ij}\}$ положительно определена. Поскольку F инвариантна относительно поворотов и такой же можно выбрать функцию α, γ_{ij} должна равняться $\gamma\delta_{ij}$, так что нужно доказать лишь, что $\gamma > 0$. Но фурье-образ ΔF есть $d\nu = \lambda^2 d\mu + 2\delta(\lambda)\operatorname{Tr}(\gamma_{ij})$, так что $n\gamma = \operatorname{Tr}(\gamma_{ij}) = {}^1/_2\nu(\{0\}) > 0$. ∎

Пример 2. Мы утверждаем, что функции

$F_1(p) = |p|^\alpha$, где $1 \leqslant \alpha \leqslant 2$ при $n=1$ и $0 \leqslant \alpha \leqslant 2$ при $n>1$,

$F_2(p) = \sqrt{p^2+m^2}$, $m > 0$,

условно положительно определены. Действительно, в обоих случаях можно вычислить ΔF и найти, что

$$\Delta F_1(p) = \alpha(n+\alpha-2)\,|p|^{\alpha-2},$$
$$\Delta F_2(p) = (n-1)(p^2+m^2)^{-1/2} + m^2(p^2+m^2)^{-3/2}.$$

Таким образом, нужно только доказать, что $|p|^{\alpha-2}$, $(p^2+m^2)^{-1/2}$ и $(p^2+m^2)^{-3/2}$ положительно определены. Далее, функция p^2 условно положительно определена, так что e^{-tp^2} положительно определена. Поскольку при $\alpha < 2$

$$|p|^{\alpha-2} = c_\alpha \int\limits_0^\infty t^{-\alpha/2} e^{-tp^2}\, dt,$$

то функция $|p|^{\alpha-2}$ положительно определена как интеграл от положительно определенных функций, сходящийся как интеграл от распределений. Аналогично при $\beta > 0$

$$(p^2+m^2)^{-\beta} = d_\beta \int\limits_0^\infty t^{\beta-1} e^{-t(p^2+m^2)}\, dt,$$

так что $(p^2+m^2)^{-\beta}$ положительно определена при $\beta > 0$.

Известный интерес представляет выбор в качестве свободного гамильтониана формы $h_0 = (p^2+m^2)^{1/2} - m$, поскольку это квантовый аналог энергии релятивистской частицы. Эта функция должна описывать бесспиновые частицы (например, пионы) в области, где релятивизм уже существен, но явления рождения частиц (теоретико-полевые эффекты) еще не важны.

Следующая тема лежит в стороне от потребностей спектральной теории, однако мы включили ее в это дополнение из-за ее важности для теории вероятности.

Определение. Вероятностная мера μ на $\mathbb{R}^n$ называется **бесконечно делимой**, если для любого n найдется вероятностная мера ν_n, такая, что $\mu=\nu_n*\nu_n*\ldots*\nu_n$ (n раз). Фурье-образы вероятностных мер называются **характеристическими функциями**. Характеристическая функция $f(x)$ называется **бесконечно делимой**, если для каждого n существует характеристическая функция $f_n(x)$, такая, что $f(x)=(f_n(x))^n$.

Мы хотим описать те функции, которые могут служить бесконечно делимыми характеристическими функциями. Пусть F непрерывна. Сначала заметим, что если $e^{-tF(p)}$ положительно определена для всех $t>0$, то $e^{-F(p)}$ — бесконечно делимая характеристическая функция. Но верно и обратное. Действительно, предположим, что $e^{-F(p)}$ бесконечно делима. Тогда существует положительно определенная функция g_2, такая, что $g_2(p)^2=e^{-F(p)}$. Очевидно, $g_2(p)=\pm\exp(-{}^1/_2F(p))$ для всех p. Но так как g_2 и F непрерывны, а $g_2(0)=1=+\exp(-{}^1/_2F(0))$, то и при всех p имеет место знак плюс. Этим способом получаем, что $\exp(-2^{-n}F)$ положительно определена для всех n. Поскольку произведения и пределы положительно определенных функций положительно определены, $\exp(-t\,F(p))$ положительно определена при всех t. Это замечание в соединении с уже доказанными нами теоремами позволяет описать бесконечно делимые характеристические функции.

Теорема XIII.55 (теорема Леви — Хинчина). Каждая бесконечно делимая характеристическая функция G имеет вид $G=e^{-F}$, где F — некоторая функция вида (76).

Доказательство. Пусть G_m — положительно определенная функция, причем $(G_m)^m=G$. Тогда $G_m(0)=1$, и, в силу непрерывности G, $G(x)\neq 0$ при $|x|<\varepsilon$ для некоторого подходящего ε. Таким образом, $G_m(x)\to 1$ при $|x|<\varepsilon$, когда $m\to\infty$. По нижеследующей лемме $G_m(x)\to 1$ для *всех* x, так что $G(x)$ никогда не обращается в нуль. По фундаментальному топологическому свойству $\mathbb{R}^n$ любая не обращающаяся в нуль комплекснозначная непрерывная функция на $\mathbb{R}^n$ обладает однозначно определенным непрерывным логарифмом, если только его значение фиксировано в одной точке. Итак, существует единственная непрерывная функция F, такая, что $G=e^{-F}$ и $F(0)=0$. Поскольку G ограничена, вещественная часть F ограничена снизу. Согласно замечанию, предшествующему этой теореме, $\exp(-tF(x))$ положительно определена при всех $t>0$, так что по теореме XIII.52 $\exp(-tF(-i\nabla))$ — сохраняющая положительность полугруппа. Итак, в силу теоремы XIII.53, существует конечная положительная мера, такая, что выполняется формула Леви — Хинчина (76). ∎

Лемма. Пусть G_m — последовательность положительно определенных функций, причем $G_m(0)=1$. Предположим, что, когда $m\to\infty$, $G_m(x)\to 1$ для x в некоторой окрестности нуля. Тогда $G_m(x)\to 1$ для всех x.

Доказательство. По предположению, существуют меры μ_m на $\mathbb{R}^n$, такие, что

$$G_m(x)=\int e^{ixy}\,d\mu_m(y).$$

По предположению же, каждая μ_m имеет единичную массу. Более того, элементарное применение теоремы Фубини показывает, что

$$(2a)^{-n}\int\limits_{|x_i|\leqslant a}[1-G_m(x)]\,dx=\int\left(1-\prod_{i=1}^{n}\frac{\sin ay_i}{ay_i}\right)d\mu_m(y)\geqslant$$

$$\geqslant C\mu_m\{y\mid y_i\geqslant a^{-1}\ \text{для некоторого}\ i\},$$

где $C=\min\limits_{y\geqslant 1}(1-y^{-1}\sin y)>0$. Итак, по предположениям о G_m, для некоторого a имеем $\mu_m\{y|\,y_i\geqslant a^{-1}$ для некоторого $i\}\to 0$ при $m\to\infty$. Будем рассматривать μ_m как меры на $\dot{\mathbb{R}}^n$, одноточечной компактификации $\mathbb{R}^n$. Пусть μ_∞ — произвольная слабая предельная точка последовательности μ_m. Такие предельные точки существуют, ибо пространство $\mathcal{M}_{+,1}(\dot{\mathbb{R}}^n)$ компактно. Поскольку $\mu_m\{y\,|\,|y|\geqslant a^{-1}\}\to 0$ при $m\to\infty$ для некоторого a, можно заключить, что μ_∞ — мера на $\mathbb{R}^n$, т. е. $\mu_\infty(\{\infty\})=0$, и что $\int f(y)\,d\mu_{m(i)}\to\int f(y)\,d\mu_\infty$ для *любой* непрерывной ограниченной функции на $\mathbb{R}^n$, а не только для тех, которые на бесконечности стремятся к константе. В частности, $\int e^{ixy}\,d\mu_\infty(y)=1$ для малых $|x|$. Пусть Q — семейство точек в этом множестве малых x, все координаты которых рациональны. Легко видеть, что $\bigcap\limits_{x\in Q}\{y\,|\,e^{ixy}=1\}=\{0\}$, поэтому мы заключаем, что $\mu_\infty=\delta_0$, точечной массе в нуле. Поскольку каждая предельная точка последовательности μ_m есть δ_0, $\mu_m\to\delta_0$ слабо, и, так же как выше, $\int f(y)\,d\mu_m(y)\to f(0)$ для любой ограниченной непрерывной f. В частности, $G_m(x)\to 1$ для всех x. ∎

XIII.13. Отсутствие положительных собственных значений

До сих пор мы избегали обсуждения вопроса о том, могут ли шредингеровы операторы обладать собственными значениями, погруженными в непрерывный спектр. Этот вопрос оказывается очень сложным, а существующие результаты обычно требуют предположений более детальных, чем для любой другой спектральной задачи. Более того, исследование этой проблемы представляется особенно бесперспективным, поскольку имеются весомые физические причины (мы обсудим их ниже) ожидать, что таких собственных значений быть не должно. Приведем пример интуитивных соображений в простом случае. Рассмотрим потенциал $V(x)$, стремящийся к нулю при $|x| \to \infty$. На классическом уровне единственный способ удержать частицу с положительной энергией от ухода в бесконечность — это возвести барьер, т. е. «привязать» ее с помощью закона сохранения энергии. Но в квантовой механике существуют подбарьерные переходы, так что можно было бы думать, что связанные состояния с положительной энергией невозможны. Однако все это не так просто!

Пример 1 (потенциал Вигнера — фон Неймана). Чтобы найти потенциал V, для которого существует квадратично интегрируемая функция ψ, удовлетворяющая уравнению $(-\Delta+V)\psi=\psi$, попытаемся подобрать ψ. Если функция u сферически симметрична и $u(r)=r\psi(r)$, то $-u''+Vu=u$, или $V=1+u''u^{-1}$. Чтобы V стремился к нулю на бесконечности, произведение $u''u^{-1}$ должно стремиться к -1, что наводит на мысль испробовать подстановку $u(r)=(\sin r)\,w(r)$. Тогда

$$V(r)=w''(r)\,w(r)^{-1}+2(\operatorname{ctg} r)\,w'(r)\,w(r)^{-1}.$$

Чтобы V не имел особенностей, нужно, чтобы w' обращалась в нуль там же, где и $\sin r$. Итак, функция w должна вести себя примерно как

$$g(r)=2r-\sin 2r=4\int_0^r \sin^2 x\,dx. \tag{85}$$

Конечно, если взять $w=g$, то u не будет квадратично интегрируемой. Но если положить $w=(1+g(r)^2)^{-1}$, то u будет квадратично интегрируема, а $w'=-2g'g(1+g^2)^{-2}$ будет иметь нули в правильных точках. Останавливаясь на этом выборе w и вычисляя V, найдем

$$V(r)=[1+g(r)^2]^{-2}(-32\sin r)[g(r)^3\cos r-$$
$$-3g(r)^2\sin^3 r+g(r)\cos r+\sin^3 r],$$

где $g(r)$ задается формулой (85). Этот довольно сложный потенциал V обладает тем свойством, что оператор $-\Delta+V$ имеет собственное значение в точке $+1$ с собственным вектором

$$\psi(r)=(r^{-1}\sin r)(1+g(r)^2)^{-1},$$

даже несмотря на то, что V ограничен и стремится к нулю на бесконечности, так что $[0,\infty)\subset\sigma(-\Delta+V)$ по теореме Вейля о существенном спектре. Заметим, что V обладает асимптотическим поведением

$$V(r) = -8(\sin 2r)/r + O(r^{-2}).$$

Это означает, что V осциллирует и медленно убывает на ∞. Мы увидим, что оба эти качества являются решающими для существования положительных собственных значений. Более подробное рассмотрение примеров такого рода можно найти во втором и третьем дополнениях к § XI.8.

Физику, который уверовал в предсказание, что положительных собственных значений быть не может, столкнувшись с примером 1, не избежать ответа на вопрос: почему же ошибочна интуиция? Решающее свойство V — это его осцилляции. Как и в примере 1 в дополнении к § X.1, мы воспользовались тем, что квантовомеханические частицы отражаются от выпуклостей потенциала. Потенциал V устроен таким образом, что для этой специальной картины колебаний потенциала отражения происходят когерентно. Эта интерпретация наводит на мысль, что появление собственных значений в положительном спектре — вещь очень необычная, зависящая от детальных свойств «когерентности», присущих потенциалу. Она показывает также, что было бы трудно сформулировать простые общие условия, исключающие возможность появления таких связанных состояний.

Пример 2. Пусть $V(x) = ||x|-1|^{-1}$ на $\mathbb{R}^3$. Функция V не лежит даже в $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$, но область $Q(V) \cap Q(-\Delta)$ плотна, так что оператор $-\Delta + V$ можно определить как сумму квадратичных форм. Этот оператор имеет собственные значения с положительной энергией по следующей простой причине. Любой вектор $\psi \in Q(V) \cap Q(-\Delta)$ обращается в нуль на сфере единичного радиуса, а потому оператор $-\Delta + V$ оставляет инвариантным множество $\mathscr{H}_1 = L^2(\{x \mid |x| \leqslant 1\})$. Таким образом, $\mathscr{H}$ разлагается в прямую сумму $\mathscr{H}_1 \oplus \mathscr{H}_2$, и потому $H = H_1 \oplus H_2$, где H_1 имеет чисто дискретный спектр. Доказательство этих утверждений мы оставляем читателю (задача 104).

Этот пример довольно искусствен, но он показывает, что вопрос о положительных собственных значениях связан с вопросом о том, может ли оператор $-\Delta + V$ иметь собственные векторы с компактными носителями. Мы вернемся к этому аспекту проблемы ниже, а также в дополнении.

Пример 3. Пусть V — сферический потенциальный ящик в $\mathbb{R}^3$, т. е. $V(x) = -c$, если $|x| \leqslant 1$, и $V(x) = 0$, если $|x| > 1$. Мы ищем решения уравнения $(-\Delta + V)\psi = 0$. Если $\psi(x) = |x|^{-1} u(|x|) \times Y_{lm}(\hat{x})$, где $\hat{x}$ — единичный вектор в направлении x, а Y_{lm} —

сферическая функция, то u удовлетворяет уравнению

$$-u'' + l(l+1)r^{-2}u + V(r)u = 0. \qquad (86)$$

Решения (86) в области $r > 1$, где $V = 0$, суть r^{-l} и r^{l+1}. Если решение (86), которое регулярно при $r = 0$, в точности равно r^{-l} в области $r > 1$ (а этого можно добиться подбором c) и $l \geqslant 1$, уравнение $(-\Delta + V)\psi = 0$ имеет квадратично интегрируемые решения.

Этот пример демонстрирует, что собственные значения с нулевой энергией и, в общем случае, пороговые собственные значения для n-частичных систем — это совершенно естественное явление, и нельзя рассчитывать, что его удастся исключить.

Пример 4. Рассмотрим гамильтониан атома гелия:

$$H(\beta) = -\Delta_1 - \Delta_2 - 2|r_1|^{-1} - 2|r_2|^{-1} + \beta|r_1 - r_2|^{-1},$$

который мы подробно обсуждали в § XII.6. При $\beta = 0$ мы обнаружили высокую кратность собственных значений в непрерывном спектре. Это происходило потому, что состояния с энергией, при которой возможен распад, не могут реально распасться, поскольку этот процесс должен включать в себя передачу энергии от одной частицы к другой, а это невозможно при $\beta = 0$, так как две частицы при этом не взаимодействуют друг с другом. Даже при $\beta \neq 0$ остаются собственные значения, погруженные в непрерывный спектр, что связано с наличием симметрии, а именно «естественностью» четности. Отметим, что все эти погруженные собственные значения проявляются при отрицательных энергиях.

Урок, который можно извлечь из этого примера, таков: должно быть, доказать, что n-частичные операторы Шредингера не имеют погруженных собственных значений при отрицательных энергиях, чрезвычайно трудно. В предыдущих случаях имелись простые причины существования «погруженных» собственных значений. Но как убедиться для заданной n-частичной системы в отсутствии «скрытых» симметрий, которые могут породить такие собственные значения?

На этих примерах становится понятно, почему рассматриваемая проблема столь сложна. Интуитивно ясно, что положительные собственные значения энергии не встречаются в «разумных» ситуациях, но не менее ясно, что такие собственные значения могут возникнуть благодаря «неразумным» тонкостям. Мы представим четыре довольно разных подхода к этой проблеме. Первый относится к двухчастичному центрально-симметричному потенциалу. Здесь уравнение Шредингера формально может быть сведено к обыкновенному дифференциальному уравнению, поэтому сравнительно легко провести полное исследование. Мы не будем приводить наиболее сильных результатов, включающих случаи с локальными особенностями.

Теорема XIII.56. Пусть V — сферически-симметричная функция на $\mathbb{R}^n$, причем

$$\int_a^\infty |V(r)|\,dr < \infty \tag{87}$$

для некоторого $a > 0$. Предположим, что $V \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n \setminus 0)$, и пусть H — произвольное самосопряженное расширение оператора $-\Delta + V$ с $C_0^\infty(\mathbb{R}^n \setminus 0)$, коммутирующее с поворотами. Тогда H не имеет строго положительных собственных значений.

Доказательство. Предположим, что $(-\Delta + V)\psi = E\psi$. Разложим ψ по парциальным волнам (сферическим гармоникам). Тогда некоторые компоненты этого разложения отличны от нуля, так что нас интересует обобщенное решение уравнения

$$-u'' + cr^{-2}u + Vu = Eu \tag{88}$$

на $(0, \infty)$, которое квадратично интегрируемо. Здесь c — константа, зависящая от номера парциальной волны. Как и в § XI.8, поскольку $E > 0$, можно найти два независимых решения Йоста интегрального уравнения, соответствующего (88), так как справедливо условие (87). Нетрудно показать (задача 105), что любое решение уравнения (88) должно быть линейной комбинацией этих двух решений Йоста. Поскольку ни одна из таких линейных комбинаций не является квадратично интегрируемой на бесконечности, u должно быть тождественным нулем. ∎

Хотя потенциал из примера 1 не удовлетворяет условию (87), он в точности принадлежит к тому типу, который рассмотрен в дополнении к § XI.8, где мы построили решения Йоста для потенциалов вида

$$V(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i r^{-1} \sin(\alpha_i r) + O(r^{-1-\varepsilon})$$

для любого $E = k^2 \neq 0, \alpha_1^2/4, \ldots, \alpha_N^2/4$. Таким образом, из предыдущих рассуждений видно, что потенциал Вигнера — фон Неймана может иметь положительное собственное значение только при энергии E, равной единице, т. е. при энергии, при которой он действительно имеет связанное состояние рассмотренного типа.

Наш следующий результат позволит включить в рассмотрение потенциалы, которые не обладают сферической симметрией. Важной частью метода является теорема об однозначном продолжении решения уравнения Шредингера. Чтобы понять, как применяется это утверждение, предположим, что $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, причем $\operatorname{supp} V \subset \{x \mid |x| < R\}$. Если $(-\Delta + V) u = Eu$, то u удовлетворяет уравнению $-\Delta u = Eu$ на $\{x \mid |x| > R\} = \Omega$. Как и выше, можно разложить u по сферическим гармоникам на Ω и получить, что $u = 0$ на Ω. Чтобы заключить, что решение u тождественно равно нулю, нам необходима

Теорема XIII.57. Пусть V — функция на $\mathbb{R}^n$, такая, что

(i) операция умножения на V — Δ-ограничена с относительной гранью, меньшей 1;

(ii) существует замкнутое множество S нулевой меры, такое, что $\mathbb{R}^n \setminus S$ связно и V ограничена на каждом компактном подмножестве в $\mathbb{R}^n \setminus S$.

Пусть $H = -\Delta + V$, и предположим, что $Hu = Eu$ для некоторого E и $u \in L^2$. Предположим, что u обращается в нуль на некотором открытом подмножестве в $\mathbb{R}^n$. Тогда u есть тождественный нуль.

Как показывает доказательство, данное в дополнении к этому разделу, это локальный результат, относящийся к решениям в смысле обобщенных функций уравнения $(-\Delta + V) u = Eu$, которые локально лежат в $D(-\Delta)$. Причина введения условия (i) как раз и состоит в необходимости гарантировать, что собственные функции локально лежат в $D(-\Delta)$.

Предыдущее рассмотрение показывает, что $\sigma_p(-\Delta + V) \cap \cap (0, \infty) = \varnothing$ для $V \in C_0^\infty$. Это специальный случай следующего общего утверждения.

Теорема XIII.58 (теорема Като — Агмона — Саймона). Предположим, что V — потенциал, удовлетворяющий условиям теоремы XIII.57, и что, кроме того, $V = V_1 + V_2$, где

(i) функция V_1 ограничена вне некоторого шара $\{x \mid |x| < R_0\}$ и $|x| V_1(x) \to 0$ при $|x| \to \infty$;

(ii) функция V_2 ограничена вне некоторого шара $\{x \mid |x| < R_0\}$ и $V_2(x) \to 0$ при $|x| \to \infty$;

(iii) если рассматривать V_2 как отображение $r \mapsto V_2(r, \cdot)$ из $(0, \infty)$ в $L^\infty(S^{n-1})$, где S^{n-1} есть $(n-1)$-мерная сфера, то V_2 дифференцируема для $|x| > R_0$ как L^∞-значная функция и $\varlimsup_{r \to \infty} r\, \partial V_2 / \partial r \leqslant 0$.

Тогда $H = -\Delta + V$ не имеет строго положительных собственных значений.

Доказательство. Рассмотрим другие условия:

(ii′) $V_2(x) < 0$ при $|x| > R_0$ (вместо $V_2(x) \to 0$);

(iii′) $\partial V_2(x) / \partial r \leqslant -r^{-1} V_2$ при $|x| > R_0$ (вместо $\varlimsup_{r \to \infty} r\, \partial V_2 / \partial r \leqslant 0$).

Допустим, что можно показать, что $-\Delta+V$ не имеет строго положительных собственных значений при условиях (i), (ii′), (iii′). Но если задан V_2, удовлетворяющий (ii) и (iii), то функция $\tilde{V}_2=V_2-\varepsilon$ удовлетворяет (ii′) и (iii′), по крайней мере, когда R_0 выбрано достаточно большим. Применяя предполагаемый для (i)—(iii′) результат к $-\Delta+V_1+\tilde{V}_2$, мы видим, что $-\Delta+V$ не имеет собственных значений в (ε, ∞). Поскольку ε произвольно, можно довести доказательство теоремы до конца. Итак, будем считать, что выполнены (i), (ii′), (iii′).

Предположим, что ψ — вещественная собственная функция оператора $-\Delta+V$ с собственным значением $E>0$. Определим функцию w из $(0, \infty)$ в $L^2(S^{n-1}, d\Omega)$ посредством

$$w(r, \Omega)=r^{(n-1)/2}\psi(r\Omega), \tag{89}$$

так что

$$\int_0^\infty \|w(r)\|^2_{L^2(S^{n-1}, d\Omega)}\, dr<\infty.$$

Далее мы будем опускать индекс у нормы. В более общей формулировке, для заданной $\varphi\in L^2(\mathbb{R}^n)$ определим $w_\varphi\in L^2((0, \infty); L^2(S^{n-1}, d\Omega), dr)$ по (89) с заменой ψ на φ. Если $\varphi\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, то

$$w_{H\varphi}=-w''_\varphi-r^{-2}Bw_\varphi+{}^1/_4(n-1)(n-3)r^{-2}w_\varphi+Vw_\varphi, \tag{90}$$

где B — оператор Лапласа—Бельтрами на $L^2(S^{n-1})$, описанный в примере 4 дополнения к § X.1. Равенство (90) может быть доказано применением разложения по сферическим гармоникам, как и в указанном примере. Ниже нам требуется только знать, что $-B$ есть положительный оператор.

При помощи функции w из (89) определим при $r>R_0$ функцию

$$F(r)=(w', w')+r^{-2}(w, Bw)+(w, (E-V_2(r))w), \tag{91}$$

где все внутренние произведения лежат в $L^2(S^{n-1}, d\Omega)$. Объекты, входящие в (91), все корректно определены. Действительно, сначала заметим, что при $\varphi\in C_0^\infty$

$$\int_0^\infty [(\dot{w}_\varphi, \dot{w}_\varphi)-r^{-2}(w_\varphi, Bw_\varphi)]\,dr=\|\nabla\varphi\|^2_{L^2(\mathbb{R}^n)},$$

где $\dot{w}_\varphi=r^{(n-1)/2}(d/dr)(r^{-(n-1)/2}w_\varphi)$. Из этого равенства следует, что w'_φ и (w_φ, Bw_φ) определены почти всюду на $(0, \infty)$, если $\varphi\in Q(-\Delta)$.

Выберем $R_1>R_0$ так, чтобы выполнялось неравенство

$$|rV_1(r)|+{}^1/_4(n-1)(n-3)r^{-1}<k\equiv\sqrt{E}$$

для $r > R_1$. Такое R_1 существует по предположению (i). Утверждается, что почти всюду

$$F(r) \geqslant r^{-1} r_1 F(r_1), \quad r > r_1 > R_1. \tag{92}$$

Дадим сначала формальный вывод (92). Если $r > R_1$, то

$$\frac{d}{dr}(rF(r)) = 2r(w', w'' + r^{-2}Bw + (E - V_2)w) +$$
$$+ \|w'\|^2 - r^{-2}(w, Bw) + E\|w\|^2 - (w, (rV_2)'w) \geqslant$$
$$\geqslant 2(w', (rV_1 + {}^1/_4(n-1)(n-3)r^{-1})w) + \|w'\|^2 + E\|w\|^2 \geqslant 0,$$

где первое неравенство следует из (формального) равенства для собственной функции, положительности оператора $-B$ и оценки $(rV_2)' = rV_2' + V_2 \leqslant 0$ по условию (iii'). Последнее неравенство обусловлено выбором R_1. Конечно, (92) получается интегрированием этого неравенства.

Приведем теперь строгий вывод (92). Пусть $\varphi \in C_0^\infty$; определим F_φ по (91) с заменой w на w_φ. Дифференцирование, примененное выше к F формально, в применении к F_φ законно и дает

$$\frac{d}{dr}(rF_\varphi) \geqslant 2r(w'_\varphi, (Ew_\varphi - w_{H\varphi}))$$

для $r > R$. Поэтому, если $r > r_1 > R_1$, имеем

$$rF_\varphi(r) \geqslant r_1 F_\varphi(r_1) + \int_{r_1}^{r} 2t(w'_\varphi(t), Ew_\varphi(t) - w_{H\varphi}(t))\,dt.$$

Подберем теперь $\varphi_n \in C_0^\infty$ так, чтобы $\varphi_n \to \psi$ и $-\Delta\varphi_n \to -\Delta\psi$ (такой выбор возможен, поскольку C_0^∞ — существенная область определения для $-\Delta$). Тогда $H\varphi_n \to H\psi = E\psi$. Итак, $w_{\varphi_n} \to w$, $w_{H\varphi_n} \to Ew$ и $w'_{\varphi_n} \to w'$ в $L^2((0, \infty); L^2(S^{n-1}, d\Omega), dr)$ и после перехода к подпоследовательности $F_{\varphi_n} \to F$ поточечно почти всюду. Это доказывает (92).

Из (92) выводится, что $F(r) \leqslant 0$ при $r > R_1$, поскольку если бы это было не так, то левая часть (91) не была бы интегрируемой. Но левая часть (91) интегрируема, ибо $\psi \in D(-\Delta)$ (задача 110). Теперь мы хотим доказать, что $w = 0$ при $r > R_2$ для подходящего R_2. Это повлечет за собой обращение ψ в нуль вне некоторой сферы, а потому, по теореме об однозначном продолжении, ψ окажется тождественно равной нулю. В нашем дальнейшем вычислении мы проделаем только «формальные» выкладки, оставляя читателю восполнение рассуждений по образцу только что приведенных для F_φ.

Для любого $m \geqslant 0$ пусть $w_m = r^m w$ и

$$G(m, r) = \|w'_m\|^2 + (k^2 - k^2 R_1 r^{-1} + m(m+1) r^{-2}) \|w_m\|^2 + \\ + r^{-2}(w_m, Bw_m) - (w_m, V_2(r) w_m).$$

Заметим сначала, что w_m удовлетворяет равенству

$$w''_m - 2mr^{-1}w'_m + r^{-2}[m(m+1) - {}^1/_4(n-1)(n-3) + B]w_m + \\ + (k^2 - V) w_m = 0.$$

Тогда, пользуясь неравенством $-(r^2V_2)' = rV_2 - r(rV_2)' \geqslant 0$, легко вычислить, что при $r > R_0$

$$\frac{d}{dr}(r^2 G(m, r)) \geqslant 2r\left[(2m+1)\|w'_m\|^2 + k^2\left(1 - \frac{R_1}{2r}\right)\|w_m\|^2 + \right. \\ \left. + (w'_m, (rV_1 + {}^1/_4(n-1)(n-3) r^{-1} - k^2 R_1) w_m)\right].$$

Итак, при $r > R_1$

$$\frac{d}{dr}(r^2 G(m, r)) \geqslant 2r\left[(2m+1)\|w'_m\|^2 + \frac{1}{2}k^2\|w_m\|^2 - \right. \\ \left. - (k + k^2 R_1)\|w'_m\|\|w_m\|\right].$$

Отсюда следует, что для некоторого m_0 функция $r^2 G(m, r)$ монотонно возрастает на (R_1, ∞), если $m > m_0$.

Предположим теперь, что $w(r_0) \neq 0$ для некоторого $r_0 > R_1$. Записывая

$$G(m, r) = r^{2m}[\|w' + mr^{-1}w\|^2 + (k^2 - k^2 R_1 r^{-1} + m(m+1) r^{-2})\|w\|^2 - \\ - (w, V_2 w) + r^{-2}(w, Bw)], \tag{93}$$

видим, что $G(m, r_0) > 0$ для достаточно большого m. Комбинируя это утверждение с доказанной выше монотонностью, заключаем, что если $w(r_0) \neq 0$ для некоторого $r_0 > R_1$, то для некоторого M (зависящего от r_0) $G(m, r) > 0$ при всех $m > M$ и $r > r_0$.

Теперь можно завершить доказательство. По заданному r_0, такому, что $w(r_0) \neq 0$ и $r_0 > R_1$, выбираем $m_0 > M$, а затем $R_2 > r_0$ так, чтобы для $r > R_2$ выполнялось

$$-k^2 R_1 r^{-1} + m_0(2m_0 + 1) r^{-2} < 0.$$

Поскольку $\int\limits_{R_2}^{\infty} \|w\|^2 dr < \infty$, $\|w\|$ не есть строго монотонно возрастающая функция на всем бесконечном интервале $[R_2, \infty)$, а потому существует некоторое $r_1 > R_2$, такое, что

$$\frac{d}{dr}\|w\|^2\Big|_{r=r_1} = 2(w', w) \leqslant 0.$$

В частности, при $r=r_1$

$$\|w'+mr^{-1}w\|^2 \leqslant \|w'\|^2+m^2r^{-2}\|w\|^2,$$

откуда, в силу (93),

$$0<r_1^{-2m_0}G(m_0,\ r_1)\leqslant\|w'\|^2+k^2\|w\|^2-(w,\ V_2w)+r^{-2}(w,\ Bw)=F(r_1).$$

Коль скоро дано (92), это означает, что $\int\|w\|^2\,dr=\infty$, или $\|w\|^2=0$, поэтому $w(r_0)=0$ для всех $r_0>R_1$. В силу однозначности продолжения (теорема XIII.57), ψ есть тождественный нуль. ∎

Следствие. Предположим, что V удовлетворяет условиям теоремы XIII.57. Если V имеет компактный носитель или если V — потенциал отталкивания вблизи бесконечности (т. е. $\partial V/\partial r\leqslant 0$), то связанных состояний с положительной энергией не существует.

Отметим, что, в силу своего асимптотического поведения, потенциал из примера 1 нарушает как условие $rV_1\to 0$, так и условие на $r\partial V_2/\partial r$.

Третий метод контроля за связанными состояниями с положительной энергией, который мы обсудим, включает в себя теорему вириала. Эта теорема утверждает, что если ψ — собственная функция оператора $H=-\Delta+V$, то при должных предположениях о V имеем

$$2(\psi,\ (-\Delta)\psi)=(\psi,\ \mathbf{r}\cdot\nabla V\psi). \tag{94}$$

Эта формула, очевидно, полезный инструмент при изучении связанных состояний. Например, если $\mathbf{r}\cdot\nabla V\leqslant 0$ (что выражает тот факт, что V — потенциал отталкивания), то H не может иметь связанных состояний, поскольку тогда правая часть (94) всегда была бы отрицательна, а левая — строго положительна. Формально (94) вытекает из следующего построения. Пусть

$$D=\frac{in}{2}+i\sum_{l=1}^{n}x_l\frac{\partial}{\partial x_l}.$$

Тогда $i[D,\ H]=2(-\Delta)-\mathbf{r}\cdot\nabla V$, так что если ψ — собственная функция с собственным значением E, то

$$2(\psi,\ -\Delta\psi)-(\psi,\ \mathbf{r}\cdot\nabla V)=(\psi,\ i[D,\ H]\psi)=$$
$$=-iE\{(\psi,\ D\psi)-(\psi,\ D\psi)\}=0,$$

поскольку H эрмитов. Это рассуждение чисто формальное, поскольку D — неограниченный оператор, а ψ не обязана лежать в его области определения. И действительно, существуют модификации потенциала из примера 1, обладающие собственными функциями, не лежащими в области определения оператора D (задача 107)! Ключ нашего доказательства теоремы вириала —

в том, что группа, порождаемая D, есть группа растяжений, рассмотренная в § 10. Для $a>0$ определим семейство унитарных операторов

$$(U_a\psi)(x) \equiv (e^{-iD \ln a}\psi)(x) = a^{n/2}\psi(ax)$$

и положим $V_a(x) = V(ax)$, так что $V_a = U_a V U_a^{-1}$ для оператора умножения V.

Теорема XIII.59 (теорема вириала). Предположим, что V — оператор умножения в $L^2(\mathbb{R}^n)$ и что

(i) V — Δ-ограничен с относительной гранью, меньшей единицы;

(ii) существует такой оператор умножения W в $L^2(\mathbb{R}^n)$, что $D(W) \supset D(-\Delta)$ и для всех $\psi \in D(-\Delta)$

$$(a-1)^{-1}(V_a - V)\psi \to W\psi \quad \text{при} \quad a \to 1. \tag{95}$$

Тогда, если $\psi \in D(-\Delta)$ и $-\Delta\psi + V\psi = E\psi$, имеем

$$2(\psi, -\Delta\psi) = (\psi, W\psi) = 2(\psi, (E-V)\psi). \tag{96}$$

Доказательство. Поскольку $U_a(-\Delta)U_a^{-1} = a^{-2}(-\Delta)$, наряду с $(-\Delta + V)\psi = E\psi$ имеем $(-\Delta + a^2V_a)\psi_a = a^2E\psi_a$. Из этих двух равенств следует, что

$$E(a^2-1)(\psi_a, \psi) = ((-\Delta + a^2V_a)\psi_a, \psi) - (\psi_a, (-\Delta + V)\psi) =$$
$$= a^2(V_a\psi_a, \psi) - (\psi_a, V\psi),$$

поскольку оператор $-\Delta$ симметричен. Итак,

$$(a+1)(\psi_a, V_a\psi) + (a-1)^{-1}(\psi_a, (V_a - V)\psi) = E(a+1)(\psi_a, \psi).$$

Переходя к пределу при $a \to 1$, получаем (96). ∎

Отметим, что формально W есть не что иное, как $\mathbf{r}\cdot\nabla V$. Действительно, так как $C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \subset D(-\Delta)$, то, если справедливо (95), W дается формулой $\mathbf{r}\cdot\nabla V$, где производные понимаются в смысле обобщенных функций. Далее, (95) стандартно доказывается следующим образом. Предположим, что $(a-1)^{-1}(V_a - V)$ поточечно сходится к функции W и что существует оператор умножения $\tilde{W}$ с областью определения $D(\tilde{W}) \supset D(-\Delta)$, причем выполнено условие

$$|(a-1)^{-1}(V_a - V)| \leqslant \tilde{W}$$

поточечно почти всюду для a, близких к единице. Тогда $D(W) \supset D(-\Delta)$, и (95) выводится из теоремы о мажорированной сходимости.

Теорема XIII.60. Пусть V — вещественнозначная функция, $-\Delta$-ограниченная с относительной гранью, меньшей единицы. Тогда оператор $-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений, если выполнено хотя бы одно из следующих условий:

(i) V удовлетворяет условиям теоремы XIII.59 и является потенциалом отталкивания (т. е. $V(ar) \leqslant V(r)$ для всех r и всех $a>1$);

(ii) V — однородная функция степени $-\alpha$, причем $0<\alpha<2$ (т. е. $V(ar)=a^{-\alpha}V(r)$);

(iii) V удовлетворяет условиям теоремы XIII.59, и для некоторого $b>0$ имеем

$$-\Delta - {}^1/_2(1+b)W - bV \geqslant 0. \tag{97}$$

Доказательство. Если (ii) справедливо, то легко проверить, что выполняются и условия теоремы XIII.59. Поэтому во всех трех случаях пусть W такое, как в теореме XIII.59. Тогда

$$(\psi, -\Delta\psi) = {}^1/_2(\psi, W\psi)$$

для любой собственной функции ψ. В случае (i) $W(x) \leqslant 0$, поэтому $\psi=0$, так как $H_0 \geqslant 0$ и $\operatorname{Ker}(H_0)=\{0\}$. В случае (ii) $W=-\alpha V$, так что по (96)

$$2E(\psi, \psi) = (2-\alpha)(\psi, V\psi) = -\alpha^{-1}(2-\alpha)(\psi, W\psi) = \\ = -2\alpha^{-1}(2-\alpha)(\psi, H_0\psi).$$

Поскольку $2-\alpha>0$ и $-\Delta \geqslant 0$, заключаем, что $E<0$. Наконец, в случае (iii) для любой собственной функции ψ имеем

$$-bE(\psi, \psi) = -b(\psi, (H_0+V)\psi) + (1+b)(\psi, (H_0 - {}^1/_2W)\psi) = \\ = (\psi, [H_0 - {}^1/_2(1+b)W - bV]\psi),$$

так что из (97) следует, что $E \leqslant 0$. ∎

Подчеркнем, что потенциалы в этой теореме не обязаны стремиться к нулю на бесконечности, поэтому теорему можно применять к многочастичным операторам Шредингера.

Пример 5 (кулоновы системы и в том числе гамильтонианы атомов). Предположим, что имеется n-частичная система с парными силами, которые все имеют вид $a_{ij}|r_i-r_j|^{-1}$. Тогда V — однородная функция степени -1, так что, согласно критерию пункта (ii) теоремы XIII.60, оператор $H=-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений.

Пример 6. Проиллюстрируем пункт (iii) теоремы XIII.60 простым примером. Пусть $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ с $n \geqslant 3$. Мы уже видели в § 3, что $-\Delta+\lambda V$ не имеет отрицательных собственных значений, коль скоро λ достаточно мало. Что можно сказать относительно положительных собственных значений? Техника, развитая в § 7 и основанная на понятии гладкости, влечет за собой отсутствие и положительных собственных значений. А теорема XIII.58 утверждает, что положительных собственных значений нет ни при каких значениях λ. При малых λ возможно другое доказательство, поскольку $-\mathbf{r}\cdot\nabla V-V$ также принадлежит $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Итак, для малых λ оператор $-\Delta-\lambda(\mathbf{r}\cdot\nabla V+V)$ не имеет отрицательных собственных значений, а потому положителен. Из части (iii) теоремы XIII.60 следует, что $-\Delta+\lambda V$ не имеет положительных собственных значений при малых λ.

Теорема XIII.60 не исчерпывает информации, вытекающей из теоремы вириала. Например, можно иметь дело с суммами потенциалов рассмотренного там типа (задача 108). Для некоторых потенциалов можно доказать отсутствие собственных значений в некотором интервале (a, ∞), где $a>0$.

Пример 7. Пусть $H=-\sum_{j=1}^{n}\Delta_j+\sum_{j=1}^{n}V_j(\mathbf{r}_j)+\sum_{i<j}V_{ij}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)$ в $L^2(\mathbb{R}^{3n})$, где $V_j(\mathbf{r}_j)=-b_jr_j^{-1}\exp(-a_jr_j)$ и $V_{ij}(\mathbf{r})=b_{ij}r^{-1}\times\exp(-a_{ij}r)$, все a и b — положительные константы. Пусть $U(r)=r^{-1}(\exp(-ar))$. Тогда $rdU/dr=-U-a\exp(-ar)$, так что если $V=\sum_{j=1}^{n}V_j+\sum_{i<j}V_{ij}$, то

$$\mathbf{x}\cdot\nabla V+V\leqslant\sum_{j=1}^{n}a_jb_j.$$

Отсюда следует, что если $(-\Delta+V)\psi=E\psi$, то

$$E(\psi, \psi)=-(\psi, H_0\psi)+(\psi, (\mathbf{x}\cdot\nabla V+V)\psi)\leqslant\sum_{j=1}^{n}a_jb_j(\psi, \psi),$$

так что H не имеет собственных значений в интервале $\left(\sum_{j=1}^{n}a_jb_j, \infty\right)$.

Имеется связь между методами теоремы вириала и утверждением теоремы XIII.58. Например, если V отрицательно при всех x и однородно степени $-\alpha$, где $\alpha\leqslant 1$, то в окрестности бесконечности выполняются условия (ii′) и (iii′) из доказательства теоремы XIII.58, так что, пользуясь любым из методов, можно заключить, что оператор $-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений. Различие между этими двумя типами результатов состоит в том, что теорема XIII.58 требует лишь информации о поведении на бесконечности, в то время как теорема XIII.60 требует глобальных предположений.

Имеется также связь между методами теоремы вириала и нашим последним методом. Роль, которую играют в предыдущем

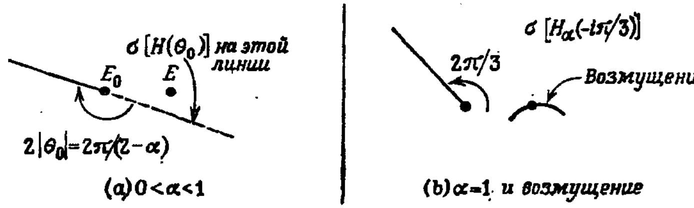


Рис. XIII.6.

изложении растяжения, наводит на мысль, что методы аналитичности по растяжению из § 10 могут иметь отношение к проблеме связанных состояний с положительной энергией. Чтобы убедиться, что это действительно так, вернемся к случаю кулоновых потенциалов.

Пример 5 (заново). Пусть H — гамильтониан n-частичных систем, все парные потенциалы которых суть однородные функции некоторой заданной степени $-\alpha$, где $0<\alpha<1$. Тогда все потенциалы аналитичны относительно растяжений; действительно,

$$U(\theta)\,VU(\theta)^{-1}=e^{-\alpha\theta}V,$$

где $U(\theta)$ — группа растяжений из § 10. Предположим, что E_0 — наибольший порог оператора H_0+V (в конце концов мы докажем, что $E_0=0$) и что $E>E_0$ — собственное значение H. В соответствии с общим анализом гамильтонианов, аналитических относительно растяжений, $H(\theta)$ будет иметь E в качестве собственного значения, коль скоро $0<\operatorname{Im}\theta<\pi$. Записывая

$$H(\theta)=e^{-2\theta}\left(H_0-e^{-(\alpha-2)(\theta-\theta_0)}V\right),$$

где $\theta_0=i\pi/(2-\alpha)$, мы заметим, что

$$H(\theta_0)=e^{-2\theta_0}(H_0-V),$$

и потому любые собственные значения оператора $H(\theta_0)$ должны иметь аргумент $2i\theta_0\neq 0$ или $\pi+2i\theta_0\neq 0$. Итак, E не может быть собственным значением оператора $H(\theta_0)$, а потому и H (см. рис. XIII.6(a)). Условие $\alpha<1$ нужно для того, чтобы гарантировать, что $\operatorname{Im}\theta_0<\pi$.

Теперь, по индукции, мы утверждаем, что $E_0=0$. В самом деле, это справедливо для двухчастичных систем, и очевидно, что если это справедливо для всех k-частичных систем с $k<n$, то по предыдущему построению все k-частичные системы с $k<n$ не имеют положительных собственных значений, а потому n-частичная система не имеет положительных порогов. Заметим, что, по предыдущему построению, можно действительно доказать, что $H(\theta)$ не имеет собственных значений в полосе $\{E\,|\,0\leqslant\arg E<2\operatorname{Im}\theta\}$ при $0>\operatorname{Im}\theta>-\pi$.

Пусть теперь V — кулонов потенциал. Пусть V_α — потенциал, получаемый заменой $|r_i - r_j|^{-1}$ на $|r_i - r_j|^{-\alpha}$. Согласно аналитической теории возмущений, если $H_0 + V$ обладает положительным собственным значением, то, скажем, для $\theta = -i\pi/3$ оператор $H_0(\theta) + V_\alpha(\theta)$ будет обладать собственным значением вблизи положительной части вещественной оси для малых разностей $\alpha - 1$. Однако по общим принципам это собственное значение не может иметь малого отрицательного аргумента при вещественных α. По предыдущему построению при вещественных α, меньших единицы, оно не может иметь и нулевого или малого положительного аргумента. Это противоречие показывает, что $H_0 + V$ не может иметь положительных собственных значений (см. рис. XIII.6(b)).

Пример 5 (продолжение, другой подход). Существует и другой путь получения результатов, которые мы только что обсудили. Он позволяет включить интервал $0 < \alpha < 2$, но требует, чтобы все потенциалы были однородными функциями одной и той же степени $-\alpha$: $H_0(\theta) = e^{-2\theta} H_0$, $V(\theta) = e^{-\alpha\theta} V$. Таким образом, для любого $\varphi \in Q(H_0)$ величина $(\varphi, H_0(\theta)\varphi)$ имеет аргумент, равный $2\pi - 2\,\mathrm{Im}\,\theta$, в то время как $(\varphi, V(\theta)\varphi)$ — аргумент $2\pi - \alpha\,\mathrm{Im}\,\theta$ или $\pi - \alpha\,\mathrm{Im}\,\theta$. Итак, поскольку $\alpha < 2$, то аргумент $(\varphi, H(\theta)\varphi)$ лежит между $\pi - \alpha\,\mathrm{Im}\,\theta$ и $2\pi - \alpha\,\mathrm{Im}\,\theta$ для малых и положительных $\mathrm{Im}\,\theta$. В частности, $(\varphi, H(\theta)\varphi)$ не может иметь нулевого аргумента, а потому $H(\theta)\varphi$ не может равняться $E\varphi$ с $E > 0$. Поскольку $H(\theta)$ не может иметь положительных собственных значений, то этим свойством обладает и H.

Одна черта предыдущего построения особенно интересна: существует разница между положительными и отрицательными собственными значениями, как и должно быть в соответствии с примером 4. Эта разница сказывается при $\mathrm{Im}\,\theta = \pm\pi/2$. При $|\mathrm{Im}\,\theta| < \pi/2$ любое собственное значение H в непороговой точке есть дискретное собственное значение $H(\theta)$. Когда $\mathrm{Im}\,\theta$ стремится к $\pm\pi/2$, непрерывный спектр приближается к отрицательным собственным значениям, так что мы не можем утверждать, что эти собственные значения остаются и при $\mathrm{Im}\,\theta > \pi/2$ (и, в частности, при $\theta = \theta_0$). Но положительные собственные значения лежат вне непрерывного спектра при $|\mathrm{Im}\,\theta| \in (0, \pi)$. Это различие наводит на мысль, что потенциалы, аналитические относительно растяжений и допускающие продолжение вплоть до $\mathrm{Im}\,\theta = \pi/2$, должны обладать специфическими свойствами. Поэтому введем такое

Определение. Будем говорить, что «потенциал» V лежит в $\mathcal{F}_{\pi/2}$, тогда и только тогда, когда

(1) V — квадратичная форма с областью определения $D(-\Delta)$;

(2) величина $(-\Delta + 1)^{-1/2}[U(\theta) V U(\theta)^{-1}](-\Delta + 1)^{-1/2}$, опреде-

ляемая как оператор при $\theta \in \mathbb{R}$, есть сужение на вещественную ось компактной операторнозначной функции, аналитической в полосе $|\operatorname{Im}\theta| < \pi/2$ и непрерывной по норме в полосе $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant \pi/2$.

Как мы увидим, $\bar{\mathcal{F}}_{\pi/2}$ включает потенциалы Кулона и Юкавы. Скоро мы докажем, что никакая N-частичная система, все парные потенциалы которой лежат в $\bar{\mathcal{F}}_{\pi/2}$, не имеет положительных собственных значений. Для этого нам понадобится теорема из комплексного анализа, связанная с теоремой XII.18.

Лемма (теорема Карлсона). Предположим, что f — комплекснозначная функция, определенная и непрерывная на полуплоскости $\{z \mid \operatorname{Re} z \geqslant 0\}$ и аналитическая в $\{z \mid \operatorname{Re} z > 0\}$. Предположим, что

$$|f(z)| \leqslant M e^{A|z|} \quad \text{для всех } z \text{ с } \operatorname{Re} z \geqslant 0, \tag{98a}$$

$$|f(iy)| \leqslant M e^{-B|y|} \quad \text{для всех } y \in \mathbb{R}, \tag{98b}$$

где $B > 0$. Тогда f — тождественный нуль.

Доказательство. Докажем сначала несколько усиленный вариант принципа максимума, называемый **принципом Фрагмена — Линделёфа**. Предположим, что функция g аналитична в клине

$$N = \{re^{i\theta} \mid r > 0,\ \alpha < \theta < \beta\},$$

непрерывна в $\bar{N}$ и что $\beta - \alpha < \pi$. Тогда, если $|g(z)| \leqslant C_1 \exp(C_2|z|)$ в $\bar{N}$, имеем

$$|g(z)| \leqslant \sup_{y \geqslant 0} \{|g(ye^{i\alpha})|,\ |g(ye^{i\beta})|\} \equiv D.$$

Чтобы доказать это, предположим сначала без потери общности, что $\beta < {}^1/_2\pi\mu^{-1}$, $\alpha > -{}^1/_2\pi\mu^{-1}$, где $\mu > 1$. Пусть $g_\varepsilon(z) = g(z)\exp(-\varepsilon z^\mu)$. Тогда $g_\varepsilon \to 0$ при $|z| \to \infty$ в $\bar{N}$, так что по обычному принципу максимума $g_\varepsilon(z)$ принимает свое наибольшее значение на ∂N. Итак, $|g_\varepsilon(z)| \leqslant D$ для любого ε. Переходя к пределу при $\varepsilon \downarrow 0$, видим, что $|g(z)| \leqslant D$.

Предположим теперь, что f удовлетворяет (98). Пусть

$$h(z) = f(z)\exp(-iBz - Az).$$

Тогда $|h(z)| \leqslant M$, если $|\arg z| = 0$ или $\pi/2$ и $|h(z)| \leqslant M\exp((A+B)|z|)$ для всех z. Итак, по принципу Фрагмена — Линделёфа, $|h(z)| \leqslant M$, если $0 \leqslant \arg z \leqslant \pi/2$. Отсюда следует, что

$$|f(z)| \leqslant M\exp(A|z|\cos\theta - B|z||\sin\theta|), \quad \theta = \arg z, \tag{99}$$

для $0 \leqslant \theta \leqslant \pi/2$ и аналогично для $0 \geqslant \theta \geqslant -\pi/2$.

Теперь рассмотрим функцию $g(x)=f(ix)$ при вещественных x, и пусть $\hat{g}$ — ее фурье-образ. Согласно (99),

$$|g(x-iy)| \leqslant M \exp(A|y|), \quad y>0,$$

так что соображения, основанные на теоремах Пэли — Винера, показывают, что $\hat{g}(k)=0$, если $k<-A$. Поскольку $|g(x)| \leqslant \leqslant M \exp(-\beta|x|)$, из этих же соображений следует, что функция $\hat{g}$ аналитична в окрестности вещественной оси. Отсюда вытекает, что g есть тождественный нуль, поэтому и f — нуль. ∎

Теорема XIII.61 (теорема Балслева — Саймона). Пусть H есть N-частичный оператор Шредингера в $L^2(\mathbb{R}^{nN-n})$, полученный путем отделения движения центра масс из оператора

$$\tilde{H}=-\sum_{i=1}^{N}(2m_i)^{-1}\Delta_i+\sum_{i\neq j}V_{ij}(r_i-r_j),$$

где каждый потенциал V_{ij} есть форма в $\mathcal{F}_{\pi/2}$, причем локальная (т. е. форма, порождаемая оператором умножения) и симметрическая. Тогда H не имеет собственных значений в $(0, \infty)$.

Доказательство. Как и в примере 5 (заново), если нам удастся доказать, что H не имеет положительных собственных значений при дополнительном предположении, что у H нет положительных порогов, то по индукции можно будет доказать это утверждение и без дополнительного предположения.

Если H не имеет положительных порогов и $E>0$ — собственное значение, то E будет и собственным значением операторов $H(\theta)$ при $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant \pi/2$, а проектор

$$P(\theta)=-\frac{1}{2\pi i}\int_{|\lambda-E|=\varepsilon}(H(\theta)-\lambda)^{-1}\,d\lambda,$$

определенный при $|\operatorname{Im}\theta|>0$, будет аналитичен в полосе $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant \pi/2$ и равен спектральному проектору $P_{\{E\}}(H)$ при $\theta=0$. Итак, по лемме О'Коннора (предложению, следующему за теоремой XIII.39) любой собственный вектор ψ, удовлетворяющий равенству $H\psi=E\psi$, обладает тем свойством, что $U(\theta)\psi$ продолжается до функции, аналитической в $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta|<\pi/2\}=N$ и непрерывной в $\bar{N}$. Более того, поскольку E — изолированное собственное значение операторов $H(\pm i\pi/2)$, то по доказанному в § 11 функции $U(\pm i\pi/2)\psi$ убывают экспоненциально в том смысле, что $e^{br}U(\pm i\pi/2)\psi \in L^2$ при некотором $b>0$.

Говоря нестрого, доказательство будет развиваться следующим образом. На интуитивном уровне утверждение, что ψ аналитична относительно растяжений, означает, что $\psi(x)$, рассматриваемая как функция от $r=|x|$ и $\Omega=x/|x|$, аналитична по r при фиксированном Ω в области $\operatorname{Re} r>0$, причем

$$e^{-1/2(nN-n)i\theta}(U(\theta)\psi)(r,\ \Omega)=\psi(re^{i\theta},\ \Omega).$$

Из условия $\psi\in L^2$ следует, что $\psi(z,\ \Omega)$ в какой-то мере ограничена, а из условия $U(\pm i\pi/2)\psi\in D(e^{br})$ — что $\psi(z,\ \Omega)$ убывает экспоненциально, если $\arg z=\pm\pi/2$. Но тогда $\psi=0$ по теореме Карлсона. Это рассуждение не проходит непосредственно, поскольку вся наша информация относится только к пространству L^2, однако оно поясняет идею, лежащую в основе следующего доказательства.

Фиксируем $g\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{nN-n}\diagdown\{0\})$ — функцию, носитель которой отделен от нуля; скажем, $\operatorname{supp} g\subset\{x\,|\,|x|>R\}$. При $z\in(0,\ \infty)$ определим

$$F(z)=z^{nN/2}\int\overline{g(x)}\,\psi(zx)\,d^{nN-n}x=z^{n/2}(g,\ U(\ln z)\psi).$$

Пользуясь этой формулой, можно продолжить F до функции, аналитической в области $\{z\,|\,\operatorname{Re} z>0\}$ и непрерывной в $\{z\,|\,\operatorname{Re} z\geqslant 0\}$.

Поскольку $U(\theta)$ унитарен при вещественном θ, то

$$|F(z)|\leqslant|z|^{n/2}\|g\|\sup_{|y|\leqslant\pi/2}\|U(iy)\psi\|$$

для всех z с $\operatorname{Re} z\geqslant 0$. Более того, при вещественных и положительных β

$$\begin{aligned}|F(i\beta)|&=\left|\beta^{nN/2}\int\overline{g(x)}\,[U(i\pi/2)\psi](\beta x)\,dx\right|=\\&=\beta^{n/2}\int\limits_{|x|\geqslant\beta R}\overline{g(\beta^{-1}x)}\,[U(i\pi/2)\psi](x)\,dx\leqslant\\&\leqslant e^{-\beta Rb}|\beta|^{nN/2}\|g\|\|e^{br}U(i\pi/2)\psi\|\end{aligned}$$

и аналогично для $F(-i\beta)$. Итак, по теореме Карлсона $F=0$, откуда $(g,\ \psi)=0$. Поскольку функции $g\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{nN-n}\diagdown\{0\})$ плотны в L^2, то $\psi=0$. ∎

Пример 7 (заново). Потенциал $V(r)=e^{-ar}/r$ лежит в $\mathscr{F}_{\pi/2}$ и $V_\theta(r)=e^{-\theta}r^{-1}\exp(-ae^\theta r)$. Итак, гамильтонианы примера 7 не имеют собственных значений в $(0,\ \infty)$. Этот результат лучше, чем тот, который дает теорема вириала. Однако существуют ситуации, когда метод вириала дает информацию, а теорема XIII.61 нет. Например, если $V(r)=be^{-ar}$ с $b>0$, то оператор $-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений по теореме вириала, но V *не* лежит в $\mathscr{F}_{\pi/2}$, поскольку $\exp(-ae^\theta r)$ не является относительно компактным оператором умножения, так что $V_\theta(r)$ не может обладать непрерывным *по норме* продолжением вплоть до $\{\theta\,|\,|\operatorname{Im}\theta|=\pi/2\}$.

Пример 8. Если каждый потенциал V_{ij} однороден степени β_{ij}, причем $0 < \beta_{ij} < 2$, то оператор $\tilde{H} = -\sum_{i=1}^{n} \Delta_i + \sum_{i<j} V_{ij}$ обладает тем свойством, что после отделения движения центра масс у него нет связанных состояний с положительной энергией. Этот результат нельзя получить методом теоремы вириала, хотя он и разумен с точки зрения этой теоремы.

В предыдущем мы занимались операторами Шредингера, но те же идеи применимы и в других ситуациях. Так, при исследовании акустического рассеяния по методу Лакса — Филлипса (§ XI.11) мы нуждались в следующем результате.

Теорема XIII.62. Пусть σ и λ — вещественные C^2-функции на $\mathbb{R}^3$, такие, что $\sigma(x) > 0$, $\lambda(x) > 0$ и функции $\sigma_0 - \sigma(x)$ и $\lambda_0 - \lambda(x)$ имеют компактные носители при некоторых константах σ_0 и λ_0. Пусть H — самосопряженный оператор в $L^2(\mathbb{R}^3)$, получаемый замыканием квадратичной формы

$$q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla(\lambda f)|^2 \sigma\, dx,$$

заданной на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Тогда H не имеет собственных значений.

Доказательство. Очевидно, для некоторого $a > 0$ функция $\sigma(x) \geqslant a$ для всех x. Таким образом, для $f \in D(H)$

$$(Hf, f) = q(f, f) \geqslant a \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla(\lambda f)|^2 dx \geqslant 0.$$

Итак, H не имеет отрицательных собственных значений, а если $Hf = 0$, то $\lambda f = 0$, откуда следует, что $f = 0$, так что и нуль не может быть собственным значением. Остается исключить строго положительные собственные значения.

Предположим, что $E > 0$ и что $Hf = Ef$. Пусть B_R — шар радиуса R, содержащий носители функций $\sigma_0 - \sigma(x)$ и $\lambda_0 - \lambda(x)$. Тогда на $\Omega = \mathbb{R}^3 \setminus B_R$ функция f удовлетворяет уравнению

$$-\Delta f = (\lambda_0^2 \sigma_0)^{-1} Ef,$$

а потому f обращается на Ω в нуль в соответствии с рассуждением, предшествующим теореме XIII.57. Итак, чтобы заключить, что f есть нуль, нам нужна теорема об однозначном продолжении для H. Но, поскольку $Hf = Ef$, имеем

$$(\Delta f)(x) = \alpha(x) f(x) + \beta(x) \cdot \nabla f(x)$$

для подходящих ограниченных функций $\alpha(x)$ и $\beta(x)$, так что

$$|(\Delta f)(x)| \leqslant M(|f(x)| + |\nabla f(x)|).$$

С помощью несложного обобщения методов из дополнения к этому разделу (см. задачу 113) можно показать, что теорема об однозначном продолжении для таких неравенств существует. ■

Дополнение к § XIII.13. Теоремы об однозначном продолжении решений уравнений Шредингера

В этом дополнении мы докажем теорему XIII.57. На самом деле мы докажем следующий более сильный результат.

Теорема XIII.63. Пусть $u \in H^2_{\mathrm{loc}}$, т. е. $\varphi u \in D(-\Delta)$ для каждого $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Пусть D — открытое связное множество в $\mathbb{R}^n$, и предположим, что

$$|\Delta u(x)| \leqslant M\,|u(x)|$$

почти всюду на D. Тогда, если u обращается в нуль в окрестности одной точки $x_0 \in D$, то u — тождественный нуль в D.

Доказательство этого результата, которое мы дадим только для $n=3$ (см. задачи 111, 112 для случая произвольного n), основано на следующей замечательной оценке для C^∞-функции f с носителем в $\{x \mid 0<|x|<R\}$:

$$\int |x|^\alpha |f(x)|^2\, d^3x \leqslant {}^4/_9 R^4 \int |x|^\alpha\, |\Delta f|^2\, d^3x \tag{100}$$

для *всех* вещественных α. Мы докажем (100), применяя разложение f по парциальным волнам:

$$f(x) = \sum_{l,\,m} f_{lm}(|x|)\, Y_{lm}(\Omega_x),$$

явно описанное ниже. Итак, начнем с доказательства аналога оценки (100) для каждой парциальной волны.

Лемма 1. Пусть f есть C^∞-функция с носителем в $(0, 1)$. Для каждого $l=0, 1, 2, \ldots$ определим

$$g_l = -f'' + \frac{l(l+1)}{x^2} f.$$

Тогда для *любого* вещественного α

$$\int_0^1 x^\alpha |f(x)|^2\, dx \leqslant {}^4/_9 (2l+1)^{-2} \int_0^1 x^\alpha |g_l(x)|^2\, dx.$$

Доказательство. Фиксируем l, и пусть D обозначает формальный дифференциальный оператор $-d^2/dx^2 + l(l+1)/x^2$. Тогда формально $Dh_+ = Dh_- = 0$ где $h_+(x) = x^{l+1}$ и $h_-(x) = x^{-l}$. Далее, поскольку f обращается в нуль около нуля и единицы, можно свободно интегрировать по частям выражения $\int fDh_{\pm}=0$ и заключить, что

$$\int_0^1 g_l(x)\,h_{\pm}(x)\,dx=0. \tag{101}$$

Тогда, полагая $g=g_l$, получим

$$f(x)=[h_+(x)\,A(x)+h_-(x)\,B(x)]/(2l+1), \tag{102a}$$

$$A(x)=\int_x^1 g(y)\,h_-(y)\,dy, \qquad B(x)=\int_0^x g(y)\,h_+(y)\,dy. \tag{102b}$$

В самом деле, (102) суть обычные формулы вариации постоянных из теории обыкновенных дифференциальных уравнений, которые можно доказать следующим образом. Пусть $F(x)$ — правая часть (102a). Тогда $DF=g$, ибо $h_+h'_- - h'_+h_- = 2l+1$, а в силу (101) носитель F лежит строго в $(0,\ 1)$. Поскольку $D(F-f)=0$ и $F-f$ равно нулю около нуля, то $F-f=0$ всюду в силу единственности решений обыкновенных дифференциальных уравнений. Теперь мы утверждаем, что для любого β

$$|A(x)\,x^{\beta}|\leqslant\int_0^1 |x^{\beta}h_-(x)\,g(x)|\,dx, \tag{103a}$$

$$|B(x)\,x^{\beta}|\leqslant\int_0^1 |x^{\beta}h_+(x)\,g(x)|\,dx. \tag{103b}$$

Предположим, что $\beta>0$. Тогда

$$|A(x)\,x^{\beta}|\leqslant x^{\beta}\int_x^1 y^{-\beta}\,|y^{\beta}h_-(y)\,g(y)|\,dy\leqslant\int_x^1 y^{\beta}\,|h_-(y)\,g(y)|\,dy.$$

Если $\beta\leqslant 0$, перепишем A с помощью (101). Тогда

$$|A(x)\,x^{\beta}|\leqslant x^{\beta}\int_0^x y^{-\beta}\,|y^{\beta}h_-(y)\,g(y)|\,dy\leqslant\int_0^x |y^{\beta}h_-(y)\,g(y)|\,dy.$$

Это доказывает (103a). Доказательство (103b) аналогично.

Итак,

$$H(x)\equiv[x^{\alpha-2}\,|f(x)|^2]\leqslant(2l+1)^{-2}\,(|x^{\alpha/2+l}A(x)|+|x^{\alpha/2-l-1}\,B(x)|)^2\leqslant$$

$$\leqslant\frac{4}{(2l+1)^2}\left(\int_0^1 |x^{\alpha/}\; g(x)|\,dx\right)^2\leqslant\frac{4}{(2l+1)^2}\int_0^1 x_{\alpha}\,|g(x)|^2\,dx.$$

В частности,

$$\int_0^1 x^\alpha |f(x)|^2\,dx = \int_0^1 x^2 H(x)\,dx \leqslant \frac{4}{3(2l+1)^2}\int_0^1 x^\alpha |g(x)|^2\,dx. \ \blacksquare$$

Лемма 2. Пусть h принадлежит $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ и имеет носитель в $\{x \mid 0<|x|<1\}$. Тогда для любого вещественного α

$$\int |x|^\alpha |h(x)|^2\,d^3x \leqslant \frac{4}{3}\int |x|^\alpha |\Delta h(x)|^2\,d^3x.$$

Доказательство. Воспользуемся разложением по сферическим гармоникам, описанным в примере 4 дополнения к § X.1. В пространстве $L^2(S^2)$, где S^2 — единичная сфера в $\mathbb{R}^3$, существует ортонормированный базис $\{Y_{l,m}(\Omega)\}$, $l=0, 1, \ldots; m=-l, -l+1, \ldots, l-1, l$. Пусть $f\in L^2(\mathbb{R}^3)$. Определим

$$f_{l,m}(r) = r\int f(r, \Omega)\,\overline{Y_{l,m}(\Omega)}\,d\Omega.$$

Тогда при $f\in C_0^\infty$

$$rf(r, \Omega) = \sum_{l,m} f_{l,m}(r)\,Y_{l,m}(\Omega),$$

$$-r(\Delta f)(r, \Omega) = \sum_{l,m} (D_l f_{l,m})(r)\,Y_{l,m}(\Omega),$$

где $D_l = -d^2/dr^2 + l(l+1)r^{-2}$. Таким образом, учитывая ортонормальность $Y_{l,m}$ и применяя лемму 1, для h с носителем в $\{x \mid 0<|x|<1\}$ получаем

$$\int |x|^\alpha |h(x)|^2\,d^3x = \sum_{l,m}\int r^\alpha |h_{l,m}(r)|^2\,dr \leqslant$$

$$\leqslant \sum_{l,m}\frac{4}{3}(2l+1)^{-2}\int r^\alpha |(D_l h_{l,m})(r)|^2\,dr \leqslant$$

$$\leqslant \frac{4}{3}\int |x|^\alpha |\Delta h(x)|^2\,d^3x. \ \blacksquare$$

Лемма 3. Пусть $h\in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ лежит в области определения $-\Delta$ и обращается в нуль вне некоторого компактного подмножества в $\{x \mid 0<|x-a|<R\}$ с $a\in\mathbb{R}^3$ и $R>0$. Тогда

$$\int |x-a|^\alpha |h(x)|^2\,d^3x \leqslant \frac{4}{3}R^4\int |x-a|^\alpha |(\Delta h)(x)|^2\,d^3x \tag{104}$$

при *любом* вещественном α.

Доказательство. Предположим сначала, что $h\in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Тогда (104) вытекает из леммы 2 после простой замены переменных $y=(x-a)/R$. Имея (104) для всех $h\in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ с требуемыми свойствами носителя, можно доказать такую же оценку для всех $h \in D(-\Delta)$, используя аппроксимативную единицу. ∎

Доказательство теоремы XIII.63. Для каждого $x \in D$ положим

$$R_x = \min\{(^{128}/_3 M^2)^{-1/4},\ ^1/_2 \operatorname{dist}(x, \partial D)\}.$$

Мы утверждаем, что если $u(x)$ обращается в нуль для x, лежащих около y, и удовлетворяет неравенству $|(\Delta u)(x)| \leqslant M|u(x)|$, то $u(x)$ обращается в нуль на подмножестве $\{x \mid |x-y| \leqslant R_y\}$. Предположим, что это так, и докажем, что $u \equiv 0$, если u обращается в нуль около некоторого $x_0 \in D$. Возьмем $y \in D$ и выберем некоторую гладкую кривую γ в D, соединяющую x_0 с y. Предположим, что длина γ равна L. Поскольку γ компактна, $\operatorname{dist}(x, \partial D)$ отделено от нуля на γ, так что R_x ограничено снизу на γ, скажем, величиной R_0. Выберем целое n, такое, что $^1/_2 R_0 n \geqslant L > {}^1/_2 R_0 (n-1)$, и точки $x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n = y$ на γ, причем так, чтобы длина γ между x_i и x_{i-1} $(i = 1, \ldots, n-1)$ была меньше $R_0/2$. В частности, $|x_i - x_{i-1}| \leqslant R_0/2$. Так как, по предположению, u обращается в нуль около x_0, оно обращается в нуль при $|x - x_0| < R_0$, т. е. и около x_1. Повторяя это рассуждение, убеждаемся, что $u(y) = 0$, так что $u \equiv 0$ в D.

Докажем теперь сделанное выше утверждение. Фиксируем y, и пусть χ — функция класса C_0^∞, равная 1, если $|x-y| \leqslant R_y$, и 0, если $|x-y| \geqslant {}^3/_2 R_y$. Тогда носитель χu лежит в $\{x \mid 0 < |x-y| < 2R_y\}$ и, в силу леммы 3, для любого $\beta > 0$

$$\begin{aligned}
\int\limits_{|x-y|<R_y} |x-y|^{-\beta} |u(x)|^2\,dx &\leqslant \int |x-y|^{-\beta} |(\chi u)(x)|^2\,dx \leqslant \\
&\leqslant \frac{4}{3}(2R_y)^4 \int\limits_{|x-y|<2R_y} |x-y|^{-\beta} |\Delta(\chi u)(x)|^2\,dx \leqslant \\
&\leqslant \frac{64}{3} M^2 R_y^4 \int\limits_{|x-y|<R_y} |x-y|^{-\beta} |u(x)|^2\,dx + CR_y^{-\beta} \leqslant \\
&\leqslant \frac{1}{2} \int\limits_{|x-y|<R_y} |x-y|^{-\beta} |u(x)|^2\,dx + CR_y^{-\beta},
\end{aligned}$$

где

$$C = \frac{64}{3} R_y^4 \int\limits_{R_y<|x-y|<2R_y} |\Delta(\chi u)(x)|^2\,dx$$

конечна, поскольку $\chi u \in D(-\Delta)$. Таким образом, если $R_1 < R_y$, то

$$\int\limits_{|x-y|<R_1} |u(x)|^2\,dx \leqslant R_1^\beta \int\limits_{|x-y|<R_y} |x-y|^{-\beta} |u(x)|^2\,dx \leqslant 2C\left(\frac{R_1}{R_y}\right)^\beta .$$

Устремляя β к бесконечности, получаем $\int\limits_{|x-y|\leq R_1} |u(x)|^2 dx = 0$. Это доказывает наше утверждение, а с ним и теорему. ∎

Теперь мы готовы сформулировать еще раз и доказать теорему XIII.57.

Теорема XIII.57. Пусть V — такая функция на $\mathbb{R}^n$, что

(i) оператор умножения на V — Δ-ограничен, и его относительная грань меньше 1;

(ii) существует замкнутое множество S меры нуль, такое, что $\mathbb{R}^n \setminus S$ связно и V ограничена на любом компактном подмножестве в $\mathbb{R}^n \setminus S$.

Пусть $H = -\Delta + V$ и $Hu = Eu$ при некотором E и $u \in L^2$. Предположим, что u обращается в нуль на открытом подмножестве в $\mathbb{R}^n$. Тогда u равно нулю тождественно.

Доказательство. Предположим, что u обращается в нуль около $x_0 \in \mathbb{R}^n \setminus S$. Выбирая подходящую окрестность кривой, соединяющей x_0 с некоторым $y \in \mathbb{R}^n \setminus S$, можно найти открытое связное множество $D \subset \mathbb{R}^n \setminus S$, такое, что x_0, $y \in D$ и $\bar{D}$ компактно в $\mathbb{R}^n \setminus S$. Поскольку V ограничено на D, скажем, числом M_0 и $u \in D(-\Delta + V) = D(-\Delta)$, то

$$|-\Delta u| \leq (M_0 + |E|)|u|$$

на D и u обращается в нуль на D в силу теоремы XIII.63. Теперь ясно, что u равно нулю и на $\mathbb{R}^n \setminus S$. ∎

XIII.14. Критерии компактности и операторы с компактной резольвентой

В большей части этой главы мы изучали непрерывный спектр самосопряженных операторов, особенно операторов Шредингера, с потенциалами, убывающими на бесконечности. Напротив, в этом разделе мы сконцентрируем внимание на критериях чистой дискретности спектра оператора. Прежде всего мы покажем, что спектр полуограниченного самосопряженного оператора A чисто дискретен тогда и только тогда, когда его резольвента — компактный оператор. Для практического применения этого результата нужны критерии компактности некоторых подмножеств из L^2; эти критерии основываются на результатах Реллиха и Рисса. Затем мы применим развитую таким образом технику для обобщения теоремы XIII.16, которая позволяет доказать, что спектр оператора Шредингера с растущим на бесконечности потенциалом чисто дискретен.

Весь этот круг идей тесно связан с различными теоремами о компактных вложениях пространств Соболева, которые нужны для разнообразных приложений в теории дифференциальных уравнений с частными производными и, в частности, в теории Лакса — Филлипса (§ XI.11). В средней части этого раздела мы сформулируем ряд таких теорем.

В качестве дальнейшего применения результатов общей теории мы рассмотрим гамильтониан H статистической системы в ящике и покажем, что его спектр чисто дискретен, а $\exp(-\beta H)$ имеет след. Заканчивается этот раздел условиями, гарантирующими дискретность некоторой части спектра самосопряженного оператора.

Теорема XIII.64. Пусть A — ограниченный снизу самосопряженный оператор. Следующие условия эквивалентны:

(i) оператор $(A-\mu)^{-1}$ компактен при некотором $\mu\in\rho(A)$;

(ii) оператор $(A-\mu)^{-1}$ компактен при всех $\mu\in\rho(A)$;

(iii) множество $\{\psi\in D(A)\,|\,\|\psi\|\leqslant 1,\ \|A\psi\|\leqslant b\}$ компактно для всех b;

(iv) множество $\{\psi\in Q(A)\,|\,\|\psi\|\leqslant 1,\ (\psi,\ A\psi)\leqslant b\}$ компактно для всех b;

(v) существует ортонормированный базис $\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ в $D(A)$, такой, что $A\varphi_n=\mu_n\varphi_n$ с $\mu_1\leqslant\mu_2\leqslant\ldots$ и $\mu_n\to\infty$;

(vi) $\mu_n(A)\to\infty$, где $\mu_n(\cdot)$ — величина, даваемая принципом минимакса.

Доказательство. Будем доказывать теорему по следующей схеме: (i) $\Leftrightarrow$ (ii); (v) $\Leftrightarrow$ (vi); (v) $\Rightarrow$ (iv) $\Rightarrow$ (iii) $\Rightarrow$ (i) $\Rightarrow$ (v).

(i) $\Leftrightarrow$ (ii) В одну сторону это утверждение тривиально. Обратная импликация вытекает из первой резольвентной формулы и того факта, что множество компактных операторов образует идеал.

(v) $\Leftrightarrow$ (vi) следует прямо из принципа минимакса (теорема XIII.1).

(v) $\Rightarrow$ (iv) Пусть

$$F_b=\{\psi\in Q(A)\,|\,\|\psi\|\leqslant 1\ \ (\psi,\ A\psi)\leqslant b\}.$$

Докажем, что F_b — замкнутое множество и что для любого ε его можно покрыть конечным числом открытых шаров радиуса ε. Отсюда сразу же будет следовать его компактность (задача 114). Пусть $\psi_n\in F_b$ и $\psi_n\to\psi$. Тогда $\|\psi\|\leqslant 1$, и нам остается доказать, что $\psi\in Q(A)$ и $(\psi,\ A\psi)\leqslant b$. Ясно, что достаточно доказать неравенство $(\psi,\ AP_{(-\infty,\ \lambda)}\psi)\leqslant b$ для любого $\lambda<\infty$, где $\{P_\Omega\}$ — семейство спектральных проекторов оператора A. Но, поскольку $AP_{(-\infty,\ \lambda)}$ ограничен,

$$(\psi,\ AP_{(-\infty,\ \lambda)}\psi)=\lim_{n\to\infty}(\psi_n,\ AP_{(-\infty,\ \lambda)}\psi_n)\leqslant\lim_{n\to\infty}(\psi_n,\ A\psi_n)\leqslant b.$$

Таким образом, F_b замкнуто. Пусть теперь $-a$ есть нижняя грань A, так что $B=A+a\geqslant 0$ и $\psi\in F_b$ влечет за собой $(\psi, B\psi)\leqslant\leqslant b+a$. По заданному ε выберем такое N, что $\mu_n+a\geqslant 2\varepsilon^{-1}(b+a)$. Тогда $(\psi, B\psi)\leqslant b+a$, и из (v) вытекает, что

$$\sum_{n\geqslant N}|(\psi, \varphi_n)|^2\leqslant\varepsilon/2.$$

Таким образом, любой $\psi\in F_b$ лежит на расстоянии, не большем $\sqrt{\varepsilon/2}$, от точек единичного шара в подпространстве, порожденном векторами $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_{N-1}\}$. Поскольку этот шар можно покрыть конечным числом $\sqrt{\varepsilon/2}$-шаров, множество F_b можно покрыть конечным числом ε-шаров.

(iv) $\Rightarrow$ (iii) Множество

$$D_b=\{\psi\in D(A)\,|\,\|\psi\|\leqslant 1,\ \|A\psi\|\leqslant b\}$$

замкнуто, в чем можно убедиться, повторив рассуждения, приведенные выше. В силу неравенства Шварца, $D_b\subset F_b$, так что D_b компактно, если компактно F_b.

(iii) $\Rightarrow$ (i) Не теряя общности, можно считать, что A положителен. Пусть $M=\{\psi=(A+1)^{-1}\varphi\,|\ \|\varphi\|\leqslant 1\}$. Пусть $\psi\in M$ и $\varphi=(A+1)\psi$. Тогда

$$\|\psi\|\leqslant\|(A+1)^{-1}\|\|\varphi\|\leqslant\|\varphi\|\leqslant 1$$

и

$$\|A\psi\|\leqslant\|A(A+1)^{-1}\|\|\varphi\|\leqslant\|\varphi\|\leqslant 1,$$

так что $\psi\in D_1$. В итоге $\bar{M}\subset\bar{D}_1$, поэтому компактность D_1 влечет за собой предкомпактность M, т. е. компактность оператора $(A+1)^{-1}$.

(i) $\Rightarrow$ (v) Поскольку (i) $\Rightarrow$ (ii), можно считать, что $(A+a)^{-1}$ компактен, когда a вещественно и $-a$ равно точной нижней грани A. Поскольку $(A+a)^{-1}$ компактен, теорема Гильберта — Шмидта (теорема VI.16) гарантирует существование ортонормированного базиса $\{\varphi_n\}$, для которого $(A+a)^{-1}\varphi_n=\lambda_n\varphi_n$ и $\lambda_n\to 0$. Поскольку $(A+a)^{-1}$ положителен, $\lambda_n>0$, и можно так перенумеровать λ и φ, чтобы $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\ldots$. Взяв $\mu_n=\lambda_n^{-1}-a$, мы докажем (v). ∎

В свете условий (iii) и (iv) теоремы XIII.64 важно иметь критерий компактности подмножеств S в $L^2(\mathbb{R}^n)$. Чтобы понять основные идеи их получения, рассмотрим сначала случай, когда $\mathscr{H}=L^2(-\pi, \pi)$, а A — самосопряженное расширение $id/dx\restriction C_0^\infty(-\pi, \pi)$ с граничными условиями $\varphi(-\pi)=\varphi(\pi)$. Пусть

$$S=\{\psi\in L^2(-\pi, \pi)\,|\,\|\psi\|\leqslant 1,\ \|A\psi\|\leqslant 1\}.$$

Разлагая каждый $\psi \in S$ в ряд Фурье, можно изометрически отобразить S на

$$\hat{S} = \left\{ \{a_n\} \in l_2(-\infty, \infty) \,\middle|\, \sum_n |a_n|^2 \leqslant 1, \ \sum_n n^2 |a_n|^2 \leqslant 1 \right\}.$$

Второе условие гарантирует равномерную малость хвостов последовательностей из $\hat{S}$ и позволяет легко доказать компактность $\hat{S}$ (задача 115), а потому и компактность S. Эта ситуация напоминает теорему Асколи, где компактность носителя, равномерная ограниченность и равностепенная непрерывность вместе гарантируют компактность множества функций. В данном случае равностепенная непрерывность заменяется условием гладкости, $\|A\psi\| \leqslant 1$ для всех $\psi \in S$, которое эквивалентно условию убывания коэффициентов Фурье функций ψ. Если попытаться теперь распространить эту идею на $L^2(\mathbb{R})$, то довольно ясно, что одного условия гладкости недостаточно. В самом деле, для любой $f \in C_0^\infty(-\pi, \pi)$ множество сдвигов $f_n(x) = f(x + 2n\pi)$ не имеет сходящихся подпоследовательностей. Дело в том, что такие функции не являются равномерно малыми при больших x. Это наводит на мысль требовать при построении компактных множеств в $L^2(\mathbb{R})$ «равномерной малости» на бесконечности как самих функций, так и их фурье-образов. В сущности, это и есть условия приводимого ниже критерия Реллиха. Мы приведем краткое доказательство этого критерия, основываясь на теореме Вейля и теореме XIII.64. Набросок более длинного доказательства, основанного на изложенных только что соображениях, связанных с рядами Фурье, дан в задаче 116.

Определение. Пусть F — измеримая и неотрицательная почти всюду функция на $\mathbb{R}^n$. Будем говорить, что $F \to \infty$, тогда и только тогда, когда для любого $N > 0$ существует такое R_N, что $F(x) \geqslant N$ для почти всех x с $|x| \geqslant R_N$.

Теорема XIII.65 (критерий Реллиха). Пусть F и G — две функции на $\mathbb{R}^n$ и $F \to \infty$, $G \to \infty$. Тогда

$$S = \left\{ \psi \,\middle|\, \int |\psi(x)|^2\, dx \leqslant 1, \ \int F(x)\, |\psi(x)|^2\, dx \leqslant 1, \right.$$
$$\left. \int G(p)\, |\hat{\psi}(p)|^2\, dp \leqslant 1 \right\}$$

— компактное подмножество в $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Доказательство. Воспользуемся идеей, лежащей в основе доказательства теоремы XIII.16. Заменяя F на $\min\{F(x), x^2\}$ и поступая так же с G, можно, не теряя общности, предполагать, что $F(x) \leqslant x^2$ и $G(p) \leqslant p^2$. В результате на $Q(G(p)) \cap Q(F(x))$ можно определить оператор $A = F(x) + G(p)$ как плотно заданную сумму в смысле форм. Доказательство теоремы XIII.64 показывает, что S замкнуто. Далее, поскольку

$$S \subset \{\psi \in L^2 \mid \|\psi\| \leqslant 1,\ (\psi,\ A\psi) \leqslant 2\},$$

то, в силу эквивалентности (iv) $\Leftrightarrow$ (vi) в теореме XIII.64, достаточно доказать, что $\mu_m(A) \to \infty$ при $m \to \infty$.

Пусть теперь V — ограниченная функция с компактным носителем. Мы утверждаем, что $V(x)(G(p)+1)^{-1}$ компактен. Действительно, $(\varepsilon p^n + G(p)+1)^{-1}$ лежит в L^2, а потому $V(x)(\varepsilon p^n + G(p) + 1)^{-1}$ — оператор Гильберта — Шмидта. Более того, поскольку $G \to \infty$, $(\varepsilon p^n + G(p)+1)^{-1} \to (G(p)+1)^{-1}$ в L^∞ при $\varepsilon \downarrow 0$, так что $V(x)(G(p)+1)^{-1}$ — равномерный предел последовательности операторов Гильберта — Шмидта.

В силу теоремы Вейля (теорема XIII.14), $G(p)+V(x)$ имеет дискретный спектр в интервале $(-\infty, 0)$, так что, в частности, $\mu_m(G(p)+V(x)) \geqslant -1$ для достаточно больших m.

Для заданного $\alpha > 0$ определим V_α, полагая

$$V_\alpha(x) = \min\{F(x),\ \alpha+1\} - \alpha - 1.$$

Носитель V_α компактен, ибо $F \to \infty$. Поскольку

$$\mu_m(A) \geqslant \mu_m(G(p)+V_\alpha(x)) + \alpha + 1,$$

$\mu_m(A) \geqslant \alpha$ для достаточно больших m. Но α произвольно, и потому $\mu_m(A) \to \infty$ при $m \to \infty$. ∎

Теорема XIII.66 (критерий Рисса). Пусть $p < \infty$ и S — подмножество единичного шара $L^p(\mathbb{R}^n)_1$ в L^p. Необходимым и достаточным условием компактности в топологии нормы равномерного замыкания множества S служат следующие свойства:

(1) $f \to 0$ в смысле L^p на бесконечности равномерно в S, т. е. для любого ε существует ограниченное множество $K \subset \mathbb{R}^n$, такое, что для всех $f \in S$

$$\int_{\mathbb{R}^n \setminus K} |f(x)|^p\, dx \leqslant \varepsilon^p, \tag{105}$$

и

(2) $f(\cdot - y) \to f$ равномерно в S при $y \to 0$, т. е. для любого ε существует такое δ, что при $f \in S$ и $|y| < \delta$

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(x-y) - f(x)|^p\, dx \leqslant \varepsilon^p. \tag{106}$$

Доказательство. Предположим сначала, что $\bar{S}$ компактно. Фиксируем $\alpha > 0$. Найдем такие $f_1, \ldots, f_n$, чтобы $(\alpha/3)$-шары вокруг f_i покрывали S. Затем найдем такие K и δ, чтобы для $f = f_1, \ldots, f_n$

и $\varepsilon=\alpha/3$ выполнялись (105) и (106). Это можно сделать, ибо $\lim\limits_{K\uparrow\mathbb{R}^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n\setminus K}|g|^p\,dx=0$ и $g(\cdot-y)\to g$ для любого $g\in L^p$. Пользуясь $(\varepsilon/3)$-приемом, получаем, что (105) и (106) выполняются при $\varepsilon=\alpha$.

Обратно, предположим, что S обладает свойствами (1) и (2). Для любого компактного $\Omega\subset\mathbb{R}^n$ и конечных чисел α, β множество

$$T(\Omega,\ \alpha,\ \beta)=\{f\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)\mid \operatorname{supp} f\subset\Omega,\ \|f\|_\infty\leqslant\alpha,\ \|\nabla f\|_\infty\leqslant\beta\}$$

предкомпактно в $C(\Omega)$ по теореме Асколи и тем самым предкомпактно в $L^p(\mathbb{R}^n)$. Таким образом, при заданном ε достаточно найти такие Ω, α и β, чтобы для заданной функции $f\in S$ существовала $g\in T(\Omega,\ \alpha,\ \beta)$, для которой $\|f-g\|_p<\varepsilon$. В самом деле, если T можно покрыть конечным числом ε-шаров, то S можно покрыть конечным числом 2ε-шаров.

По заданному ε найдем такие K и δ, что для $f\in S$ и $|y|\leqslant\delta$

$$\int\limits_{\mathbb{R}^n\setminus K}|f(x)|^p\,dx\leqslant(\varepsilon/4)^p,\qquad \|f(\cdot-y)-f\|_p\leqslant\varepsilon/4.$$

Пусть носитель бесконечно дифференцируемой функции η лежит в $\{y\mid |y|<\delta\}$ и $\int\eta(x)\,dx=1$. Пусть χ — характеристическая функция множества $K'=\{y\mid \operatorname{dist}(y,\ K)<\delta\}$; $\Omega=\{y\mid \operatorname{dist}(y,K)\leqslant 2\delta\}$, $\alpha=\|\eta\|_q$, $\beta=\|\nabla\eta\|_q$, где $q=p(p-1)^{-1}$. Для $f\in S$ положим $g=\eta*(\chi f)$. Мы утверждаем, что

$$\|g-f\|_p\leqslant\varepsilon. \tag{107}$$

Более того, $g\in T(\Omega,\ \alpha,\ \beta)$, ибо $\operatorname{supp} g\subset\Omega$ и нужная оценка по норме вытекает из неравенства Юнга.

Таким образом, для доказательства компактности $\bar S$ нужно доказать только (107). Но благодаря выбору K и определению K' при $|y|<\delta$

$$\int\limits_{\mathbb{R}^n\setminus K'}|f(x-y)|^p\,dx\leqslant\int\limits_{\mathbb{R}^n\setminus K}|f(x)|^p\,dx\leqslant(\varepsilon/4)^p,$$

откуда

$$\|(\chi f)(\cdot-y)-\chi f\|_p\leqslant\|f(\cdot-y)-f\|_p+\|(1-\chi)f\|_p+$$
$$+\|[1-\chi(\cdot-y)]f(\cdot-y)\|_p\leqslant 3\varepsilon/4.$$

В итоге

$$\|\eta*\chi f-\chi f\|_p\leqslant\int\eta(y)\|(\chi f)(\cdot-y)-\chi f\|_p\,dy\leqslant 3\varepsilon/4,$$

и потому

$$\|g-f\|_p\leqslant\|g-\chi f\|_p+\|(1-\chi)f\|_p\leqslant\varepsilon. \blacksquare$$

С помощью двух последних теорем можно полностью исследовать спектр операторов Шредингера с потенциалами, растущими на бесконечности. Следующий результат усиливает теорему XIII.16.

Теорема XIII.67. Пусть $V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ ограничена снизу и растет на бесконечности. Тогда $H = -\Delta + V$, определенный как сумма квадратичных форм, есть оператор с компактной резольвентой. В частности, спектр H чисто дискретный, а множество его собственных функций образует полное семейство.

Доказательство. Ввиду теоремы XIII.64 нужно только показать, что множество

$$F_H \equiv \{\psi \in Q(H) \mid \|\psi\| \leqslant 1, \ (\psi, H\psi) \leqslant b\}$$

компактно. Поскольку, согласно рассуждениям, использованным в теореме XIII.64, это множество замкнуто, нужно только убедиться, что оно содержится в компактном множестве. Но $-\Delta$ и V положительно определены, и потому из $(\psi, H\psi) \leqslant b$ следует, что $(\psi, -\Delta\psi) \leqslant b$ и $(\psi, V\psi) \leqslant b$; значит,

$$F_H \subset \left\{\psi \,\middle|\, \|\psi\| \leqslant 1, \ \int p^2 |\hat{\psi}(p)|^2 dp \leqslant b, \ \int V(x) |\psi(x)|^2 dx \leqslant b\right\},$$

а последнее множество компактно в силу критерия Реллиха. ∎

Для обобщения этого результата на случай функций V, обладающих некоторым числом отрицательных особенностей, докажем сначала следующий простой результат теории возмущений.

Теорема XIII.68. Пусть A — полуограниченный самосопряженный оператор с компактной резольвентой. Пусть b — симметрическое ограниченное в смысле форм возмущение A с относительной гранью, строго меньшей 1. Пусть $C = A + b$ определен как сумма форм. Тогда резольвента C компактна.

Доказательство. Согласно предположению,

$$|b(\psi, \psi)| \leqslant \alpha(\psi, A\psi) + \beta(\psi, \psi)$$

с $\alpha < 1$. Тогда для любого $\psi \in Q(C) = Q(A)$

$$(\psi, C\psi) \geqslant (1-\alpha)(\psi, A\psi) - \beta(\psi, \psi).$$

Из принципа минимакса для форм (теорема XIII.2) вытекает, что

$$\mu_n(C) \geqslant (1-\alpha)\mu_n(A) - \beta.$$

Поскольку $\mu_n(A) \to \infty$, мы заключаем, что $\mu_n(C) \to \infty$, так что, в силу пункта (vi) теоремы XIII.64, резольвента C компактна. ∎

Теорема XIII.69. Пусть $n \geqslant 3$ и $V = V_1 + V_2$, где $V_2 \in L^{n/2}(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)$, $V_1 > 0$, $V_1 \to \infty$ и $V_1 \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$. Тогда $H = -\Delta + V_1 + V_2$, определенный как сумма форм, имеет компактную резольвенту.

Доказательство. В силу теоремы Стрихартца для форм (задача 119), V_2 ограничен в смысле форм относительно $-\Delta$ с нулевой относительной гранью. Далее, поскольку V_1 положителен, V_2 является $(-\Delta+V_1)$-ограниченным в смысле форм с нулевой относительной гранью. Нужный результат теперь следует из теорем XIII.67 и XIII.68. ∎

В результате проведенного обсуждения у нас есть полное качественное описание спектра $-\Delta+V$ при $V \to \infty$. Что еще можно узнать в рамках общего подхода? Точные собственные значения $\lambda_n(V) \equiv \mu_n(-\Delta+V)$ и соответствующие собственные функции $\psi_n(x)$, безусловно, зависят от деталей поведения V и изменяются при локальном изменении V, но можно надеяться, что качественное поведение $\lambda_n(V)$ при $n \to \infty$ и $\psi_n(x)$ при $x \to \infty$ зависит только от качественного поведения V при $x \to \infty$. Поведение собственных значений мы будем изучать в § 15. Поведение же $\psi_n(x)$ при $x \to \infty$ мы изучим сейчас, основываясь на методах § 11.

Теорема XIII.70. Пусть H удовлетворяет условиям теоремы XIII.69. Тогда любая собственная функция $\psi(x)$ оператора H принадлежит $D(e^{a|x|})$ при любом $a>0$. Если $V \geqslant 0$, то для любого $a>0$ существует такое C, что

$$|\psi(x)| \leqslant Ce^{-a|x|}.$$

Доказательство. Так же как при доказательстве теоремы XIII.39, для доказательства того, что $\psi \in D(\exp(a|x|))$ при всех $a>0$, достаточно убедиться в том, что ψ есть аналитический вектор для $W(\alpha)=e^{i\alpha x_j}$ при каждом j. Так же как и в той теореме,

$$W(\alpha)HW(\alpha)^{-1} = -\sum_{i \neq j} \partial_i^2 + (i\partial_j+\alpha)^2 + V \tag{108}$$

для вещественных α. Правая часть (108) задает целое аналитическое семейство типа (B) (см. § XII.2) для всех комплексных α. Поскольку резольвента $(H(\alpha)-\lambda)^{-1}$ компактна для вещественных α, она компактна и для всех α. Более того, так же как это было в доказательстве теоремы XIII.39, $H(\alpha)$ обладает локально постоянным спектром. С помощью компактности резольвенты легко убедиться, что спектр $H(\alpha)$ не зависит от α (задача 121), так что в силу леммы О'Коннора все его собственные функции суть целые функции α. Это доказывает первое утверждение.

Предположим теперь, что V положительна. Фиксируем k и для всех $a \in \mathbb{R}$ положим

$$H_0(a) = (i\partial_k - ia)^2 - \sum_{j \neq k} \partial_j^2 = e^{ax_k}H_0e^{-ax_k}.$$

Тогда $\exp(-tH_0(a))$ обладает ядром вида $(4\pi t)^{-n/2}e^{ax_k}e^{-|x-y|^2/4t}e^{-ay_k}$ и, следовательно, сохраняет положительность. Более того, поскольку это ядро как функция разности $x-y$ лежит в L^2, из неравенства Юнга получаем, что для любого $t>0$

$$\| e^{-tH_0(a)}\psi\|_\infty \leqslant C_{a,t}\|\psi\|_2. \tag{109}$$

Пусть теперь V_n — монотонно возрастающая последовательность ограниченных операторов умножения, такая, что $V_n \uparrow V$. Тогда $H_0(a)+V_n$ сходится к $H_0(a)+V$ в сильном резольвентном смысле (теорема о монотонной сходимости форм), и потому

$$e^{-t(H_0(a)+V)} = \operatorname*{s-lim}_{n\to\infty} \operatorname*{s-lim}_{m\to\infty} [e^{-tH_0(a)/m}e^{-tV_n/m}]^m.$$

Поскольку $\exp(-tH_0(a)/m)$ сохраняет положительность и $0\leqslant e^{-tV_n/m}\leqslant 1$ то поточечно почти всюду

$$|e^{-t(H_0(a)+V)}f|\leqslant e^{-tH_0(a)}|f|.$$

Но, в силу (109), $\exp(-tH_0(a))|f|\in L^\infty$. Таким образом, $\exp(-t(H_0(a)+V))f\in L^\infty$ для любой $f\in L^2$, и, в частности собственные функции $H_0(a)+V$ лежат в L^∞. Но если ψ — собственная функция H_0+V, то $e^{ax_k}\psi$ — собственная функция $H_0(a)+V$. В итоге $e^{ax_k}\psi\in L^\infty$ для всех a, что доказывает второе утверждение теоремы. ∎

Известно, что собственные функции $-\Delta+x^2$ суть функции Эрмита, и потому полученный результат, который говорит лишь об убывании более быстром, чем экспоненциальное, далек от оптимального. В случае достаточно быстрого роста V на бесконечности можно ожидать более сильных результатов. Прежде всего можно просто еще немного обобщить метод Комба — Томаса:

Теорема XIII.71. Пусть V имеет вид, указанный в теореме XIII.69, и $W(x)=\int_0^{|x|}\sqrt{V_0(s)}\,ds$, где $V_0(r)=\operatorname*{ess\,inf}_{|x|=r} V_1(x)$. Тогда любая собственная функция ψ оператора $-\Delta+V$ лежит в $D(\exp(^1/_2\beta W(x)))$ для любого $\beta<\sqrt{5}-1$.

Доказательство. Пусть $U(\alpha)\doteq\exp(i\alpha W(x))$. Тогда

$$U(\alpha)(-\Delta)U(\alpha)^{-1}=(i\nabla+\alpha\nabla W)^2=$$
$$=-\Delta+\alpha^2(\nabla W)^2+\alpha(\nabla W)\cdot(i\nabla)+\alpha(i\nabla)\cdot(\nabla W).$$

Но $|\nabla W|=V_0^{1/2}\leqslant V_1^{1/2}$; поэтому

$$\alpha^2(\nabla W)^2\leqslant\alpha^2(-\Delta+V_2+C)+\alpha^2(\nabla W)^2\leqslant\alpha^2(-\Delta+V+\text{const})$$

и

$$\pm[\alpha(\nabla W)\cdot(i\nabla)+\alpha(i\nabla)\cdot\nabla W]\leqslant(|\alpha|+\varepsilon)(-\Delta+V+\text{const}),$$

так что $U(\alpha)(-\Delta+V)U(\alpha)^{-1}$ продолжается до аналитического семейства в области $|\alpha|^2+|\alpha|<1$. Теперь нужный результат получается простым повторением доказательства последней теоремы. ∎

Совершенно другими методами можно получить следующую более точную оценку (по поводу доказательства см. ссылки в Замечаниях).

Теорема XIII.72. Пусть V — положительная C^∞-функция на $\mathbb{R}^n$ и $H=-\Delta+V$. Пусть ψ — собственная функция H. Тогда

(a) если $V(x)\geqslant c|x|^{2n}-d$ при некоторых c и d, то для любого $\varepsilon>0$ существует такое D, что при всех x

$$|\psi(x)|\leqslant D\exp\left(-(n+1)^{-1}(c-\varepsilon)^{1/2}|x|^{n+1}\right);$$

(b) если $V(x)\leqslant c|x|^{2n}+d$ при некоторых c и d и ψ — основное состояние, то для любого $\varepsilon>0$ существует такое $E>0$, что

$$\psi(x)\geqslant E\exp\left(-(n+1)^{-1}(c+\varepsilon)^{1/2}|x|^{n+1}\right).$$

Результаты двух последних теорем можно интерпретировать с точки зрения ВКБ-приближения:

$$\psi\sim\exp\left(-\int\sqrt{V-E}\,dx\right).$$

* * *

Займемся теперь обсуждением теорем о компактных вложениях пространств Соболева. Имеются по крайней мере две естественные возможности.

Определение. Пусть $\Lambda\subset\mathbb{R}^n$ — открытое множество, $H^m(\Lambda)$ — множество функций $f\in L^2(\Lambda)$ с обобщенными производными $D^\alpha f$, лежащими в $L^2(\Lambda)$ для всех α с $|\alpha|\leqslant m$. Снабженное нормой

$$\|f\|_m=\Big(\sum_{|\alpha|\leqslant m}\|D^\alpha f\|_2^2\Big)^{1/2},$$

$H^m(\Lambda)$ становится гильбертовым пространством. Пусть $H_0^m(\Lambda)$ по определению есть пополнение $C_0^\infty(\Lambda)$ по норме $\|\cdot\|_m$. Пространства $H^m(\Lambda)$ и $H_0^m(\Lambda)$ называются **локальными пространствами Соболева.**

В общем случае $H_0^m(\Lambda)$ — собственное подпространство в $H^m(\Lambda)$.

Пример 1. Пусть $\Lambda=(0,1)\subset\mathbb{R}$, $g(x)=e^x$ и $f\in C_0^\infty(\Lambda)$. Естественное скалярное произведение на $H^1(\Lambda)$ элементов g и f обращается в нуль:

$$(g,f)_1=\left(\left(-\frac{d^2}{dx^2}+1\right)g,\ f\right)_{L^2}=0.$$

Таким образом, $H_0^1(\Lambda)\subset\{g\}^\perp$ и $H_0^1(\Lambda)\neq H^1(\Lambda)$.

Читателю, знакомому с теорией самосопряженных расширений (§ X.1), полезно обратить внимание на связь примера 1 с тем фактом, что $-d^2/dx^2$ не является в существенном самосопряженным на $C_0^\infty(0, 1)$. На самом деле, пользуясь тем фактом, что $-\Delta$ не самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\Lambda)$ при *ограниченной* области Λ, можно показать, что $H_0^1(\Lambda)$ всегда отличен от $H^1(\Lambda)$ для *ограниченной* Λ. Отметим, что

$$H_0^m(\mathbb{R}^n) = H^m(\mathbb{R}^n) = D((-\Delta)^{m/2}).$$

Существует много соотношений включения между введенными пространствами Соболева.

Предложение. Пусть Λ и Λ' — открытые множества и $\Lambda \subset \Lambda'$. Предположим, что $m \geqslant j \geqslant 0$. Тогда

(a) $H_0^m(\Lambda) \subset H^m(\Lambda)$;
(b) $H^m(\Lambda) \subset H^j(\Lambda)$;
(c) $H_0^m(\Lambda) \subset H_0^j(\Lambda)$.
(d) Пусть $f \in H(\Lambda')$. Тогда $f \restriction \Lambda$, сужение f на Λ, лежит в $H^m(\Lambda)$.
(e) Если $f \in H^m(\Lambda)$ и $f = 0$ на $\Lambda \diagdown C$, где C — компактное подмножество Λ, то $f \in H_0^m(\Lambda)$.
(f) Если $f \in D((-\Delta)^{m/2})$, где $-\Delta$ означает оператор на $L^2(\mathbb{R}^n)$, то $(f \restriction \Lambda) \in H^m(\Lambda)$.

При всех описанных включениях норма не возрастает.

Доказательство. (a), (b) и (d) немедленно вытекают из определений. (c) получается путем применения неравенств для норм, неявно содержащихся в (b), и пополнения $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. (e) доказывается с помощью элементарных соображений, основанных на использовании «аппроксимации единицы», а (f) — путем оценки каждого члена в $\|f\|_{H^m(\mathbb{R}^n)}$ через $\|(-\Delta)^{m/2} f\|_{L^2}$ и $\|f\|_{L^2}$ при помощи преобразования Фурье. ∎

Докажем теперь два несложных утверждения о компактности.

Теорема XIII.73. Пусть A — расширение по Фридрихсу оператора $-\Delta$ на $C_0^\infty(\Lambda)$ (лапласиана Дирихле). Предположим, что Λ — ограниченная область. Тогда

(a) $H_0^m(\Lambda) \subset D(A^{m/2})$ и нормы эквивалентны;
(b) если $m > j$, то единичный шар в $H_0^m(\Lambda)$ компактен в $H_0^j(\Lambda)$.

Доказательство. Пусть $f \in C_0^\infty(\Lambda)$. Тогда $\|f\|_m$ и $\|(-\Delta)^{m/2} f\|$ — эквивалентные нормы, поскольку f можно считать элементом L^2, а тогда для производных f справедливы равенства $\mathcal{F}(D^\alpha f) = (ik)^\alpha \hat{f}$ и

$$k^{2m} \leqslant C_1 \sum_{|\alpha| \leqslant m} (k^\alpha)^2 \leqslant C_2 (k^{2m} + 1).$$

Теперь ясно, что $C_0^\infty(\Lambda)\subset D(A^n)$ для всех n и $A^n f=(-\Delta)^n f$, откуда

$$\|(-\Delta)^{m/2}f\|^2=(f,\ (-\Delta)^m f)=(f,\ A^m f)=\|A^{m/2}f\|^2.$$

В результате пополнение C_0^∞ по норме $\|\cdot\|_m$ лежит в $D(A^{m/2})$.

Далее мы утверждаем, что A — оператор с компактной резольвентой. Ясно, что для доказательства компактности в $L^2(\Lambda)$ множества $F_b\equiv\{\psi\in Q(A)\mid \|\psi\|\leqslant 1,\ (\psi,\ A\psi)\leqslant b\}$ достаточно доказать, что оно входит в некоторое компактное подмножество в $L^2(\mathbb{R}^n)$. Но так же, как и выше, $Q(A)\subset Q(-\Delta)$ с $(\psi,\ A\psi)=$ $=(\psi,\ -\Delta\psi)$, где $-\Delta$ есть обычный оператор на $L^2(\mathbb{R}^n)$. Пусть F — любая функция, равная 1 на Λ и такая, что $F\to\infty$. Тогда

$$F_b\subset\{\psi\in L^2(\mathbb{R}^n)\mid \|\psi\|\leqslant 1,\ (\psi,\ -\Delta\psi)\leqslant b,\ (\psi,\ F\psi)\leqslant 1\},$$

так что, в силу теоремы XIII.65, F_b содержится в компактном подмножестве в $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Поскольку $(A+1)^{-1}$ компактен как оператор из $L^2(\Lambda)$ в $L^2(\Lambda)$, он компактен как оператор из $D(A^{m/2})$ в $D(A^{m/2})$ для любого m, ибо унитарное преобразование $(A+1)^{-m/2}$ из $L^2(\Lambda)$ в $D(A^{m/2})$ коммутирует с $(A+1)^{-1}$. Поскольку компактен $(A+1)^{-1}$, таков же и $(A+1)^{-1/2}$; таким образом, единичный шар из $D(A^{(m+1)/2})$ компактен в $D(A^{m/2})$ и, так как $H_0^l(\Lambda)$ — подмножество в $D(A^{l/2})$, утверждение о компактности H_0^l доказано. ∎

Предупредим читателя, что, хотя $H_0^1(\Lambda)=D(A^{1/2})$ просто по определению A, $H_0^m(\Lambda)$ не совпадает с $D(A^{m/2})$ при $m>1$.

Следствие. Пусть Ω — ограниченное множество в $\mathbb{R}^n$. Резольвента лапласиана Дирихле $-\Delta_D^\Omega$ компактна.

Доказательство. В силу теоремы XIII.73, множество

$$\{\psi\in Q(-\Delta_D^\Omega)\mid(\psi,\ -\Delta_D^\Omega\psi)\leqslant 1 \text{ и } \|\psi\|\leqslant 1\}$$

компактно в $L^2(\Omega)$, так что нужный результат вытекает из теоремы XIII.64. ∎

Лемма. Пусть Λ — ограниченное открытое множество, а Λ' открыто и таково, что $\bar\Lambda\subset\Lambda'$. Тогда существует $\eta\in C_0^\infty(\Lambda')$ с $\eta\equiv 1$ на Λ.

Доказательство. Для любого $x\in\bar\Lambda$ найдем такое $r_x>0$, чтобы шар радиуса $2r_x$ с центром в x лежал в Λ'. В силу компактности, $\bar\Lambda$ можно покрыть конечным числом шаров $B_1,\ \ldots,\ B_m$ радиусов r_{x_i}. Найдем обычным способом функции $\eta_i\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ с носителями в шарах радиусов $2r_{x_i}$ с центрами в x_i и равные 1 на B_i. Остается положить $\eta=1-\prod_{i=1}^{m}(1-\eta_i)$. ∎

Теорема XIII.74. Пусть Λ — ограниченное открытое множество, а Λ' открыто и таково, что $\overline{\Lambda} \subset \Lambda'$. Пусть $m > j$. Тогда отображение $H^m(\Lambda')$ в $H^j(\Lambda)$, определяемое сужением, компактно.

Доказательство. Возьмем функцию $\eta \in C_0^\infty(\Lambda')$, равную 1 на Λ. Для заданной последовательности $\{f_k\}$ в $H^m(\Lambda')$ с $\|f_k\|_m \leqslant 1$ положим $g_k = \eta f_k$. Легко видеть, что $\|g_k\|_m \leqslant c$ с некоторым фиксированным c. Более того, каждая функция g_k лежит в $H_0^m(\Lambda')$. Значит, можно выбрать подпоследовательность $g_{k(i)}$, сходящуюся в $H_0^j(\Lambda')$. Но тогда последовательность $g_{k(i)} \restriction \Lambda \equiv f_{k(i)} \restriction \Lambda$ сходится в $H^j(\Lambda)$. ∎

Следствие 1. Пусть $-\Delta$ действует на $\mathbb{R}^m$ и $\{u_n\}$ — последовательность функций из $Q(-\Delta)$, удовлетворяющая неравенствам $\|\nabla u_n\| \leqslant c$, $\|u_n\| \leqslant c$ с некоторым c. Тогда для любого заданного $R > 0$ существует подпоследовательность в $\{u_n\}$, сходящаяся по норме $\left(\int\limits_{|x| \leqslant R} |v(x)|^2 dx\right)^{1/2}$. Аналогично, если задана последовательность $u_n \in D(-\Delta)$, такая, что $\|\nabla u_n\| \leqslant c$, $\|-\Delta u_n\| \leqslant c$, то в ней существует подпоследовательность, сходящаяся по полунорме $\left(\int\limits_{|x| \leqslant R} |\nabla v(x)|^2 dx\right)^{1/2}$.

Доказательство. Выберем $\Lambda = \{x \mid |x| \leqslant R\}$ и $\Lambda' = \mathbb{R}^m$. Поскольку $Q(-\Delta) = H^1(\mathbb{R}^m)$ и $\|u\|_{H^1(\mathbb{R}^m)} \leqslant \|\nabla u\|_{L^2} + \|u\|_{L^2}$, первое утверждение следует из теоремы XIII.74. Второе выводится из первого, если заметить, что $\|\nabla \partial_i u\| \leqslant \|\Delta u\|$, ибо в таком случае можно перейти к фурье-образу и воспользоваться тем, что $\sum\limits_j (k_j k_i)^2 \leqslant k^4$. ∎

Приведенное следствие применяется при изучении рассеяния в неоднородных средах методом Лакса — Филлипса (§ XI.11). При изучении рассеяния на препятствии с граничными условиями Дирихле вместо него полезно другое следствие. Набросок его несколько более длинного доказательства содержится в задаче 124.

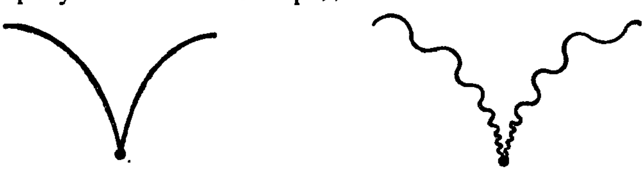
Следствие 2. Пусть K — компактное подмножество в $\mathbb{R}^m$, и пусть $-\Delta_D$ есть лапласиан Дирихле в $L^2(\mathbb{R}^m \setminus K)$. Пусть u_n — последовательность функций в $Q(-\Delta_D)$, такая, что $\|u_n\| \leqslant c$, $(u_n, (-\Delta_D) u_n) \leqslant c^2$ при некотором c. Тогда для заданного $R > 0$ в $\{u_n\}$ имеется подпоследовательность, сходящаяся по норме $\left(\int\limits_{\{x \mid |x| \leqslant R\} \setminus K} |v(x)|^2 dx\right)^{1/2}$. Аналогично, для $u_n \in D(-\Delta_D)$ с $\|-\Delta_D u_n\| \leqslant c$ и $(u_n, (-\Delta_D) u_n) \leqslant c^2$ при $m \geqslant 3$ в $\{u_n\}$ имеется подпоследовательность, сходящаяся по полунорме $\left(\int\limits_{\{x \mid |x| \leqslant R\} \setminus K} |\nabla v(x)|^2 dx\right)^{1/2}$.

Случай граничных условий Неймана более тонок.

Рис. XIII.7. Область с сегментным свойством.

Пример 2. Пусть $\Gamma_1, \ldots, \Gamma_n, \ldots$ — бесконечная последовательность непересекающихся открытых шаров, радиусы которых уменьшаются столь быстро, что $\Lambda = \bigcup \Gamma_i$ ограничено. Пусть f_i — функция, пропорциональная (с положительным коэффициентом) характеристической функции шара Γ_i, причем $\|f_i\| = 1$ в $L^2(\Lambda)$. Тогда f_i образуют ортонормированное семейство в каждом из $H^m(\Lambda)$, так что $H^m(\Lambda)$ не может быть компактно вложено в $H^j(\Lambda)$ ни при каком m или j.

Хотя приведенный пример выглядит несколько искусственным, поскольку Λ несвязно, довольно ясно, что все Γ можно соединить очень узкими «коридорами», не нарушая некомпактность вложения. Вообще, результаты о компактности вложения $H^m(\Lambda) \subset H^j(\Lambda)$ опираются на весьма тонкие геометрические свойства Λ. Сейчас мы приступим к формулировке одного из самых сильных результатов такого рода.



(a) Гладкое острие (b) Зазубренное острие

Рис. XIII.8.

Определение. Пусть Λ — ограниченное открытое множество в $\mathbb{R}^m$ и $\partial\Lambda \equiv \bar{\Lambda} \setminus \Lambda$ — его топологическая граница. Говорят, что Λ обладает сегментным свойством, если $\partial\Lambda$ допускает конечное открытое покрытие $\{O_i\}$, которому соответствуют ненулевые векторы $\{y_i\}$, такие, что $(x + ty_i) \in \Lambda$, когда $x \in \bar{\Lambda} \cap O_i$, $0 < t < 1$. Проиллюстрируем это определение некоторыми примерами в $\mathbb{R}^2$. Прежде всего ясно, что если $\partial\Lambda$ — гладкая кривая, то Λ обладает сегментным свойством точно так же как и Λ, ограниченное конечным числом гладких кривых, пересекающихся под ненулевыми углами. Дуги, изображенные на рис. XIII.7, могут даже образовать при пересечении заострение типа точки возврата, не нарушая сегментного свойства, если только заострения не слишком «зазубрены»

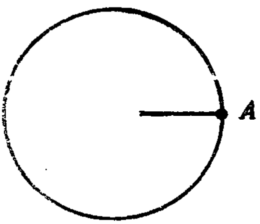


Рис. XIII.9. В точке A нарушается сегментное свойство.

(рис. XIII.8). Каноническим примером «хорошей» области, не обладающей сегментным свойством, служит круг с удаленным отрезком (см. рис. XIII.9).

Ссылки на литературу в связи со следующей теоремой о компактном вложении даны в Замечаниях.

Теорема XIII.75. Пусть Λ — ограниченное открытое множество, обладающее сегментным свойством. Тогда $H^m(\Lambda)$ компактно вкладывается в $H^j(\Lambda)$ для $m > j$.

Действуя подобно тому, как в доказательстве следствия теоремы XIII.73, немедленно получаем

Следствие 1. Пусть Ω — ограниченная открытая область в $\mathbb{R}^m$, обладающая сегментным свойством; тогда резольвента лапласиана Неймана $-\Delta_N^\Omega$ компактна.

Следствие 2. Пусть K — компактное подмножество в $\mathbb{R}^m$, а $\mathbb{R}^m \setminus K$ обладает сегментным свойством в том смысле, что этим свойством обладает $\mathcal{B}_{R_0} \setminus K$, где $\mathcal{B}_{R_0}$ — некоторый открытый шар, содержащий K. Пусть $-\Delta_N$ есть лапласиан Неймана в $L^2(\mathbb{R}^m \setminus K)$ и $u_n \in Q(-\Delta_N)$ — последовательность функций, таких, что $\|u_n\| \leqslant c$ и $(u_n, (-\Delta_N) u_n) \leqslant c^2$ при некотором c. Тогда для каждого $R > 0$ в $\{u_n\}$ имеется подпоследовательность, сходящаяся по норме $\left(\int\limits_{\{x \mid |x| \leqslant R\} \setminus K} |v(x)|^2 \, dx \right)^{1/2}$. Аналогично, если $u_n \in D(-\Delta_N)$ и $\|-\Delta_N u_n\| \leqslant c$, $(u_n, (-\Delta_N) u_n) \leqslant c^2$, то $\{u_n\}$ имеет подпоследовательность, сходящуюся по полунорме $\left(\int\limits_{\{x \mid |x| \leqslant R\} \setminus K} |\nabla v(x)|^2 \, dx \right)^{1/2}$.

В задаче 124 читателю предлагается вывести следствие 2 из теоремы XIII.75.

* * *

Другая проблема, где естественно возникают операторы с компактными резольвентами,— это описание квантовостатистических систем в ящике. Пусть Ω — ограниченное открытое подмножество в $\mathbb{R}^3$. Пусть для N-частичной системы $\Omega_N = \Omega \times \ldots \times \Omega \subset \mathbb{R}^{3N}$ и $\mathcal{H} = L^2(\Omega_N, d^{3N}x)$. Если приходится иметь дело с частицами, подчиняющимися статистике Бозе—Эйнштейна или Ферми—Дирака, то в качестве гильбертова пространства состояний системы следует брать пространство $\mathcal{H}_s$ симметричных функций или пространство $\mathcal{H}_a$ антисимметричных. Все обсуждаемые ниже результаты применимы без изменения в любом из этих случаев. Пусть H_0 — расширение по Фридрихсу оператора $-\Delta$ на $C_0^\infty(\Omega_N)$; H_0 имеет смысл оператора полной кинетической энергии. Пусть W — бесконечно малое возмущение $-\Delta$ на $\mathbb{R}^3$ в смысле форм, скажем

$W \in R$, классу Рольника, и пусть

$$V = \sum_{1 < i < j < N} W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

— оператор умножения на $\mathscr{H}$. Тогда легко показать, что V — бесконечно мало возмущение H_0 в смысле форм (задача 122). Первым шагом в изучении статистических систем является следующая

Теорема XIII.76. Резольвента оператора $H = H_0 + V$ с описанными выше H_0 и V компактна. Более того, для любого $\beta > 0$ оператор $e^{-\beta H}$ имеет конечный след.

Доказательство. Поскольку V — ограниченное возмущение в смысле форм с нулевой относительной гранью, легко показать, что для любого $\varepsilon > 0$ существует такое c, что

$$(1-\varepsilon)(H_0 - c) \leqslant H \leqslant (1+\varepsilon)(H_0 + c),$$

и потому

$$(1-\varepsilon)[\mu_n(H_0) - c] \leqslant \mu_n(H) \leqslant (1+\varepsilon)[\mu_n(H_0) + c]. \qquad (110)$$

Из (110) и теоремы XIII.64 вытекает, что резольвента H компактна тогда и только тогда, когда компактна резольвента H_0. Отметим, что $\exp(-\beta A)$ имеет конечный след тогда и только тогда, когда $\sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\beta\mu_n(A)) < \infty$. Таким образом, используя опять-таки (110), получаем, что след $\exp(-\beta H)$ конечен для всех положительных β тогда и только тогда, когда этим свойством обладает след $\exp(-\beta H_0)$. В итоге мы свели дело к случаю $V = 0$. Будем далее явно указывать зависимость H_0 от Ω_N, обозначая этот оператор через $H_0(\Omega_N)$. Поскольку, согласно определению расширения по Фридрихсу, $C_0^\infty(\Omega_N)$ — существенная область определения формы $H_0(\Omega_N)$ и поскольку $C_0^\infty(\Omega) \subset C_0^\infty(\Omega')$, если $\Omega \subset \Omega'$, мы видим, что, в силу принципа минимакса,

$$\mu_n(H_0(\Omega)) \geqslant \mu_n(H_0(\Omega')),$$

если $\Omega \subset \Omega'$. Любую область Ω_N можно вложить в ящик $\Omega' \subset \mathbb{R}^{3N}$, поэтому нужно только доказать, что

$$\sum_n \exp(-\beta\mu_n(H_0(\Omega'))) < \infty. \qquad (111)$$

Если ребра Ω' равны $l_1, \ldots, l_{3N}$, то соответствующие собственные значения равны

$$E_{m_1, \ldots, m_{3N}} = \sum_{i=1}^{3N} m_i^2 \left(\frac{\pi}{l_i}\right)^2,$$

где $m_1, \ldots, m_{3N}$ — произвольные положительные целые числа. Пусть $a = \min\{(\pi/l_i)^2 \mid i=1, \ldots, 3N\}$. Тогда $E_{m_1, \ldots, m_{3N}} \geqslant \geqslant a \sum_{i=1}^{3N} m_i^2 \geqslant a \sum_{i=1}^{3N} m_i$, так что

$$\sum_n \exp(-\beta\mu_n(H_0(\Omega'))) \leqslant \sum_{m_i \geqslant 1} \exp\left(-\beta a \sum_{i=1}^{3N} m_i\right) = \left[\sum_{m=1}^{\infty} \exp(-\beta a m)\right]^{3N} < \infty$$

в силу сходимости геометрического ряда. Это доказывает (111) и теорему. ∎

Приведенная теорема служит исходной точкой обсуждения квантовой статистической механики. Дальнейшее развитие этой темы можно найти в ссылках, приводимых в Замечаниях.

До сих пор в этом разделе мы говорили о компактности и дискретности всего спектра сразу. В заключение мы сформулируем условия на самосопряженный оператор, гарантирующие дискретность части его спектра.

Теорема XIII.77. Пусть A — самосопряженный оператор. Часть спектра A, лежащая в интервале (a, b), чисто дискретна тогда и только тогда, когда $f(A)$ компактен для любой непрерывной функции f с носителем $\operatorname{supp} f \subset (a, b)$.

Доказательство. Пусть $\operatorname{supp} f \subset [c, d]$, $a < c \leqslant d < b$. Если часть спектра оператора A в (a, b) чисто дискретна, то в $\sigma(A) \cap [c, d]$ содержится лишь конечное число точек $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, ибо в $[c, d]$ нет ни одной предельной точки $\sigma(A)$. Более того, каждый спектральный проектор $P(\lambda_i)$ конечномерен. Таким образом,

$$f(A) = \sum_{i=1}^{n} f(\lambda_i) P(\lambda_i)$$

обращается в нуль на ортогональном дополнении конечномерного пространства и потому компактен.

Обратно, пусть каждый оператор $f(A)$ с $\operatorname{supp} f \subset (a, b)$ компактен. Пусть $[c, d] \subset (a, b)$ и f — положительная непрерывная функция, такая, что $0 \leqslant f \leqslant 1$, $f(x) = 1$ при $c \leqslant x \leqslant d$ и $\operatorname{supp} f \subset (a, b)$. Тогда спектральный проектор $P([c, d])$, отвечающий $[c, d]$, обладает свойством $P([c, d]) f(A) = P([c, d])$ и потому компактен. Следовательно, его область значений конечномерна, так что любое $\lambda \in [c, d]$ лежит либо в $\rho(A)$, либо в $\sigma_{\text{disc}}(A)$. ∎

Приведем два важных следствия теоремы XIII.77.

Следствие 1. Пусть A_n — последовательность самосопряженных операторов с чисто дискретным спектром в интервале (a, b).

Пусть A_n сходится к A в равномерном резольвентном смысле. Тогда спектр A в (a, b) чисто дискретен.

Доказательство. В силу теоремы VIII.20, если f непрерывна и $\operatorname{supp} f \subset (a, b)$, то $f(A_n) \to f(A)$ по норме. Поскольку равномерный предел компактных операторов компактен, нужное утверждение вытекает из теоремы XIII.77. ∎

Следствие 2. Пусть A_n — последовательность самосопряженных операторов с $\sigma_{ess}(A_n) = [\Sigma_n, \infty)$. Предположим, что $A_n \to A$ в равномерном резольвентном смысле. Тогди Σ_n сходится при $n \to \infty$ к некоторому Σ (возможно, ∞) и $\sigma_{ess}(A) = [\Sigma, \infty)$.

Доказательство. Переходя к подпоследовательности, можно считать, что $\Sigma_n \to \Sigma$. В силу следствия 1, $\sigma_{ess}(A) \subset [\Sigma, \infty)$, а в силу теоремы VIII.23, $(\Sigma, \infty) \subset \sigma_{ess}(A)$. Таким образом, $\sigma_{ess}(A) = [\Sigma, \infty)$. В частности, $\inf \sigma_{ess}(A)$ — единственная возможная предельная точка исходной последовательности Σ_n, так что Σ_n сходится. ∎.

XIII.15. Асимптотическое распределение собственных значений

Мы знаем намного больше о силах, порождающих звуковые колебания, чем о силах, порождающих световые. Задача определения звуковых тонов, излучаемых колеблющейся системой, иногда разрешима в явном виде, а иногда нет, но обратная задача: определение формы колокола по звуку, который он способен издавать,— просто ставит в тупик самых искусных математиков. А это именно та проблема, которую надеется решить спектроскопия в случае света. Сейчас мы должны с восхищением приветствовать каждый даже небольшой шаг в этом направлении.

А. ШУСТЕР, 1882 г.

В этом разделе описывается качественный метод изучения точечного спектра. Истоки этого метода лежат в классической математической физике, где интересуются асимптотическим поведением при $\lambda \to \infty$ функции $N(\lambda) = \dim P_{(-\infty, \lambda)}(A)$ для самосопряженного оператора A, отвечающего некоторой краевой задаче. Наиболее известный результат такого рода доказал Г. Вейль: для оператора $-\Delta$ с граничными условиями Дирихле в ограниченной области $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ функция $N(\lambda)$ асимптотически равна функции $C_m \lambda^{m/2}$, умноженной на объем области Ω, где C_m — зависящая от m константа

$$C_m = [m 2^{m-1} \pi^{m/2} \Gamma(m/2)]^{-1};$$

здесь $\Gamma(\cdot)$ есть гамма-функция Эйлера, так что

$$\Gamma(m/2)=\begin{cases}(k-1)!, & m=2k,\\ 2^{-2k}(2k)!\,\sqrt{\pi}/k!, & m=2k+1,\end{cases}$$

где k — целое число.

Метод, который мы собираемся описать, позволит также ответить на вопросы, типичные для квантовой механики: если резольвента оператора $-\Delta+V$ компактна, как быстро растет $\dim P_{(-\infty,\,E)}(-\Delta+V)$ при $E\to\infty$? Если потенциал V убывает на бесконечности, но так медленно, что $\dim P_{(-\infty,\,0)}(-\Delta+V)=\infty$, как быстро растет $\dim P_{(-\infty,\,E)}(-\Delta+V)$ при $E\uparrow 0$? Если W — короткодействующий потенциал, какова скорость роста $\dim P_{(-\infty,\,0)}(-\Delta+\lambda W)$ при $\lambda\to\infty$? Некоторые элементы этого же метода оказываются полезными при изучении давления в квантовой статистической механике, плотности энергии полей в фоковском пространстве в конструктивной теории поля, модели Томаса — Ферми в атомной физике.

С этими вопросами связаны некие неформальные соображения, решающие для понимания формальной техники, которую мы будем развивать. Обсудим сначала результат Вейля. Константа C_m не так уж неудобна и неестественна, как это кажется на первый взгляд. Если τ_m — объем единичного шара в $\mathbb{R}^m$, то $C_m=\tau_m/(2\pi)^m$. Таким образом, асимптотическое значение $N(\lambda)$ можно переписать в виде

$$N(\lambda)\sim(\tau_m\lambda^{m/2})(\operatorname{vol}\Omega)/(2\pi)^m,$$

так что в некотором смысле $N(\lambda)$ оказывается связанной с объемом в $\mathbb{R}^{2m}$ (а не в $\mathbb{R}^m$, как могло бы показаться на основании формулы $C_m(\operatorname{vol}\Omega)$). В самом деле, поскольку $\tau_m\lambda^{m/2}=$ $=\operatorname{vol}\{p\in\mathbb{R}^m\mid p^2<\lambda\}$, мы видим, что

$$N(\lambda)\sim\operatorname{vol}\{\langle x,p\rangle\mid x\in\Omega,\ p^2<\lambda\}/(2\pi)^m.$$

Таким образом, $(2\pi)^m N(\lambda)$ асимптотически есть объем фазового пространства классической частицы массы $m=1/2$ и энергии $E_{\text{class}}\leqslant\lambda$, свободно движущейся в области Ω (например, с упругим отражением от стенок области Ω). В системе единиц, в которой $\hbar=1$, лапласиан $-\Delta_D$ с граничными условиями Дирихле в Ω, в сущности, и есть энергия квантовой системы, отвечающей такой свободной классической частице в Ω. В итоге мы видим, что при $\lambda\to\infty$ число квантовых состояний дается объемом фазового пространства соответствующей классической системы, деленным на $(2\pi)^m$. Это согласуется со «старой квантовой теорией», т. е. условиями квантования Бора — Зоммерфельда, согласно которым каждому квантовому состоянию отвечает объем h^m фазового пространства, поскольку в нашей системе единиц $h \equiv 2\pi\hbar = 2\pi$. Интересно, что работа Вейля и работы Бора и Зоммерфельда выполнялись почти одновременно, хотя связь между ними была понята лишь через несколько лет. Все результаты, которые будут доказаны здесь в связи с квантовыми задачами, упомянутыми выше, допускают интерпретацию на языке фазового объема, деленного на $(2\pi)^m$. Например, для короткодействующего W равенство

$$(2\pi)^{-m} \operatorname{vol} \{\langle x, p\rangle \mid p^2 + \lambda W(x) < 0\} = \\ = \frac{\tau_m}{(2\pi)^m} \int\limits_{\{x \mid W(x) < 0\}} \lambda^{m/2} \mid W(x) \mid^{m/2} d^m x$$

дает асимптотическое выражение, которое будет получено для $\dim P_{(-\infty,\ 0)}(-\Delta + \lambda W)$.

Идея метода, которым мы будем пользоваться для изучения упомянутых задач, очень проста и связана с описанными выше соображениями, относящимися к фазовым пространствам. Для куба легко вычислить собственные значения лапласиана с граничными условиями Дирихле ($-\Delta_D$) или Неймана ($-\Delta_N$) и непосредственно проверить асимптотическую формулу Вейля (предложение 2); в этом случае содержание формулы, в сущности, сводится к утверждению о том, что объем большого шара в $\mathbb{R}^m$ примерно равен числу его точек с целочисленными координатами. Когда Ω равна объединению кубов (вместе со всеми общими границами), формула Вейля гораздо тоньше, но тот факт, что объемы фазового пространства «локальны в x-пространстве», т. е. что, по Вейлю, $N(\lambda;\ \Omega_1 \cup \Omega_2)$ асимптотически совпадает с $N(\lambda;\ \Omega_1) + N(\lambda;\ \Omega_2)$, наводит на мысль попытаться расцепить кубы, входящие в Ω, вдоль их общей границы и воспользоваться знанием асимптотик в случае отдельных кубов. Здесь очень помогает один довольно интересный факт о граничных условиях. Существует два оператора, которые можно сравнивать с $-\Delta_D^\Omega$. Один оператор (обозначим его $-\tilde{\Delta}_D$) отвечает граничным условиям Дирихле на общих границах (будем называть их границами Дирихле), другой ($-\tilde{\Delta}_N$) отвечает граничным условиям Неймана на общих границах (будем называть их границами Неймана). Оператор $-\tilde{\Delta}_D$ допускает расцепление в том смысле, что $-\tilde{\Delta}_D = \bigoplus\limits_{\alpha} (-\Delta_D^{\Omega_\alpha})$ (и аналогично для $-\tilde{\Delta}_N$), где Ω — объединение кубов Ω_α вместе с их общей границей (теорема XIII.79). Более того, величина $N(\lambda;\ -\Delta_D^\Omega)$ допускает двустороннюю оценку вида $N(\lambda;\ -\tilde{\Delta}_D) \leqslant N(\lambda;\ -\Delta_D^\Omega) \leqslant N(\lambda;\ -\tilde{\Delta}_N)$. Мы будем называть такой комбинированный метод расцепления и оценки **вилкой Дирихле — Неймана.**

Формальное описание метода начнем с изучения граничных условий Дирихле и Неймана.

Определение. Пусть Ω — открытая область в $\mathbb{R}^m$ со связными компонентами $\Omega_1, \ldots$ (число которых конечно или бесконечно). **Лапласиан Дирихле** $-\Delta_D^\Omega$ области Ω есть однозначно определенный самосопряженный оператор в $L^2(\Omega, d^m x)$, квадратичная форма которого есть замыкание формы $q(f, g) = \int \overline{\nabla f} \cdot \nabla g d^m x$, заданной на $C_0^\infty(\Omega)$. **Лапласиан Неймана** $-\Delta_N^\Omega$ области Ω есть однозначно определенный самосопряженный оператор в $L^2(\Omega, d^m x)$, квадратичная форма которого $q(f, g) = \int \overline{\nabla f} \cdot \nabla g \, d^m x$ задана на области

$$H^1(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega) \mid \nabla f \in L^2(\mathbb{R}^m)\},$$

где ∇f означает градиент в смысле обобщенных функций, т. е.

$$\int (\nabla f) \varphi \, d^m x = -\int f (\nabla \varphi) \, d^m x$$

для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$. При раз и навсегда заданной области Ω индекс Ω мы будем опускать.

Существует несколько других описаний операторов $-\Delta_D^\Omega$ и $-\Delta_N^\Omega$. Ясно, что, в силу определения, $-\Delta_D^\Omega$ есть расширение по Фридрихсу, и потому $Q(-\Delta_D^\Omega)$ совпадает с пространством $H_0^1(\Omega)$, введенным в предыдущем разделе. Из проведенного там обсуждения вытекает, что множество

$$\{f \in H^1(\Omega) \mid \operatorname{supp} f \text{ компактен в } \Omega\}$$

содержится в $Q(-\Delta_D^\Omega)$. Далее, при любой Ω возможно еще и такое описание. Пусть D обозначает *операторное* замыкание градиента на $C_0^\infty(\Omega)$. Тогда $-\Delta_D^\Omega = D^* D$, в то время как $-\Delta_N^\Omega = DD^*$. Для хороших областей, в частности обладающих сегментным свойством, множество

$$\{f \in H^1(\Omega) \mid f \in C^\infty \text{ вплоть до } \partial\Omega\}$$

есть существенная область определения формы оператора $-\Delta_N^\Omega$. Если Ω имеет хорошую границу, то существенную область определения *оператора* $-\Delta_D$ образуют функции бесконечно дифференцируемые вплоть до границы $\partial\Omega$ и обращающиеся в нуль на ней, а оператора $-\Delta_N$ — бесконечно дифференцируемые вплоть до границы $\partial\Omega$ функции с обращающимися в нуль на $\partial\Omega$ нормальными производными. Именно при таком описании операторов $-\Delta_D$ и $-\Delta_N$ становится ясным происхождение их названий, обусловленное классическими краевыми задачами Дирихле и Неймана теории потенциала. В случае кубов нам потребуется именно это последнее описание.

Предложение 1. Пусть Ω — куб в $\mathbb{R}^m$. Тогда

(a) $D_{\mathrm{D}} \equiv \{f \mid f$ бесконечно дифференцируема вплоть до границы $\partial\Omega$, причем $f \restriction \partial\Omega = 0\}$ — существенная область определения оператора $-\Delta_{\mathrm{D}}$ и для $f \in D_{\mathrm{D}}$

$$-\Delta_{\mathrm{D}} f = -\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2};$$

(b) $D_{\mathrm{N}} \equiv \{f \mid f$ бесконечно дифференцируема вплоть до границы $\partial\Omega$, причем $\partial f/\partial n \restriction \partial\Omega = 0\}$ — существенная область определения оператора $-\Delta_{\mathrm{N}}$ и для $f \in D_{\mathrm{N}}$

$$-\Delta_{\mathrm{N}} f = -\sum_{i=1}^{m} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}.$$

Здесь $\partial/\partial n$ обозначает нормальную производную на границе.

Доказательство. (a) Без потери общности положим $\Omega = (-1, 1)^m$. Пусть A — оператор $-\Delta$ с областью определения D_{D}. Мы хотим показать, что $-\Delta_{\mathrm{D}} = \bar{A}$. Оператор A симметрический, и методом разделения переменных (используя кратные ряды Фурье) можно найти ортонормированный базис, состоящий из собственных функций $\{\varphi_n\}$ оператора A. Если $A\varphi_n = \lambda_n \varphi_n$, то $\varphi \in D(\bar{A})$ тогда и только тогда, когда $\sum \lambda_n^2 |(\varphi_n, \varphi)|^2 < \infty$; а отсюда легко вывести, что $\bar{A}$ самосопряжен.

Ясно, что $C_0^\infty(\Omega) \subset D(\bar{A}) \subset Q(\bar{A})$ и в смысле квадратичных форм $A \restriction C_0^\infty(\Omega) \times C_0^\infty(\Omega) = -\Delta_{\mathrm{D}} \restriction C_0^\infty(\Omega) \times C_0^\infty(\Omega)$, так что достаточно доказать включение $Q(\bar{A}) \subset Q(-\Delta_{\mathrm{D}})$. Поскольку $D_{\mathrm{D}} = D(A)$ — существенная область определения квадратичной формы $\bar{A}$, нужно только показать, что $D_{\mathrm{D}} \subset Q(-\Delta_{\mathrm{D}})$, т. е. для каждого $f \in D_{\mathrm{D}}$ достаточно найти последовательность $f_n \in C_0^\infty(\Omega)$, такую, что $\|f_n - f\| + \|\nabla f_n - \nabla f\| \to 0$. Для заданного $f \in D_{\mathrm{D}}$ положим $g_n(x) = f((1 + n^{-1})x)$, если $|x_i| \leqslant (1 + n^{-1})^{-1}$, и $= 0$ в противном случае. Тогда $g_n(x)$ непрерывна и кусочно непрерывно дифференцируема с ограниченным градиентом. Более того, $g_n \to f$ и $\nabla g_n \to \nabla f$ в L^2. Пусть $j_\delta(x)$ — аппроксимативная единица. Тогда $g_n * j_\delta \to g_n$ и $\nabla(g_n * j_\delta) \to \nabla g_n$ при $\delta \to 0$. Поскольку $g_n * j_\delta \in C_0^\infty(\Omega)$ для малых δ, можно найти последовательность $\{f_n\}$, которая нам нужна.

(b) Предположим, что $\Omega = (-^1, 1)^m$. Пусть B обозначает оператор $-\Delta$ на области определения D_{N}. Точно так же как в части (a), рассмотрев собственные функции оператора B, легко показать, что он в существенном самосопряжен. Более того, поскольку $D(B) \subset H^1(\Omega)$ и $(f, Bf) = \int |\nabla f|^2 d^m x$ для $f \in D(B)$

(в силу граничных условий), справедливо включение $Q(\overline{B}) \subset Q(-\Delta_N)$, так что достаточно доказать включение $Q(-\Delta_N) \subset Q(\overline{B})$, а для этого достаточно убедиться в том, что $H^1(\Omega) \subset Q(\overline{B})$.

Пусть $f \in H^1(\Omega)$. Прежде всего мы утверждаем, что если g и ∇g непрерывны вплоть до границы и $g(\pm 1, x_2, \ldots, x_m) = 0$, то

$$(\partial_1 f, g) = -(f, \partial_1 g). \tag{112}$$

Предположим сначала, что g обращается в нуль на всей $\partial\Omega$. Тогда, как и при доказательстве (a), можно найти такие $g_n \in C_0^\infty(\Omega)$, что $g_n \to g$, $\nabla g_n \to \nabla g$, и, значит, (112) выполняется, поскольку оно справедливо при $g = g_n$. Пусть теперь η_n — последовательность C^∞-функций на Ω, зависящих только от $x_2, \ldots, x_m$ и имеющих компактный носитель в

$$\{x \mid |x_2| \leqslant 1 - n^{-1}, \ldots, |x_m| \leqslant 1 - n^{-1}\},$$

такая, что $\eta_n(x) \uparrow 1$ при $n \to \infty$. Тогда (112) имеет место для $g\eta_n$, а значит, и для g, поскольку $\partial_1(g\eta_n) = \eta_n \partial_1 g$.

Пусть $\{\psi_n\}$ — собственные функции B, заданные формулой (115), приведенной ниже. Заменяя $\sin(n_1\pi x/2)$ на $\cos(n_1\pi x/2)$, когда n_1 нечетно, и $\cos(n_1\pi x/2)$ на $\sin(n_1\pi x/2)$, когда n_1 четно, можно найти ортонормированное семейство $\{\varphi_n\}_{n_1 \geqslant 1}$, такое, что $\partial_1\varphi_n = \pm(\pi/2) n_1 \psi_n$. Функции φ_n и $\nabla\varphi_n$ непрерывны вплоть до границы и $\varphi_n(\pm 1, x_2, \ldots, x_m) = 0$. Используя (112), находим, что

$$\sum_n |(f, \psi_n)|^2 n_1^2 = \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sum_n |(\partial_1 f, \varphi_n)|^2 \leqslant \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \|\partial_1 f\|_2^2,$$

поскольку φ_n ортонормальны. Делая то же самое для всех других переменных, заключаем, что

$$\sum_n (1 + n^2) |(f, \psi_n)|^2 \leqslant \|f\|_2^2 + \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \|\nabla f\|_2^2,$$

и потому $f \in Q(\overline{B})$. ∎

На первый взгляд кажется удивительным, что оператор $-\Delta_N^\Omega$, который мы определили без всякого упоминания о $\partial\Omega$ или нормальных производных, удовлетворяет граничным условиям Неймана. Наглядно это можно понять несколькими способами. Поскольку $-\Delta_N^\Omega = DD^*$, то для того, чтобы f попало в область определения $-\Delta_N^\Omega$, нужно, чтобы D^*f было в области определения D, а эта область состоит из функций, обращающихся в нуль на $\partial\Omega$.

Другой способ понимания особенно нагляден в одномерном случае, когда $\Omega = (a, b)$. Оператор C, определяемый квадратичной формой Неймана, должен быть самосопряженным расширением $-d^2/dx^2$ на $C_0^\infty(a, b)$, удовлетворяющим двум требованиям:

(i) для любой C^∞-функции f на $[a, b]$ должна существовать последовательность $f_n \in D(C)$, такая, что $f_n \to f$ в H^1;

(ii) для любой $f \in D(C)$ имеем $(f, Cf) = \|df/dx\|^2$.

Мы не можем подчинить C граничным условиям Дирихле, ибо это привело бы к обращению в нуль f_n в a и b, что означало бы быстрый рост $d(f_n - f)/dx$ вблизи концевых точек. Это также привело бы к нарушению периодических граничных условий, связывающих концевые точки отрезка. В то же время условие (i) не нарушает граничных условий вида $df/dx + \alpha f = 0$, а условие (ii) приводит к тому, что α оказывается нулем (задача 127).

Главное достоинство изложенного подхода в том, что он позволяет найти собственные значения и собственные функции операторов $-\Delta_D$ и $-\Delta_N$ в явном виде. Для этого обозначим множество неотрицательных целых чисел через $\mathbb{Z}_+$, а множество положительных целых чисел через $\mathbb{Z}_{++}$, так что $\mathbb{Z}_+ = \mathbb{Z}_{++} \cup \{0\}$. Тогда собственные значения и собственные функции оператора $-\Delta_D$ в $(-a, a)^m$ можно занумеровать точками из $\mathbb{Z}_{++}^m$, так что собственные функции будут иметь вид

$$\Phi_{n;\,a}(x) = a^{-m/2} \prod_{i=1}^{m} \varphi_{n_i}(x_i/a), \tag{113}$$

где

$$\varphi_k(x) = \cos(k\pi x/2), \quad k = 1, 3, 5, \ldots,$$
$$\varphi_k(x) = \sin(k\pi x/2), \quad k = 2, 4, 6, \ldots,$$

а собственные значения — вид

$$E_n(a) = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 \sum_{i=1}^{m} n_i^2. \tag{114}$$

В случае $-\Delta_N$ в $(-a, a)^m$ собственные функции нумеруются точками из $\mathbb{Z}_+^m$:

$$\Psi_{n;\,a}(x) = a^{-m/2} \prod_{i=1}^{m} \psi_{n_i}(x_i/a), \tag{115}$$

где

$$\psi_k(x) = \sin(k\pi x/2), \quad k = 1, 3, 5, \ldots,$$
$$\psi_k(x) = \cos(k\pi x/2), \quad k = 2, 4, 6, \ldots,$$
$$\psi_k(x) = \frac{1}{2}\sqrt{2}, \quad k = 0,$$

а собственные значения по-прежнему имеют вид (114). Благодаря такой возможности явного перечисления собственных функций теорему Вейля для кубов можно доказать непосредственно.

Предложение 2. Пусть $N_{\mathrm D}(a, \lambda)$ (соответственно $N_{\mathrm N}(a, \lambda)$) есть размерность спектрального проектора $P_{[0,\lambda)}$ оператора $-\Delta_{\mathrm D}$ (соответственно $-\Delta_{\mathrm N}$) на $(-a, a)^m$. Тогда для всех a, λ

$$|N_{\mathrm D}(a, \lambda)-\tau_m(2a/2\pi)^m\lambda^{m/2}|\leqslant C(1+(a^2\lambda)^{(m-1)/2}), \tag{116}$$

$$|N_{\mathrm N}(a, \lambda)-\tau_m(2a/2\pi)^m\lambda^{m/2}|\leqslant C(1+(a^2\lambda)^{(m-1)/2}), \tag{117}$$

где τ_m — объем единичного шара в $\mathbb{R}^m$, а C — подходящая константа.

Доказательство. Начнем с двух замечаний. Первое просто объясняет, почему этот результат справедлив. В силу (114), $N_{\mathrm D}$ (соответственно $N_{\mathrm N}$) есть число точек в Z^m_{++} (соответственно в Z^m_{+}), попадающих в шар радиуса $(2a/\pi)\lambda^{1/2}$. Для больших λ эта величина приближенно равна объему соответствующего «октанта» в этом шаре, т. е. $2^{-m}\tau_m((2a/\pi)\lambda^{1/2})^m$. Ошибка будет порядка «поверхностных членов», т. е. порядка $(a^2\lambda)^{(m-1)/2}$. Второе замечание состоит в том, что $-\Delta_{\mathrm D}$ в $(-1, 1)^m$ благодаря масштабному преобразованию унитарно эквивалентен $a^2(-\Delta_{\mathrm D})$ в $(-a, a)^m$, так что $N_{\mathrm D}(a, \lambda)=N_{\mathrm D}(1, a^2\lambda)$. Поэтому достаточно доказать оценки для случая $a=1$.

Пусть S_λ—шар радиуса $(2/\pi)\lambda^{1/2}$. Для каждого $n\in Z^m_{++}\cap S_\lambda$ единичный куб $\{x\mid n_i-1\leqslant x_i\leqslant n_i\}$ содержится в верхнем октанте S_λ, так что

$$N_{\mathrm D}(\lambda)\leqslant\tau_m(2a/2\pi)^m\lambda^{m/2}. \tag{118}$$

Поскольку верхний октант S_λ можно покрыть единичными кубами $\{x\mid n_i\leqslant x_i<n_i+1\}$, где n пробегает $Z^m_+\cap S_\lambda$, получаем, что

$$\tau_m(2a/2\pi)^m\lambda^{m/2}\leqslant N_{\mathrm N}(\lambda). \tag{119}$$

Наконец, ясно, что

$$N_{\mathrm N}(\lambda)-N_{\mathrm D}(\lambda)=\#\{S_\lambda\cap(Z^m_+\setminus Z^m_{++})\}=\bigcup_{k=0}^{m-1}M_k(\lambda),$$

где

$$M_k(\lambda)=\{n\in Z^m_+\cap S_\lambda\mid \text{точно } k \text{ из всех } n_i \text{ не равны } 0\}$$

(см. рис. XIII.10 в случае $m=3$). Так же как в полученной оценке $N_{\mathrm D}$, величина $\#(M_k(\lambda))$ не превосходит k-мерного объема $\binom{m}{k}$ октантов в шаре радиуса $(2/\pi)\lambda^{1/2}$ в p-пространстве. Следовательно,

$$\sum_{k=1}^{m-1}\#M_k(\lambda)\leqslant\operatorname{const}\left(\sum_{k=0}^{m-1}\lambda^{k/2}\right)\leqslant C(1+\lambda^{(m-1)/2}).$$

Таким образом,

$$N_{\mathrm N}(\lambda)-N_{\mathrm D}(\lambda)\leqslant C(1+\lambda^{(m-1)/2}). \tag{120}$$

Теперь ясно, что (118)—(120) влекут за собой (116) и (117). ∎

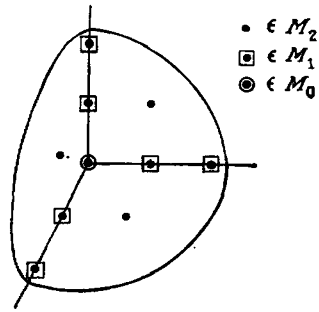


Рис. XIII.10. Множества M_k.

Благодаря двум специальным свойствам лапласианов Дирихле и Неймана, которые проявляются при добавлении границ Дирихле или Неймана, они полезны при изучении общих задач на собственные значения.

Рассмотрим непересекающиеся области Ω_1, Ω_2 и область $\Omega=(\overline{\overline{\Omega_1}\cup\overline{\Omega_2}})^{\text{int}}$ типа тех, что изображены на рис. XIII.11. Ниже будет показано, что (1) вклад границ Дирихле и Неймана можно расцепить (предложение 3); (2) добавление границ Дирихле повышает, а границ Неймана уменьшает энергию (предложение 4). Для того чтобы уточнить смысл, в котором мы будем понимать расцепление, сделаем несколько предварительных замечаний о прямых суммах самосопряженных операторов.

Рис. XIII.11. Добавление границы.

Пусть $\mathscr{H}=\mathscr{H}_1\oplus\mathscr{H}_2$. Пусть A_1—самосопряженный оператор в $\mathscr{H}_1$, A_2—самосопряженный оператор в $\mathscr{H}_2$. Пусть A—оператор с областью определения $D(A)=\{\langle\varphi, \psi\rangle \mid \varphi\in D(A_1),\ \psi\in D(A_2)\}$, заданный правилом действия $A\langle\varphi, \psi\rangle=\langle A_1\varphi, A_2\psi\rangle$. В таком случае мы будем писать $A=A_1\oplus A_2$. Такой оператор обладает рядом свойств, доказательство которых (на основе спектральной теоремы и/или основного критерия самосопряженности) мы оставляем читателю (задача 133):

(1) $A_1\oplus A_2$ самосопряжен.

(2) Если D_1—существенная область определения оператора A_1, а D_2—оператора A_2, то

$$D_1\oplus D_2\equiv\{\langle\varphi, \psi\rangle \mid \varphi\in D_1,\ \psi\in D_2\}$$

—существенная область определения $A_1\oplus A_2$.

(3) $Q(A_1\oplus A_2)=Q(A_1)\oplus Q(A_2)$, и если $\langle\varphi, \psi\rangle\in Q(A_1)\oplus Q(A_2)$,

то

$$(\langle\varphi, \psi\rangle, (A_1 \oplus A_2)\langle\varphi, \psi\rangle) = (\varphi, A_1\varphi) + (\psi, A_2\psi).$$

(4) Для любого борелева подмножества $\Omega \subset \mathbb{R}$

$$P_\Omega(A_1 \oplus A_2) = P_\Omega(A_1) \oplus P_\Omega(A_2).$$

(5) Если $N(\lambda, A) = \dim P_{(-\infty, \lambda)}(A)$, то

$$N(\lambda, A_1 \oplus A_2) = N(\lambda, A_1) + N(\lambda, A_2).$$

Предложение 3. Пусть Ω_1 и Ω_2 — непересекающиеся открытые множества, такие, что $L^2(\Omega_1 \cup \Omega_2) = L^2(\Omega_1) \oplus L^2(\Omega_2)$. При таком разложении

$$-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega_1 \cup \Omega_2} = -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega_1} \oplus -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega_2}, \qquad -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega_1 \cup \Omega_2} = -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega_1} \oplus -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega_2}.$$

Доказательство. Рассмотрим случай Дирихле; случай Неймана аналогичен. Пусть задана $f \in C_0^\infty(\Omega_1 \cup \Omega_2)$. Положим $f_i = f \upharpoonright \Omega_i$. Тогда $f_i \in C_0^\infty(\Omega_i)$ и

$$\int_{\Omega_1 \cup \Omega_2} \overline{\nabla f} \cdot \nabla g \, d^m x = \int_{\Omega_1} \overline{\nabla f_1} \cdot \nabla g_1 \, d^m x + \int_{\Omega_2} \overline{\nabla f_2} \cdot \nabla g_2 \, d^m x.$$

Поскольку это соотношение продолжается на функции из области определения замыканий квадратичных форм, эти квадратичные формы равны, что дает искомый результат. ∎

Примером применения этого предложения служит такое

Следствие. Пусть $N_{\mathrm{D}}(\Omega, \lambda)$ (соответственно $N_{\mathrm{N}}(\Omega, \lambda)$) — размерность спектрального проектора $P_{[0, \lambda)}$ оператора $-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega}$ (соответственно $-\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega}$). Тогда если $\Omega_1, \ldots, \Omega_k$ не пересекаются, то

$$N_{\mathrm{D}}\left(\bigcup_{i=1}^{k} \Omega_i, \lambda\right) = \sum_{i=1}^{k} N_{\mathrm{D}}(\Omega_i, \lambda), \qquad N_{\mathrm{N}}\left(\bigcup_{i=1}^{k} \Omega_i, \lambda\right) = \sum_{i=1}^{k} N_{\mathrm{N}}(\Omega_i, \lambda).$$

Для того чтобы сформулировать свойства монотонности, мы несколько расширим смысл соотношения $A \leqslant B$, введенного в § 2.

Определение. Пусть A и B — два самосопряженных неотрицательных оператора, из которых A определен на плотном множестве в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, а B определен на плотном множестве в гильбертовом подпространстве $\mathcal{H}_1 \subseteq \mathcal{H}$. Будем писать $0 \leqslant A \leqslant B$ тогда и только тогда, когда

(i) $Q(A) \supset Q(B)$;
(ii) $0 \leqslant (\psi, A\psi) \leqslant (\psi, B\psi)$ для любого $\psi \in Q(B)$.

Суть этого определения в том, что благодаря принципу минимакса (в форме теоремы XIII.2) мы сразу же получаем следующий результат.

Лемма. Если $0 \leqslant A \leqslant B$, то

(a) $\dim P_{[0,\lambda]}(A) \geqslant \dim P_{[0,\lambda]}(B)$ при всех $\lambda > 0$;

(b) $\mu_n(A) \leqslant \mu_n(B)$ для всех n, где μ_n задается принципом минимакса.

Доказательство. Поскольку $Q(A)$ содержит больше пробных функций, чем $Q(B)$, то

$$\min_{\substack{\varphi \in Q(A) \\ \varphi \perp \psi_1, \ldots, \psi_n}} (\varphi, A\varphi) \leqslant \min_{\substack{\varphi \in Q(B) \\ \varphi \perp \psi_1, \ldots, \psi_n}} (\varphi, A\varphi) \leqslant \min_{\substack{\varphi \in Q(B) \\ \varphi \perp \psi_1, \ldots, \psi_n}} (\varphi, B\varphi),$$

и справедливость (b) ясна; (a) вытекает из (b) и принципа минимакса. ∎

Предложение 4. (a) Если $\Omega \subset \Omega'$, то $0 \leqslant -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega'} \leqslant -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega}$.

(b) Для любой области Ω имеем $0 \leqslant -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega} \leqslant -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega}$.

(c) Пусть Ω_1, Ω_2 — непересекающиеся открытые подмножества открытого множества Ω, такие, что $(\overline{\Omega_1 \cup \Omega_2})^{\mathrm{int}} = \Omega$ и мера $\Omega \diagdown (\Omega_1 \cup \Omega_2)$ равна нулю (см. рис. XIII.11). Тогда

$$0 \leqslant -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega} \leqslant -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega_1 \cup \Omega_2}, \quad 0 \leqslant -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega_1 \cup \Omega_2} \leqslant -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega}.$$

Доказательство. (a) Это утверждение нужно понимать в том смысле, что любую $f \in L^2(\Omega)$ можно рассматривать как элемент $L^2(\Omega')$, продолжая ее на $\Omega' \diagdown \Omega$ нулем. Тогда $C_0^\infty(\Omega) \subset C_0^\infty(\Omega')$ и $-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega'} \upharpoonright C_0^\infty(\Omega) \times C_0^\infty(\Omega) = -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega}$ в смысле квадратичных форм, так что (a) доказано.

(b) немедленно вытекает из включения $C_0^\infty(\Omega) \subset H^1(\Omega)$.

(c) $C_0^\infty(\Omega_1 \cup \Omega_2) \subset C_0^\infty(\Omega)$, поскольку $\Omega \supset \Omega_1 \cup \Omega_2$ (в самом деле, первая часть (c) есть частный случай (a)). С другой стороны, если $f \in H^1(\Omega)$, то ее сужение на $\Omega_1 \cup \Omega_2$ лежит в $H^1(\Omega_1) \oplus H^1(\Omega_2)$. Более того, поскольку мера $\Omega \diagdown (\Omega_1 \cup \Omega_2)$ равна нулю,

$$\int_{\Omega} |\nabla f|^2 d^m x = \int_{\Omega_1 \cup \Omega_2} |\nabla f|^2 d^m x. \ ∎$$

Основной смысл неравенств пункта (c) в том, что, добавляя дополнительную границу Дирихле $\Omega \diagdown (\Omega_1 \cup \Omega_2)$, мы налагаем дополнительное условие на функции (они должны обращаться в нуль на добавочной границе), и потому собственные значения растут. Но в случае Неймана дополнительное условие на функции возникает после того, как мы *убираем* дополнительную границу, ибо функции должны стать гладкими после того, как ликвидировано граничное условие.

В качестве первого приложения мы докажем результат Вейля об асимптотике плотности собственных значений оператора $-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega}$ для достаточно хороших областей Ω.

Определение. Назовем **стандартным 2^{-n}-кубом в $\mathbb{R}^m$** куб вида

$$\left[\frac{a_1}{2^n},\ \frac{a_1+1}{2^n}\right)\times\ldots\times\left[\frac{a_m}{2^n},\ \frac{a_m+1}{2^n}\right),$$

где $a_1, \ldots, a_m$ — целые числа. При заданном множестве $\Omega\subset\mathbb{R}^m$ обозначим через $W_n^-(\Omega)$ объем стандартных 2^{-n}-кубов, содержащихся в Ω, а через $W_n^+(\Omega)$ объем стандартных 2^{-n}-кубов, пересекающих Ω. В итоге, если Ω измеримо по Лебегу, то

$$W_n^-(\Omega)\leqslant W_{n+1}^-(\Omega)\leqslant\mu(\Omega)\leqslant W_{n+1}^+(\Omega)\leqslant W_n^+(\Omega). \tag{121}$$

Предел $\lim W_n^-(\Omega)=W_\infty^-(\Omega)$ (соответственно $\lim W_n^+(\Omega)=W_\infty^+(\Omega)$) назовем **внутренним** (соответственно **внешним**) **жордановым объемом** множества Ω. Если $W_\infty^+(\Omega)=W_\infty^-(\Omega)$, то будем говорить, что множество Ω **имеет жорданов объем,** и называть $W(\Omega)=W_\infty^\pm(\Omega)$ его **жордановым объемом.**

Отметим, что, в силу (121), если Ω измеримо по Лебегу и имеет жорданов объем, то $W(\Omega)=\mu(\Omega)$. Можно также доказать, что любое имеющее жорданов объем множество измеримо по Лебегу (задача 128).

Теорема XIII.78. Пусть Ω — ограниченное открытое множество в $\mathbb{R}^m$. Пусть $N_{\mathrm{D}}(\Omega,\lambda)$ — размерность спектрального проектора $P_{[0,\lambda)}$ оператора $-\Delta_{\mathrm{D}}^\Omega$. Тогда если Ω имеет жорданов объем, то

$$\lim_{\lambda\to\infty}N_{\mathrm{D}}(\Omega,\lambda)/\lambda^{m/2}=\frac{\tau_m}{(2\pi)^m}W(\Omega).$$

Доказательство. Мы докажем, что для любого n

$$\overline{\lim_{\lambda\to\infty}}\,N_{\mathrm{D}}(\Omega,\lambda)/\lambda^{m/2}\leqslant(2\pi)^{-m}\tau_m W_n^+(\Omega), \tag{122a}$$

$$\underline{\lim_{\lambda\to\infty}}\,N_{\mathrm{D}}(\Omega,\lambda)/\lambda^{m/2}\geqslant(2\pi)^{-m}\tau_m W_n^-(\Omega), \tag{122b}$$

откуда вытекает нужный результат.

Пусть $\Omega_n^\pm$ — объединение кубов, из объемов которых складывается $W_n^\pm(\Omega)$, а $\{C_{n,\alpha}^\pm\}$ — внутренности самих этих кубов, так что $\overline{\Omega}_n^\pm=\bigcup_\alpha\overline{C}_{n,\alpha}^\pm$. В силу пунктов (а) и (с) предложения 4,

$$-\Delta_{\mathrm{D}}^\Omega\leqslant-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega_n^-}\leqslant-\Delta_{\mathrm{D}}^{\cup C_{n,\alpha}^-}=\bigoplus_\alpha-\Delta_{\mathrm{D}}^{C_{n,\alpha}^-},$$

где последнее равенство основано на предложении 3. Таким образом, в силу предложения 4,

$$N_{\mathrm{D}}(\Omega,\lambda)\geqslant\sum_\alpha N_{\mathrm{D}}(C_{n,\alpha}^-,\lambda)=(\#\alpha)\,N_{\mathrm{D}}(2^{-n-1},\lambda)=$$
$$=W_n^-(\Omega)\,2^{nm}N_{\mathrm{D}}(2^{-n-1},\lambda),$$

а в силу предложения 2,

$$\lim_{\lambda\to\infty} N_{\mathrm{D}}(2^{-n-1}, \lambda)\lambda^{-m/2} = \tau_m(2\pi)^{-m}2^{-nm},$$

так что справедливо (122b). Точно так же, в силу пунктов (a) — (c) предложения 4,

$$-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega} \geqslant -\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega_n^+} \geqslant -\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega_n^+} \geqslant -\Delta_{\mathrm{N}}^{\cup C_{n,\alpha}^+} = \bigoplus_{\alpha} -\Delta_{\mathrm{N}}^{C_{n,\alpha}^+},$$

и (122a) получается повторением только что сделанных оценок. ▮

Теперь структура метода вилки Дирихле—Неймана ясна. Используя монотонность оценок при добавлении границ Дирихле или Неймана и возможность расцепления вкладов от разных кубов, мы сводим задачу к оценке вклада одного куба, которую решаем с помощью предложения 2. Фазовый объем входит в оценку потому, что он входит в формулы (116) и (117). В итоге, например, справедлива

Теорема XIII.79. Пусть V — непрерывная функция на $\mathbb{R}^m$ с компактным носителем. Пусть $N(\lambda)$ — размерность спектрального проектора $P_{(-\infty,\,0)}$ оператора $-\Delta+\lambda V$. Тогда

$$\lim_{\lambda\to\infty} N(\lambda)/\lambda^{m/2} = \tau_m(2\pi)^{-m} \int\limits_{\{x \mid V(x) < 0\}} (-V(x))^{m/2}\, d^m x.$$

Доказательство. Пусть $\{C_{n,\alpha}\}_\alpha$ для каждого n — набор всех стандартных 2^{-n}-кубов. Определим V_n^+ (соответственно V_n^-) как кусочно постоянную на каждом $C_{n,\alpha}$ функцию со значением, равным $\max\{V(x) \mid x\in C_{n,\alpha}\}$ (соответственно $\min\{V(x) \mid x\in C_{n,\alpha}\}$). Докажем, что при каждом n

$$\varlimsup_{\lambda\to\infty} N(\lambda)/\lambda^{m/2} \leqslant \tau_m(2\pi)^{-m} \int\limits_{\{x \mid V_n^-(x)\leqslant 0\}} (-V_n^-(x))^{m/2}\, d^m x, \tag{123a}$$

$$\varliminf_{\lambda\to\infty} N(\lambda)/\lambda^{m/2} \geqslant \tau_m(2\pi)^{-m} \int\limits_{\{x \mid V_n^+(x)\leqslant 0\}} (-V_n^+(x))^{m/2}\, d^m x. \tag{123b}$$

Поскольку ввиду непрерывности V справедливо равенство

$$\lim_{n\to\infty} \int\limits_{\{x \mid V_n^{\pm}(x)\leqslant 0\}} (-V_n^{\pm}(x))^{m/2}\, d^m x = \int\limits_{\{x \mid V(x)\leqslant 0\}} (-V(x))^{m/2}\, d^m x,$$

неравенства (123) доказывают теорему.

Предположим, что $\operatorname{supp} V$ лежит в кубе $(-k, k)^m$ с целым k. Пусть $-\Delta_+^n$ (соответственно $-\Delta_-^n$) — лапласиан на всем $\mathbb{R}^m$, но с граничными условиями Дирихле (соответственно Неймана) на границах всех 2^{-n}-кубов в $(-k, k)^m$ (рис. XIII.12). Поскольку $V_n^- \leqslant V \leqslant V_n^+$ и $-\Delta_-^n \leqslant -\Delta \leqslant -\Delta_+^n$, то, в силу предложения 4, имеем

$$-\Delta_-^n + V_n^- \leqslant -\Delta + V \leqslant -\Delta_+^n + V_n^+,$$

так что для доказательства (123) нужно доказать только равенство

$$\lim_{\lambda \to \infty} N_n^{\pm}(\lambda)/\lambda^{m/2} = \tau_m (2\pi)^{-m} \int\limits_{\{x \mid V_n^{\pm}(x) \leqslant 0\}} (-V_n^{\pm}(x))^{m/2} d^m x \qquad (124)$$

(смысл обозначения $N_n^{\pm}(\lambda)$ очевиден). Но благодаря возможности расцепить границы Неймана и Дирихле, $-\Delta_{\pm}^n + \lambda V_n^{\pm}$ есть прямая сумма операторов вида $-\Delta_{\mathrm{D}}^{\Omega} + \lambda c$ или $-\Delta_{\mathrm{N}}^{\Omega} + \lambda c$ с некоторыми

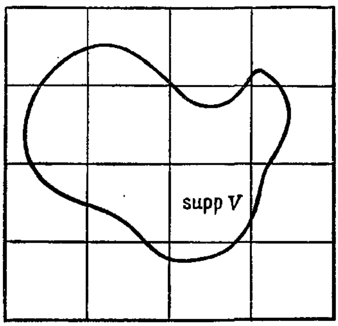


Рис. XIII.12.

постоянными c и кубами Ω и положительного оператора, задаваемого лапласианом на $\mathbb{R}^m \setminus (-k, k)^m$. Поскольку для любого положительного оператора A

$$\dim(\operatorname{Ran} P_{(-\infty, 0)}(A + \lambda c)) = \dim(\operatorname{Ran} P_{[0, -\lambda c)}(A)),$$

(124) вытекает из предложения 2. ∎

Методом, использованным при доказательстве теорем о пределах, нельзя охватить потенциалы, которые не являются хотя бы локально ограниченными. Однако сами утверждения этих теорем можно распространить на негладкие потенциалы V, приближая их потенциалами из класса C_0^∞. Основной пункт доказательств при использовании таких приближений состоит в применении оценок величины $N(V)$ с правильной зависимостью от константы взаимодействия, подобных оценке Цвикеля — Либа — Розенблюма (теорема XIII.12).

Теорема XIII.80. Для любого $V \in L^{m/2}(\mathbb{R}^m)$, $m \geqslant 3$,

$$\lim_{\lambda \to \infty} N(\lambda V)/\lambda^{m/2} = \tau_m (2\pi)^{-m/2} \int_{\{x \mid V(x) < 0\}} (-V(x))^{m/2} d^m x.$$

Доказательство. Пусть A — произвольный самосопряженный оператор и $\tilde{N}(A) = \dim(E_{(-\infty,\, 0)}(A))$, где $\{E_\Omega(A)\}$ — спектральное семейство оператора A. Прежде всего мы утверждаем, что

$$\tilde{N}(A+B) \leqslant \tilde{N}(A) + \tilde{N}(B) \tag{125}$$

для любых самосопряженных ограниченных снизу операторов A и B, для которых $Q(A) \cap Q(B)$ плотно и $A+B$ есть сумма в смысле форм. Неравенство (125) вытекает из принципа минимакса: если $\tilde{N}(A)$, $\tilde{N}(B) < \infty$, то пусть $\psi_1, \ldots, \psi_{\tilde{N}(A)}$ — базис подпространства $E_{(-\infty,\, 0)}(A)$, а $\psi_{\tilde{N}(A)+1}, \ldots, \psi_{\tilde{N}(A)+\tilde{N}(B)}$ — базис в $E_{(-\infty,\, 0)}(B)$. Если $\varphi \in Q(A) \cap Q(B)$ лежит в $[\psi_1, \ldots, \psi_{\tilde{N}(A)+\tilde{N}(B)}]^\perp$, то $(\varphi, A\varphi) \geqslant 0$ и $(\varphi, B\varphi) \geqslant 0$, так что, согласно принципу минимакса, $\mu_{\tilde{N}(A)+\tilde{N}(B)+1}(A+B) \geqslant 0$. Это доказывает (125).

Фиксируем малое $\varepsilon > 0$. Выберем $V_k \in C_0^\infty$ так, чтобы $V_k \to V$ в $L^{m/2}(\mathbb{R}^m)$. Тогда

$$-\Delta + \lambda V = [-(1-\varepsilon)\Delta + \lambda V_k] + [\varepsilon(-\Delta) + \lambda(V - V_k)],$$

так что, в силу (125) и равенства $\tilde{N}(-\alpha\Delta + V) = N(\alpha^{-1}V)$,

$$\begin{aligned} N(\lambda V) &\leqslant N((1-\varepsilon)^{-1}\lambda V_k) + N(\varepsilon^{-1}\lambda(V - V_k)) \leqslant \\ &\leqslant N((1-\varepsilon)^{-1}\lambda V_k) + c\varepsilon^{-m/2}\lambda^{m/2}\|V - V_k\|_{m/2}^{m/2}, \end{aligned}$$

где надо воспользоваться формулой (10). В силу теоремы о пределе, уже доказанной для $V_k \in C_0^\infty$,

$$\begin{aligned} \overline{\lim_{\lambda\to\infty}} N(\lambda V)/\lambda^{m/2} \leqslant (1-\varepsilon)^{-m/2} (2\pi)^{-m/2}\tau_m \int_{\{x \mid V_k(x) < 0\}} (-V_k(x))^{m/2} d^m x + \\ + c\varepsilon^{-m/2}\|V - V_k\|_{m/2}^{m/2}. \end{aligned}$$

Взяв $k \to \infty$, а затем устремив ε к нулю, найдем, что

$$\overline{\lim_{\lambda \to \infty}} N(\lambda V)/\lambda^{m/2} \leqslant (2\pi)^{-m/2}\tau_m \int_{\{x \mid V(x) < 0\}} (-V(x))^{m/2} d^m x. \tag{126}$$

Далее,

$$-\Delta + \lambda V_k = [-(1-\varepsilon)\Delta + \lambda V] + [\varepsilon(-\Delta) + \lambda(V_k - V)],$$

так что с помощью теоремы о пределе и (10), действуя, как и выше, получим

$$(2\pi)^{-m/2}\tau_m \int\limits_{\{x \mid V_k(x) \leqslant 0\}} (-V_k(x))^{m/2}\, d^m x \leqslant$$
$$\leqslant (1-\varepsilon)^{-m/2}\Big[\varliminf_{\lambda \to \infty} N(\lambda V)/\lambda^{m/2}\Big] + c\varepsilon^{-m/2}\|V-V_k\|_{m/2}^{m/2}.$$

Опять взяв $k \to \infty$, а затем $\varepsilon \to 0$, получим

$$(2\pi)^{-m/2}\,\tau_m \int\limits_{\{x \mid V(x) \leqslant 0\}} (-V(x))^{m/2}\, d^m x \leqslant \varliminf_{\lambda \to \infty} N(\lambda V)/\lambda^{m/2}. \tag{127}$$

Теперь (126) и (127) доказывают теорему. ∎

При выводе нашего следующего результата, являющегося ответом на вопрос, поднятый в § 14, мы наложим на V более сильные требования, чем это совершенно необходимо.

Теорема XIII.81. Пусть V — измеримая функция на $\mathbb{R}^m$ $(m \geqslant 2)$, удовлетворяющая неравенствам

$$c_1(|x|^\beta - 1) \leqslant V(x) \leqslant c_2(|x|^\beta + 1), \tag{128}$$
$$|V(x)-V(y)| \leqslant c_3[\max\{|x|, |y|\}]^{\beta-1}|x-y| \tag{129}$$

при некоторых $\beta > 1$ и постоянных c_1, c_2, $c_3 > 0$. Пусть $N(E) = \dim \operatorname{Ran} P_{(-\infty, E)}$ для $-\Delta + V$, и пусть

$$g(E) = \tau_m (2\pi)^{-m} \int\limits_{\{x \mid V(x) \leqslant E\}} (E - V(x))^{m/2}\, d^m x. \tag{130}$$

Тогда

$$\lim_{E \to \infty} N(E)/g(E) = 1.$$

Доказательство. Пусть $\{\Omega_\alpha\}$ — семейство всех единичных кубов, вершины которых лежат в узлах целочисленной решетки. Пусть V^+ (соответственно V^-) — кусочно постоянная функция со значениями $\sup_{\Omega_\alpha} V(x)$ $\big($соответственно $\inf_{\Omega_\alpha} V(x)\big)$ внутри кубов Ω_α. Пусть $-\Delta^+$ (соответственно $-\Delta^-$) — лапласиан с граничными условиями Дирихле (соответственно Неймана) на гранях кубов Ω_α. Пусть $N_\pm(E) = \dim \operatorname{Ran} P_{(-\infty, E)}$ для $-\Delta^\pm + V^\pm$ и $g_\pm(E)$ задано формулой (130), где V заменено на $V^\pm$. Тогда использование вилки Дирихле — Неймана приводит к оценке

$$N_-(E) \geqslant N(E) \geqslant N_+(E). \tag{131}$$

С помощью (128) легко убедиться в том, что

$$c_3(E^\gamma - 1) \leqslant g_+(E) \leqslant g(E) \leqslant g_-(E) \leqslant c_4(E^\gamma + 1), \tag{132}$$

где $\gamma = m/2 + m\beta^{-1}$. Более того, в силу (129) и оценки

$$|(E-a)^{m/2} - (E-b)^{m/2}| \leqslant \frac{m}{2} \max[(E-a)^{m/2-1}, (E-b)^{m/2-1}]\,|b-a|,$$

имеем

$$|g_-(E) - g_+(E)| \leqslant c_5 (E^{\gamma-\beta^{-1}} + 1). \qquad (133)$$

В силу (131)—(133), доказательство теоремы будет завершено, если мы сможем доказать, что

$$\lim_{E\to\infty} N_\pm(E)/g_\pm(E) = 1. \qquad (134)$$

Благодаря свойству расцепляемости как условий Дирихле, так и условий Неймана имеем

$$N_\pm(E) = \sum_{\{\alpha \mid V_\pm \restriction \Omega_\alpha < E\}} \eta_\pm(E - V_\pm \restriction \Omega_\alpha),$$

где $\eta_+(\lambda)$ (соответственно $\eta_-(\lambda)$) есть $\dim \operatorname{Ran} P_{[0,\lambda)}$ для $-\Delta$ в единичном кубе с граничными условиями Дирихле (соответственно Неймана). В силу предложения 2,

$$\left|\eta_\pm(\lambda) - \frac{\tau_m}{(2\pi)^m}\lambda^{m/2}\right| \leqslant c_6 (1 + \lambda^{(m-1)/2}).$$

Поскольку

$$\sum_{\{\alpha \mid V_\pm \restriction \Omega_\alpha < E\}} \tau_m (2\pi)^{-m} (E - V_\pm \restriction \Omega_\alpha)^{m/2} = g_\pm(E),$$

остается только проверить, что остаточный член

$$\varepsilon_\pm(E) \equiv \sum_{\{\alpha \mid V_\pm \restriction \Omega_\alpha < E\}} [1 + (E - V_\pm \restriction \Omega_\alpha)^{(m-1)/2}]$$

мал по сравнению с $g_\pm(E)$. Но

$$\varepsilon_\pm(E) \leqslant (1 + E^{(m-1)/2}) \operatorname{vol}\{x \mid V_\pm(x) \leqslant E\},$$

а в силу (128) этот объем ограничен величиной $\operatorname{const}(1 + E^{1/\beta})^m$, так что

$$\varepsilon_\pm(E) \leqslant c_6 (1 + E^{\gamma - 1/2}),$$

и потому, в силу (132), $\varepsilon_\pm(E)/g_\pm(E) \to 0$. Это доказывает (134), а с ним и теорему. ∎

После небольших видоизменений теорему и ее доказательство можно распространить на случай $m=1$.

Похожими методами можно получить следующий результат (задача 131), оценивающий скорость роста $\dim \operatorname{Ran} P_{(-\infty, E]}$ для тех операторов Шредингера, для которых мы в § 3 доказали, что $\dim \operatorname{Ran} P_{(-\infty, 0]} = \infty$.

Теорема XIII.82. Пусть V — измеримая функция на $\mathbb{R}^m$, удовлетворяющая неравенствам

$$-c_1(|x|+1)^{-\beta} \leqslant V(x) \leqslant -c_2(|x|+1)^{-\beta},$$
$$|V(x)-V(y)| \leqslant c_3[\min\{|x|, |y|\}+1]^{-\beta-1}|x-y|$$

для некоторых $\beta < 2$ и $c_1, c_2, c_3 > 0$. Пусть $N(E) = \dim \operatorname{Ran} P_{(-\infty, -E)}$ для $-\Delta + V$ и

$$g(E) = \tau_m (2\pi)^{-m} \int\limits_{\{x \mid V(x) < -E\}} (-E - V(x))^{m/2}\, d^m x.$$

Тогда

$$\lim_{E \uparrow 0} N(E)/g(E) = 1.$$

Отметим также (задача 132), что асимптотическое поведение $N(E)$ не меняется при замене $-\Delta+V$ на $-\Delta+V+W$, где W таков, что $-\Delta+\lambda W$ имеет только конечное число связанных состояний с отрицательными собственными значениями при всех λ. Например, это так, если W лежит в C_0^∞ (задача 20) или в $L^{m/2}$ с $m \geqslant 3$.

Применяя методы, совершенно отличные от обсуждаемых в настоящем разделе, иногда можно получить более детальные сведения об асимптотиках собственных значений. Вот типичный результат:

Теорема XIII.82½. Пусть H_0 — оператор $-d^2/dx^2$ в $L^2(0, 1)$ с граничными условиями $u(0)=u(1)=0$. Пусть $E_n(V)$ есть n-е собственное значение H_0+V. Тогда для $V \in L^\infty(0, 1)$

$$\lim_{n \to \infty} \left\{ E_n(V) - (n\pi)^2 - \int_0^1 V(x)\, dx \right\} = 0.$$

Доказательство. Пусть $V \in L^\infty$ и $\psi_n(a)$ — собственный вектор $H(a) \equiv H_0 + aV$, отвечающий собственному значению $E_n(a) = E_n(aV)$. Из результатов § XII.2 вытекает, что, поскольку $H(a)$ обладает только простыми собственными значениями $E_n(a)$, они являются вещественно аналитическими функциями. В частности, в силу явных формул § XII.1,

$$\frac{dE_n(a)}{da} = (\psi_n(a), V\psi_n(a)),$$

$$\frac{d^2E_n(a)}{da^2} = -(V\psi_n(a), R_n(a)V\psi_n(a)),$$

где $R_n(a)$ — оператор вида $(I-P_n(a))(H(a)-E_n(a))^{-1}$, P_n — проектор на ψ_n. Из первой формулы получаем $|E_n(1)-E_n(0)| \leqslant \|V\|_\infty$, и в частности, поскольку $E_n(0) = (n\pi)^2$, имеем

$$|E_n(a) - E_{n-1}(a)| \geqslant (2n-1)\pi^2 - 2\|V\|_\infty a.$$

Отсюда для некоторого N_0 и всех $a \in (0, 1)$

$$R_n(a) = \max(|E_n(a) - E_{n-1}(a)|^{-1}, \ |E_n(a)| - E_{n+1}(a)|^{-1}) \leqslant cn^{-1}$$

при всех $n \geqslant N_0$. Таким образом, для таких a и n имеет место оценка $d^2E_n(a)/da^2 \leqslant c\|V\|_\infty^2 n^{-1}$, так что по формуле остаточного члена в разложении Тейлора

$$\left| E_n(1) - (n\pi)^2 - \frac{dE_n}{da}(0) \right| \leqslant \frac{c}{2} \|V\|_\infty^2 n^{-1}.$$

Поскольку $\psi_n(0) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$, мы заключаем, что $dE_n/da = \tilde{V}(0) - {}^1/_2\tilde{V}(2n) - {}^1/_2\tilde{V}(-2n)$ при $a=0$, где $\tilde{V}(m) = \int_0^1 e^{-imn\pi x}V(x)\,dx$.

Но тогда по лемме Римана—Лебега $\tilde{V}(m) \to 0$ при $m \to \infty$, так что $dE_n/da \to \tilde{V}(0)$ при $n \to \infty$. ∎

Заметим, что ошибка $E_n(V) - (n\pi)^2 - \int_0^1 V(x)\,dx$ есть сумма двух членов, один из которых равен $O(n^{-1})$, а другой $\mathrm{Re}\,\tilde{V}(2n)$. Для гладких V этот член также равен $O(n^{-1})$, но в общем случае $\sup_{n \geqslant m} \tilde{V}(2n)$ может убывать как угодно медленно. Полученный результат существенно зависит от одномерности задачи, ибо только в одномерном случае расстояние между собственными значениями H_0 растет при $n \to \infty$.

XIII.16. Операторы Шредингера с периодическими потенциалами

В этом разделе изучаются операторы Шредингера $-\Delta + V$ с периодической функцией V, т. е. предполагается, что для некоторого базиса $\{\mathrm{a}_i\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}^n$ потенциал V удовлетворяет соотношению

$$V(\mathrm{x} + \mathrm{a}_i) = V(\mathrm{x}). \tag{135}$$

Как объясняется дальше, такие операторы играют важную роль в физике твердого тела.

Мы уже знаем, что спектральные свойства операторов Шредингера сильно зависят от поведения V на бесконечности, и нам известны три различных класса шредингеровых операторов. Во-первых, это операторы, у которых $V(x) \to \infty$ при $x \to \infty$. Их спектральные свойства было проще всего установить: существенный спектр таких операторов пуст (теорема XIII.16). Другой простейший класс состоял из «одночастичных операторов Шредингера», у которых $V(x) \to 0$ при $x \to \infty$, по крайней мере в некотором «усредненном» смысле (например так, что $V \in L^p(\mathbb{R}^n, dx)$ при некотором $p < \infty$); при довольно общих предположениях у этих операторов $\sigma_{\text{ess}} = [0, \infty)$ (см. теорему XIII.15), а их сингулярный спектр пуст (теорема XIII.33). Третий класс состоял из «N-частичных операторов Шредингера», у которых $V(x) \to 0$ при $x \to \infty$ по «большинству» направлений (т. е. по тем направлениям, где все «координатные» разности $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \to \infty$), но у которых V не имеет предела в трубах около тех пространственных направлений, где $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$ (для каких-то i, j). Анализ этих операторов был значительно труднее; мы установили, что при достаточно общих условиях $\sigma_{\text{ess}} = [\Sigma, \infty)$, где Σ — число (теорема XIII.17), которое можно найти, но доказать, что $\sigma_{\text{sing}} = \varnothing$, мы смогли только при весьма специальных предположениях (теоремы XIII.27, XIII.29 и XIII.36). Итак, спектральные свойства $-\Delta + V$ весьма чувствительны к поведению V на бесконечности, а поскольку V, удовлетворяющий (135), не имеет предела при $x \to \infty$ по любому направлению, можно ожидать, что анализ периодических операторов Шредингера будет достаточно трудным.

Свойство, которое все-таки позволяет провести анализ оператора $H = -\Delta + V$, когда V — периодическая функция, состоит в том, что он симметричен относительно действия обширной группы. В самом деле, полагая

$$(U(\mathbf{t})\psi)(\mathbf{x}) = \psi\left(\mathbf{x} + \sum_{i=1}^{n} t_i \mathbf{a}_i\right),$$

где $\mathbf{t} \in \mathbb{Z}^n$, мы видим, что (формально)

$$U(\mathbf{t}) H = H U(\mathbf{t}). \tag{136}$$

Можно доказать, что $U(\mathbf{t}) e^{-isH} = e^{-isH} U(\mathbf{t})$ (задача 135). Благодаря этому некоторая часть анализа свойств H представляет собой частный случай излагаемых в гл. XVI общих соображений, основанных на существовании симметрии. С этой точки зрения, здесь еще рано обсуждать эти вопросы. Заметим, однако, что прямые интегралы с одинаковыми слоями, описываемые ниже, дают пример (содержащий большинство существенных черт) общей конструкции гл. XVI и что возможность разложения периодических операторов Шредингера в прямой интеграл вытекает непосредственно из (136). Отметим еще тот исторический факт, что основные моменты такого разложения были открыты и математиками (Флоке), и физиками (Блох), которые, однако, не сознавали, что говорят на языке теории групп. Мы также не будем здесь явно использовать связь с группой симметрий, а разовьем всю теорию более прямым способом.

Итак, пусть $\mathcal{H}'$ — сепарабельное гильбертово пространство и $\langle M, \mu \rangle$ — пространство с σ-конечной мерой. В § II.1 было по строено гильбертово пространство $L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ квадратично интегрируемых $\mathscr{H}'$-значных функций. Заметим, что если μ — сумма точечных мер, сосредоточенных в точках $m_1, \ldots, m_n$, то любая $f \in L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ определена набором $\langle f(m_1), \ldots, f(m_n)\rangle$, так что $L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ изоморфно прямой сумме $\bigoplus_{i=1}^{m} (\mathscr{H}_i = \mathscr{H}')$. Тогда $L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ для более общих мер μ есть своего рода «непрерывная прямая сумма», но с одинаковыми слагаемыми. По этой причине назовем $\mathscr{H} \equiv L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ **прямым интегралом пространств с одинаковыми слоями** и будем писать

$$\mathscr{H} = \int_M^{\oplus} \mathscr{H}' \, d\mu.$$

Может показаться глупым давать странное новое название хорошо знакомому старому объекту; это сделано с целью перенести акцент с точек пространства M на «слои» $\mathscr{H}'$. Нас будет интересовать специальный класс операторов на $\mathscr{H}$. Функция $A(\cdot)$ из M в $\mathscr{L}(\mathscr{H}')$ называется измеримой тогда и только тогда, когда измерима функция $(\varphi, A(\cdot)\psi)$ для любых $\varphi, \psi \in \mathscr{H}'$. Символ $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$ обозначает пространство (классов эквивалентности равных п. в.) измеримых функций из M в $\mathscr{L}(\mathscr{H}')$, таких, что

$$\|A\|_\infty \equiv \operatorname{ess\,sup} \|A(m)\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H}')} < \infty.$$

Определение. Говорят, что ограниченный оператор A на $\mathscr{H} = \int_M^{\oplus} \mathscr{H}' \, d\mu$ **разложен** прямым интегралом пространств тогда и только тогда, когда существует функция $A(\cdot) \in L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$, такая, что для всех $\psi \in \mathscr{H}$

$$(A\psi)(m) = A(m)\psi(m). \tag{137}$$

В таком случае мы называем A **разложимым** и пишем

$$A = \int_M^{\oplus} A(m) \, d\mu(m);$$

$A(m)$ называются **слоями** оператора A.

Отметим прежде всего, что с каждой функцией $A(\cdot)$ из $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$ связан некоторый разложимый оператор.

Теорема XIII.83. Если $A(\cdot) \in L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$, то существует однозначно определенный разложимый оператор $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, такой, что выполняется (137). Более того, $\|A\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H})} = \|A(\cdot)\|_\infty$.

Доказательство. Единственность очевидна. Надо только показать, что преобразование, задаваемое формулой (137), переводит измеримые квадратично интегрируемые $\mathscr{H}'$-значные функции ψ в измеримые квадратично интегрируемые $\mathscr{H}'$-значные функции и что так определенный оператор A ограничен и имеет норму $\|A(\cdot)\|_\infty$. Пусть $\psi \in L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$. Пусть $\{\eta_k\}_{k=1}^\infty$ — ортонормированный базис в $\mathscr{H}'$. Тогда $A(m)\psi(m) = \sum_{k=1}^\infty (\eta_k, \psi(m)) A(m)\eta_k$ почти всюду по m, поскольку $A(\cdot)$ — ограниченный почти всюду оператор. Далее, по определению измеримости $A(\cdot)$ функция $A(m)\eta_k$ слабо измерима, так что $\varphi_N(m) \equiv \sum_{k=1}^N (\eta_k, \psi(m)) A(m)\eta_k$ сильно измерима для любого $N < \infty$ (теорема IV.22). Более того,

$$\int \|\varphi_N(m)\|^2 d\mu = \int \left\| A(m) \sum_{k=1}^N (\eta_k, \psi(m))\eta_k \right\|^2 d\mu \leqslant$$
$$\leqslant \|A(\cdot)\|_\infty^2 \int \left\| \sum_{k=1}^N (\eta_k, \psi(m))\eta_k \right\|^2 d\mu \leqslant \|A(\cdot)\|_\infty^2 \|\psi\|^2. \qquad (138)$$

Аналогичное вычисление показывает, что φ_N — последовательность Коши в $\mathscr{H}$ и потому она имеет предел $\varphi \in L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$. Но $\varphi_N(m)$ сходится к $A(m)\psi(m)$ в $\mathscr{H}'$ для почти всех $m \in M$. Следовательно, $A(\cdot)\psi(\cdot) \in L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$. В силу (138)

$$\|A(\cdot)\psi(\cdot)\| \leqslant \|A\|_\infty \|\psi\|,$$

так что A ограничен и $\|A\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H})} \leqslant \|A(\cdot)\|_\infty$.

Для доказательства обратного неравенства предположим, что $\{\beta_k\}_{k=1}^\infty$ — плотное подмножество единичного шара в $\mathscr{H}'$, и пусть $f \in L^1(M, d\mu)$. Функцию f можно представить в виде $f = gh$, где $g, h \in L^2$ и $\|g\|_2^2 = \|h\|_2^2 = \|f\|_1$. Фиксируем k, l, и пусть $\psi = \bar{g}\beta_k$ и $\varphi = h\beta_l$. Тогда

$$\left| \int f(m)(\beta_k, A(m)\beta_l)\, d\mu \right| = |(\psi, A\varphi)| \leqslant \|A\| \|\psi\| \|\varphi\| \leqslant$$
$$\leqslant \|A\| \|\beta_k\| \|\beta_l\| \int |f(m)|\, d\mu.$$

Поскольку $L^\infty(M)$ сопряжено $L^1(M)$, то

$$|(\beta_k, A(m)\beta_l)| \leqslant \|\beta_k\| \|\beta_l\| \|A\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H})}$$

почти всюду по m. Отсюда $\|A(\cdot)\|_\infty \leqslant \|A\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H})}$. ∎

Доказанная теорема устанавливает изометрический изоморфизм между $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$ и множеством разложимых операторов на $\int_M^\oplus \mathscr{H}'\, d\mu$. Оба эти пространства суть алгебры, и легко понять, что при описанном изоморфизме сохраняются и алгебраические структуры. $L^\infty(M, d\mu; \mathbb{C})$ — естественная подалгебра в $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$, отвечающая тем разложимым операторам, у которых все слои кратны единичному оператору.

Теорема XIII.84. Пусть $\mathscr{H}=\int_M^\oplus \mathscr{H}'\,d\mu$, где $\langle M, \mu\rangle$ — сепарабельное пространство с σ-конечной мерой и $\mathscr{H}'$ сепарабельно. Пусть $\mathscr{A}$ — алгебра разложимых операторов со слоями, кратными единичному оператору. В таком случае $A\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$ разложим тогда и только тогда, когда A коммутирует с каждым оператором из $\mathscr{A}$.

Доказательство. Очевидно, что любой разложимый оператор A коммутирует со всеми операторами из $\mathscr{A}$, так что в доказательстве нуждается только обратное утверждение. Поскольку μ есть σ-конечная мера, можно найти строго положительную функцию $F\in L^1$, такую, что $d\nu=F\,d\mu$ имеет единичную массу. Пусть $\tilde{\mathscr{H}}=\int_M^\oplus \mathscr{H}'\,d\nu$. В таком случае отображение $U\colon \mathscr{H}\to\tilde{\mathscr{H}}$, заданное формулой $Ug=F^{-1/2}g$, унитарно и $U\mathscr{A}U^{-1}=\tilde{\mathscr{A}}$. Более того, A разложим тогда и только тогда, когда разложим UAU^{-1}. В итоге без ограничения общности можно предположить, что $\int d\mu=1$.

Предположим, что A из $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ коммутирует с любым оператором из $\mathscr{A}$. Выберем в $\mathscr{H}'$ ортонормированный базис $\{\eta_k\}_{k=1}^\infty$ и предположим, что F_k — элемент $\mathscr{H}$, такой, что $F_k(x)=\eta_k$ для всех x. Семейство F_k ортонормировано в силу условия $\int d\mu=1$. Кроме того, для каждого $\psi\in\mathscr{H}$ справедливо разложение $\psi=\sum_{k=1}^\infty f_k(x)F_k$, в котором каждая функция $f_k\in L^2(M, d\mu; \mathbb{C})$ и $\|\psi\|^2=\sum_k\|f_k\|^2$ (см. задачу 12 к гл. II). Введем функции $a_{km}(x)$ равенством $AF_k=\sum_{m=1}^\infty a_{km}(x)F_m$. Выберем плотное в $\mathscr{H}'$ счетное множество D, состоящее из векторов вида $\sum_{k=1}^N \alpha_k\eta_k=\varphi$, и положим $A(x)\varphi=\sum_{k,m}\alpha_k a_{km}(x)\eta_m$. Тогда для любой $f\in L^\infty(M, d\mu; \mathbb{C})$

$$A(f\varphi)=f(A\varphi)=\sum_k^N f\alpha_k AF_k=\sum_{k,m} f\alpha_k a_{km}(\cdot)F_m$$

в силу того, что $fI\in\mathscr{A}$. Таким образом,

$$\int |f(x)|^2\sum_m\Big|\sum_k\alpha_k a_{km}(x)\Big|^2 d\mu(x)\leqslant\|A\|^2\Big(\int|f(x)|^2\,d\mu\Big)\sum_k|\alpha_k|^2.$$

Отсюда вытекает, что для почти всех x и всех $\varphi \in D$

$$\|A(x)\varphi\| \leqslant \|A\| \|\varphi\|,$$

так что $A(x)$ можно расширить до оператора на $\mathscr{L}(\mathscr{H}')$ и $A(\cdot) \in L^\infty$. Пусть B — соответствующий разложимый оператор. Пусть $\psi \in \mathscr{H}$ представим в виде $\psi = \sum\limits_{k=1}^{N} f_k(x) F_k$, где $f_k \in L^\infty$. Тогда

$$\begin{aligned}(A\psi)(x) &= \sum_{k=1}^{N} f_k(x)(AF_k(x)) = \sum_{k=1}^{N} f_k(x)(A(x)\eta_k) = \\ &= A(x) \sum_{k=1}^{N} f_k(x)\eta_k = (B\psi)(x).\end{aligned}$$

Поскольку множество таких ψ плотно, $A = B$. ∎

Применяемая нами ниже конструкция существенно опирается на то, что $U(t)$ порождает алгебру, изоморфную алгебре $\mathscr{A}$, отвечающей подходящему разложению $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ в прямой интеграл с одинаковыми слоями.

Поскольку $-\Delta + V$ — неограниченный оператор, нужно сказать несколько слов о неограниченных разложимых самосопряженных операторах.

Определение. Функция $A(\cdot)$ из пространства с мерой $\langle M, \mu \rangle$ во множество самосопряженных (не обязательно ограниченных) операторов на гильбертовом пространстве $\mathscr{H}'$ называется **измеримой** тогда и только тогда, когда измерима функция $(A(\cdot) + i)^{-1}$. Зная такую функцию, мы определяем оператор A в $\mathscr{H} = \int_M^\oplus \mathscr{H}' \, d\mu$ с областью определения

$$D(A) = \left\{ \psi \in \mathscr{H} \;\middle|\; \psi(m) \in D(A(m)) \text{ п. в.}, \int_M \|A(m)\psi(m)\|^2_{\mathscr{H}'} \, d\mu(m) < \infty \right\}$$

соотношением

$$(A\psi)(m) = A(m)\psi(m)$$

и пишем $A = \int_M^\oplus A(m)\, d\mu(m)$.

Свойства таких операторов суммирует

Теорема XIII.85. Пусть $A = \int_M^\oplus A(m)\, d\mu(m)$, где $A(\cdot)$ измерима и $A(m)$ — самосопряженный оператор для каждого m. Тогда

(a) оператор A самосопряжен;

(b) самосопряженный оператор A в $\mathcal{H}$ имеет вид $\int_M^{\oplus} A(m)\,d\mu$ тогда и только тогда, когда $(A+i)^{-1}$ есть ограниченный разложимый оператор;

(c) для любой борелевой функции F на $\mathbb{R}$

$$F(A)=\int_M^{\oplus} F(A(m))\,d\mu(m); \tag{139}$$

(d) $\lambda\in\sigma(A)$ тогда и только тогда, когда для любого $\varepsilon>0$

$$\mu(\{m\in M\mid\sigma(A(m))\cap(\lambda-\varepsilon,\ \lambda+\varepsilon)\neq\varnothing\})>0;$$

(e) λ есть собственное значение оператора A тогда и только тогда, когда

$$\mu(\{m\in M\mid\ \lambda \text{ есть собственное значение } A(m)\})>0;$$

(f) если спектр каждого $A(m)$ содержит только абсолютно непрерывную часть, то таков же и спектр A;

(g) предположим, что $B=\int_M^{\oplus} B(m)\,d\mu(m)$, причем каждый $B(m)$ самосопряжен. Если B ограничен относительно A и его A-грань равна a, то $B(m)$ почти всюду $A(m)$-ограничен и его $A(m)$-грань $a(m)\leqslant a$. Если $a<1$, то

$$A+B=\int_M^{\oplus}(A(m)+B(m))\,d\mu(m) \tag{140}$$

самосопряжен на $D(A)$.

Доказательство. (a) Заметим прежде всего, что A — симметрический оператор, поэтому в силу основного критерия самосопряженности (теорема VIII.3) нужно доказать только, что $\operatorname{Ran}(A\pm i)=\mathcal{H}$. Пусть $C(m)=(A(m)+i)^{-1}$. Согласно предположению теоремы, $C(m)$ измерима и $\|C(m)\|\leqslant 1$, так что мы можем определить $C=\int_M^{\oplus} C(m)\,d\mu(m)$. Пусть $\psi=C\eta$ с некоторым $\eta\in\mathcal{H}$. Тогда $\psi(m)\in\operatorname{Ran}C(m)=D(A(m))$ почти всюду и

$$\|A(m)\psi(m)\|=\|A(m)C(m)\eta(m)\|\leqslant\|\eta(m)\|\in L^2(d\mu),$$

так что $\psi\in D(A)$. Более того, $(A+i)\psi=\eta$, так что $\operatorname{Ran}(A+i)=\mathcal{H}$. Аналогично, $\operatorname{Ran}(A-i)=\mathcal{H}$, поскольку $(A(m)-i)^{-1}=C(m)^*$ слабо измерима.

(b) Доказательство этого утверждения мы оставляем читателю (задача 136).

(c) Приведем схему доказательства, оставляя детали читателю (задача 136). Согласно аргументам пункта (a), для любого λ с $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$

$$(A-\lambda)^{-1} = \int_M^{\oplus} (A(m)-\lambda)^{-1}\, d\mu(m).$$

Поскольку $e^{itA} = \lim\limits_{n\to\infty} (1-(itA/n))^{-n}$ (функциональное исчисление), то, применив теорему о мажорированной сходимости, можно получить равенство

$$e^{itA} = \int_M^{\oplus} e^{itA(m)}\, d\mu.$$

Если $F \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$, то (139) доказывается с помощью преобразования Фурье, а тогда путем предельного перехода (139) переносится на произвольные F.

(d) Частным случаем формулы (139) служит равенство

$$P_{(a,\,b)}(A) = \int_M^{\oplus} P_{(a,\,b)}(A(m))\, d\mu.$$

Замечая, что $\lambda \in \sigma(A)$ тогда и только тогда, когда $P_{(\lambda-\varepsilon,\,\lambda+\varepsilon)}(A) \neq 0$ для всех $\varepsilon > 0$, и что $\int_M^{\oplus} T(m)\, d\mu = 0$ тогда и только тогда, когда $T(m) = 0$ почти всюду, легко выводим (d).

(e) Доказательство можно провести так же, как в пункте (d), если основываться на равенстве

$$P_{\{\lambda\}}(A) = \int_M^{\oplus} P_{\{\lambda\}}(A(m))\, d\mu.$$

(f) Пусть $\psi \in \mathscr{H}$ и $d\nu$ — спектральная мера A, ассоциированная с ψ. Пусть $d\nu_m$ — спектральная мера $A(m)$, ассоциированная с $\psi(m)$. Тогда $d\nu = \int_M (d\nu_m)\, d\mu(m)$ в том смысле, что

$$\int_{\mathbb{R}} F(x)\, d\nu = \int_M \left(\int_{\mathbb{R}} F(x)\, d\nu_m \right) d\mu(m). \tag{141}$$

Это утверждение немедленно вытекает из (139). Если теперь спектр каждого оператора $A(m)$ содержит только абсолютно непрерывную часть, то $d\nu_m(x) = g_m(x)\, dx$ с некоторой функцией $g_m \in L^1(\mathbb{R}, dx)$, такой, что $\int g_m(x)\, dx = \|\psi(m)\|^2_{\mathscr{H}'}$. Таким образом, функция

$$g(x) = \int_M g_m(x)\, d\mu(m)$$

лежит в $L^1(\mathbb{R}, dx)$ и, в силу (141),

$$d\nu = g(x)\,dx.$$

Отсюда $\psi \in \mathscr{H}_{ac}$ для оператора A, так что спектр A содержит только абсолютно непрерывную часть.

(g) Если $\|B\psi\| \leqslant a\|A\psi\| + b\|\psi\|$, то $\|B(A+ik)^{-1}\| \leqslant a + bk^{-1}$ для любого положительного целого k. Следовательно,

$$\|B(m)(A(m)+ik)^{-1}\| \leqslant a + bk^{-1}$$

почти всюду, и потому $B(m)$ ограничен относительно $A(m)$ и его $A(m)$-грань $a(m) \leqslant a$. Соотношение (140) очевидно. ∎

Часть (f) последней теоремы дает достаточное условие абсолютной непрерывности спектра оператора $A = \int_M^{\oplus} A(m)\,d\mu(m)$. Но это условие, конечно, не является необходимым. На самом деле A может иметь только абсолютно непрерывный спектр даже тогда, когда у каждого $A(m)$ спектр будет чисто дискретным! Следующая теорема иллюстрирует это явление.

Теорема XIII.86. Пусть $\langle M, d\mu\rangle$ — отрезок $[0, 1]$ с мерой Лебега. Пусть $\mathscr{H}'$ — фиксированное сепарабельное бесконечномерное пространство и $A = \int_{[0,1]}^{\oplus} A(m)\,d\mu(m)$, где каждый $A(m)$ самосопряжен. Предположим, что заданы $\mathscr{H}'$-значные функции $\{\psi_n(\cdot)\}_{n=1}^{\infty}$ на $[0, 1]$, вещественно аналитические на $(0, 1)$ и непрерывные на $[0, 1]$, и комплекснозначные функции $E_n(\cdot)$, аналитические в окрестности $[0, 1]$, такие, что

(i) среди $E_n(\cdot)$ нет постоянных функций;
(ii) $A(m)\psi_n(m) = E_n(m)\psi_n(m)$ для всех $m \in [0, 1]$, $n = 1, 2, \ldots$;
(iii) множество $\{\psi_n(m)\}_{n=1}^{\infty}$ для каждого m есть ортонормированный базис в $\mathscr{H}'$.

Тогда спектр A абсолютно непрерывен.

Доказательство. Пусть

$$\mathscr{H}_n = \{\psi \in \mathscr{H} \mid \psi(m) = f(m)\psi_n(m);\ f \in L^2(M; d\mu)\}.$$

Тогда $\mathscr{H}_n$ — замкнутые попарно ортогональные подпространства и $\mathscr{H} = \bigoplus \mathscr{H}_n$, поскольку для любого $\psi \in \mathscr{H}$ справедливо следующее разложение (задача 134):

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} (\psi_n(m), \psi(m))\,\psi_n(m).$$

Более того, каждое $\mathscr{H}_n$ лежит в $D(A)$, причем $A[\mathscr{H}_n] \subset \mathscr{H}_n$. Рассмотрим унитарное отображение U_n: $\mathscr{H}_n \to L^2([0, 1], dx)$, задаваемое формулой $U_n(f(m)\psi_n(m))=f(m)$. Тогда $A_n \equiv U_nAU_n^{-1}$ задается равенством

$$(A_nf)(m)=E_n(m)f(m). \tag{142}$$

Нужно доказать только, что спектр каждого A_n абсолютно непрерывен. Поскольку функция $E_n(\cdot)$ аналитична в окрестности $[0, 1]$ и непостоянна, у dE_n/dm только конечное число нулей, скажем $m_1, \ldots, m_{k-1}$ в $(0, 1)$. Пусть $m_0=0$ и $m_k=1$. Тогда

$$L^2([0, 1], dx)=\bigoplus_{j=1}^{k} L^2((m_{j-1}, m_j), dx).$$

Оператор A_n оставляет каждое слагаемое инвариантным и действует на него по формуле (142). На каждом интервале (m_{j-1}, m_j) функция $E_n(\cdot)$ строго монотонна и либо возрастает, либо убывает. Рассмотрим случай, когда она возрастает. Введем α: $(E_n(m_{j-1}), E_n(m_j)) \to (m_{j-1}, m_j)$ соотношением $E_n(\alpha(\lambda))=\lambda$. Функция α дифференцируема, и мера Стильтьеса $d\alpha$ абсолютно непрерывна относительно меры dx. В самом деле,

$$d\alpha=\left[\left(\frac{dE}{dm}\right)\Big|_{m=\alpha(\lambda)}\right]^{-1} d\lambda.$$

Пусть U — унитарный оператор из $L^2((m_{j-1}, m_j), dx)$ в $L^2((E_n(m_{j-1}), E_n(m_j)), d\lambda)$, заданный равенством

$$(Uf)(\lambda)=\left(\frac{d\alpha}{d\lambda}\right)^{1/2} f(\alpha(\lambda)).$$

Тогда

$$(UA_nU^{-1})\,g(\lambda)=\lambda g(\lambda).$$

Таким образом, мы построили явное спектральное представление $A_n \restriction L^2([m_{j-1}, m_j], dx)$, для которого спектральная мера $d\alpha$ есть мера Лебега. Отсюда следует, что спектр каждого A_n, а потому и всего A абсолютно непрерывен. ∎

Вернемся теперь к анализу операторов Шредингера с периодическими потенциалами. Рассмотрим сначала одномерный случай с кусочно непрерывной функцией V, когда применимы методы теории дифференциальных уравнений, а затем обсудим более высокие размерности и более общие V.

Для пояснения идеи, лежащей в основе последующего анализа, предположим, что $V \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ обладает ограниченными производными, так что $-d^2/dx^2+V$ переводит $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ в себя. Если $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, то

$$\left[\left(-\frac{d^2}{dx^2}+V\right)f\right]^{\wedge}(p)=p^2\hat{f}(p)+\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \hat{V}(p-p')\,\hat{f}(p')\,dp', \tag{143}$$

где интеграл в (143) есть просто формальный символ свертки обобщенной функции $\hat{V}$ с функцией $\hat{f}$. Предположим теперь, что V обладает периодом 2π (2π-периодичен). Тогда V имеет равномерно сходящийся ряд Фурье (см. теорему II.8)

$$V(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n e^{inx}, \tag{144}$$

где $\tilde{V}_n=\int_{-\pi}^{\pi}V(x)\,e^{-inx}\frac{dx}{2\pi}$. Равенство (144) подсказывает, что

$$(2\pi)^{-1/2}\hat{V}(p)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n\delta(p-n), \tag{145}$$

ибо формальная подстановка (145) в формулу обращения Фурье даст (144). Точнее, (145) можно доказать следующим образом: если $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R})$, то из равномерной сходимости в (144) следует, что

$$\int f(x)V(x)\,dx=\sqrt{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n\hat{f}(n),$$

откуда получается (145), если сходимость суммы понимать в смысле слабой ($\sigma(\mathcal{S}',\mathcal{S})$) топологии на $\mathcal{S}'$.

Теперь, когда мы исследовали преобразование Фурье периодических обобщенных функций умеренного роста, можно воспользоваться этим и переписать (143) в следующем виде:

$$\left[\left(-\frac{d^2}{dx^2}+V\right)f\right]^{\wedge}(p)=p^2\hat{f}(p)+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n\hat{f}(p-n).$$

Таким образом, если $H=-d^2/dx^2+V$, то $\widehat{Hf}(p)$ зависит только от значений $\hat{f}(p-n)$, $n\in Z$. В итоге доказана

Теорема XIII.87 (разложение в прямой интеграл периодических операторов Шредингера — одномерное p-пространство). Пусть $\mathcal{H}'=l_2$ и $\mathcal{H}=\int_{(-1/2,\,1/2]}^{\oplus}\mathcal{H}'\,dq$. Пусть для $q\in(-1/2,\,1/2]$

$$(H(q)\,g)_l=(q+l)^2g_l+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n g_{l-n},$$

где $\tilde{V}_n$ — коэффициенты ряда Фурье некоторой 2π-периодической функции $V\in C^{\infty}(\mathbb{R})$. Отобразим $L^2(\mathbb{R},dx)$ в $\mathcal{H}$ с помощью $[(Uf)(q)]_l=\hat{f}(q+l)$. Пусть $H=-d^2/dx^2+V$ действует в $L^2(\mathbb{R})$.

Тогда

$$UHU^{-1} = \int\limits_{(-1/2,\ 1/2]}^{\oplus} H(q)\,dq.$$

Основываясь на таком варианте разложения в прямой интеграл, можно достаточно далеко продвинуться в анализе H, и такой подход будет основным при изучении многомерного случая. Однако в одномерном случае перевод теоремы XIII.87 на язык x-пространства дает несколько больше. И хотя теорему XIII.87 можно сформулировать прямо на языке x-пространства, мы предпочитаем дать независимое доказательство соответствующих фактов, используя теорему XIII.87 просто как наводящее соображение. Действительно, в случае $V=0$ оператор $H(q)$ обладает собственными значениями $(q+j)^2$ и собственными функциями, которые суть фурье-образы функций $\exp[i(q+j)x]$. Это наводит на мысль, что $H(q)$ как-то связан с оператором $-d^2/dx^2$ на $L^2([0, 2\pi], dx)$, но с граничными условиями

$$\psi(2\pi) = e^{2\pi i q}\psi(0), \quad \psi'(2\pi) = e^{2\pi i q}\psi'(0).$$

Лемма. Пусть $\mathcal{H}' = L^2([0, 2\pi], dx)$. Пусть

$$\mathcal{H} = \int\limits_{[0,\ 2\pi)}^{\oplus} \mathcal{H}' \frac{d\theta}{2\pi}. \tag{146}$$

Тогда отображение U: $L^2(\mathbb{R}, dx) \to \mathcal{H}$, задаваемое соотношением

$$(Uf)_\theta(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta n} f(x+2\pi n) \tag{147}$$

для θ и x в $[0, 2\pi)$, корректно определено для $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ и однозначно продолжимо до унитарного оператора. Более того,

$$U\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)U^{-1} = \int\limits_{[0,\ 2\pi)}^{\oplus} \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta \frac{d\theta}{2\pi}, \tag{148}$$

где $(-d^2/dx^2)_\theta$ есть оператор $-d^2/dx^2$ на $L^2([0, 2\pi], dx)$ с граничными условиями вида

$$\psi(2\pi) = e^{i\theta}\psi(0), \quad \psi'(2\pi) = e^{i\theta}\psi'(0).$$

Доказательство. Ясно, что сумма (147) сходится при $f \in \mathcal{S}$. Для доказательства принадлежности Uf пространству $\mathcal{H}$ вычислим $\|Uf\|$ для $f\in\mathcal{S}\cdot$

$$\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{2\pi}\left|\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta}f(x+2\pi n)\right|^2 dx\right)\frac{d\theta}{2\pi}=$$

$$=\int_0^{2\pi}\left[\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{j=-\infty}^{\infty}\overline{f(x+2\pi n)}\,f(x+2\pi j)\right)\int_0^{2\pi}e^{-i(j-n)\theta}\frac{d\theta}{2\pi}\right]dx=$$

$$=\int_0^{2\pi}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}|f(x+2\pi n)|^2\right)dx=\int_{-\infty}^{\infty}|f(x)|^2\,dx,$$

где мы применили теоремы Фубини и Планшереля. Итак, U корректно определен и однозначно продолжим до изометрии. Для того чтобы убедиться в его сюръективности, вычислим U^*. Для $g\in\mathcal{H}$ и $0\leqslant x\leqslant 2\pi$, $n\in\mathbb{Z}$ определим

$$(U^*g)(x+2\pi n)=\int_0^{2\pi}e^{in\theta}g_\theta(x)\,\frac{d\theta}{2\pi}. \tag{149}$$

Прямое вычисление показывает, что это действительно формула для сопряженного к U. Более того,

$$\|U^*g\|_2^2=\int_{-\infty}^{\infty}|(U^*g)(y)|^2\,dy=\int_0^{2\pi}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}|(U^*g)(2\pi n+x)|^2\right)dx=$$

$$=\int_0^{2\pi}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left|\int e^{in\theta}g_\theta(x)\,\frac{d\theta}{2\pi}\right|^2\right)dx=\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{2\pi}|g_\theta(x)|^2\frac{d\theta}{2\pi}\right)dx=\|g\|^2,$$

где мы применили равенство Парсеваля для рядов Фурье.

Для проверки соотношения (148) обозначим через A оператор, стоящий в его правой части. Покажем, что если $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R})$, то $Uf\in D(A)$ и $U(-f'')=A(Uf)$. Отсюда (148) будет вытекать в силу самосопряженности $-d^2/dx^2$ на $\mathcal{S}$ в существенном и самосопряженности A. Итак, пусть $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Тогда Uf дается сходящейся суммой (147), так что Uf бесконечно дифференцируема на $(0, 2\pi)$, причем $(Uf)_\theta'(x)=(Uf')_\theta(x)$ и аналогично для высших производных. Ясно также, что

$$(Uf)_0(2\pi)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-i\theta n}f(2\pi(n+1))=$$

$$=\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-i\theta(n-1)}f(2\pi n)=e^{i\theta}(Uf)_\theta(0).$$

Аналогично, $(Uf)_\theta'(2\pi)=e^{i\theta}(Uf_\theta)'(0)$. Таким образом, $(Uf)_\theta\in D((-d^2/dx^2)_\theta)$ для каждого θ и

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta(Uf)=U(-f'')_\theta.$$

Отсюда заключаем, что $Uf \in D(A)$ и $A(Uf) = U(-f'')$. Это доказывает (148). ∎

Теорема XIII.88 (разложение в прямой интеграл периодических операторов Шредингера — одномерное x-пространство). Пусть V — ограниченная измеримая 2π-периодическая функция на $\mathbb{R}$. Для $\theta \in [0, 2\pi)$ пусть

$$H(\theta) = \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta + V(x)$$

— оператор в $L^2([0, 2\pi])$. Пусть U задан формулой (147). Тогда при разложении (146)

$$U\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V\right)U^{-1} = \int_{[0,\,2\pi)}^{\oplus} H(\theta)\,\frac{d\theta}{2\pi}. \tag{150}$$

Доказательство. Пусть V — не зависящий от θ оператор, действующий в слое $\mathcal{H}' = L^2([0, 2\pi), dx)$ по формуле

$$(V_\theta f)(x) = V(x)f(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 2\pi.$$

Равенство (150) будет вытекать из теоремы XIII.85(g) и леммы, если мы сможем доказать, что

$$UVU^{-1} = \int_{[0,\,2\pi)}^{\oplus} V_\theta\,\frac{d\theta}{2\pi}. \tag{151}$$

В силу (147), для $f \in \mathcal{S}$ с учетом периодичности V

$$\begin{aligned}(UVf)_\theta(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta}V(x+2\pi n)f(x+2\pi n) = \\ &= V(x)\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta}f(x+2\pi n) = V_\theta(Uf)_\theta(x).\end{aligned}$$

Это доказывает (151), а потому и (150). ∎

В результате анализ операторов $-d^2/dx^2 + V$ с периодическим потенциалом V сводится к изучению $(-d^2/dx^2)_\theta + V$ при фиксированных значениях θ. Предварительно отметим, что справедлива такая

Лемма. (a) Резольвента $(-d^2/dx^2)_\theta$ для каждого $\theta \in [0, 2\pi)$ — компактный оператор.

(b) $\exp(-t(-d^2/dx^2)_{\theta=0})$ для $\theta = 0$ — усиливающая положительность полугруппа (см. § 12).

(c) $[(-d^2/dx^2)_\theta + 1]^{-1}$ — аналитическая операторнозначная функция θ в окрестности $[0, 2\pi)$.

Доказательство. Ниже мы докажем аналогичную лемму в многомерном случае, используя общие соображения, применимые и здесь. Однако сейчас легко получить простую явную формулу для $K_\theta \equiv [(-d^2/dx^2)_\theta + 1]^{-1}$. Пусть $f \in C_0^\infty(0, 2\pi)$. Пусть K — оператор, обратный $-d^2/dx^2 + 1$ и заданный на всем $L^2(\mathbb{R})$. Пусть $g = Kf$. В силу рассуждений в § IX.7, K — интегральный оператор с ядром $G(x-y)$, причем $\hat{G}(p) = (2\pi)^{-1/2}(p^2+1)^{-1}$. Можно провести прямое вычисление G (задача 137), которое приводит к следующему ответу:

$$g(x) \equiv (Kf)(x) = \frac{1}{2}\int e^{-|x-y|} f(y)\, dy. \tag{152}$$

Функции Kf и $K_\theta f$ суть решения одного и того же дифференциального уравнения $-u''(x) + u(x) = f(x)$ на $(0, 2\pi)$. Поэтому их разность $v = K_\theta f - Kf$ удовлетворяет уравнению $-v'' + v = 0$, так что

$$(K_\theta f)(x) = g(x) + ae^x + be^{-x}.$$

Поскольку $K_\theta f \in D((-d^2/dx^2)_\theta)$, константы a и b следует выбрать такими, чтобы $K_\theta f$ удовлетворяла граничным условиям

$$u(2\pi) = e^{i\theta}u(0), \qquad u'(2\pi) = e^{i\theta}u'(0). \tag{153}$$

Прямое вычисление с помощью (152) дает

$$(K_\theta f)(x) = \int_0^{2\pi} G_\theta(x, y) f(y)\, dy,$$

$$G_\theta(x, y) = {}^1/_2 e^{-|x-y|} + \alpha(\theta) e^{x-y} + \beta(\theta) e^{y-x}, \tag{154}$$

$$\alpha(\theta) = {}^1/_2 (e^{2\pi - i\theta} - 1)^{-1}, \qquad \beta(\theta) = {}^1/_2 (e^{2\pi + i\theta} - 1)^{-1}.$$

Теперь свойства $(-d^2/dx^2)_\theta$ видны прямо из (154). Поскольку функция $G_\theta(x, y)$ ограничена по x, y при каждом фиксированном θ,

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} |G_\theta(x, y)|^2\, dx\, dy < \infty,$$

т. е. K_θ есть оператор Гильберта — Шмидта, и потому он компактен, как и утверждалось в (а). Явный вид $G_{\theta=0}(x, y)$ показывает, что это ядро строго положительно. Аналогичным образом можно убедиться, что ядро оператора $[(-d^2/dx^2)_{\theta=0} + a]^{-1}$ также строго положительно для любого $a > 0$, и потому, в силу теоремы XIII.44 и предшествующего ей предложения, $\exp(-t(-d^2/dx^2)_{\theta=0})$ образуют усиливающую положительность полугруппу. Наконец, для доказательства (с) заметим, что формула (154) позволяет определить оператор Гильберта — Шмидта

K_θ для любых комплексных θ с $|\operatorname{Im}\theta|<2\pi$, и потому $\theta\mapsto K_\theta$ — аналитическая функция по θ. ∎

На первый взгляд может показаться поразительным, что $K_\theta-K_{\theta'}$ есть оператор ранга два при любых θ и θ', но по существу этот факт отражает то, что индексы дефекта сужения $-d^2/dx^2 \upharpoonright C_0^\infty(0,\ 2\pi)$ равны $\langle 2,\ 2\rangle$, а потому K_θ полностью определяется независимым от θ образом на замыкании пространства $(-d^2/dx^2+1)[C_0^\infty(0,\ 2\pi)]$ коразмерности 2.

Анализ, аналогичный только что проведенному, показывает, что функция $((-d^2/dx^2)_\theta+a)^{-1}$ аналитична в области $|\operatorname{Im}\theta|<2\pi\sqrt{a}$, так что отображение $\theta\mapsto(-d^2/dx^2)_\theta$ можно продолжить до целого аналитического семейства. Это семейство не относится ни к типу (A), ни к типу (B).

Вооружившись доказанной леммой, мы подготовились к полному анализу операторов

$$H(\theta)=\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta+V. \tag{155}$$

Теорема XIII.89. Пусть V — кусочно непрерывная 2π-периодическая функция. Тогда

(a) спектр $H(\theta)$ чисто дискретен, а операторнозначная функция $\theta\mapsto H(\theta)$ вещественно аналитична по θ;

(b) $H(\theta)$ и $H(2\pi-\theta)$ антиунитарно эквивалентны относительно обычного комплексного сопряжения; в частности, их собственные значения совпадают, а собственные функции комплексно сопряжены;

(c) при $\theta\in(0,\ \pi)$ или $(\pi,\ 2\pi)$ оператор $H(\theta)$ имеет только невырожденные собственные значения;

(d) пусть $E_n(\theta)$ $(n=1,\ 2,\ \ldots;\ 0\leqslant\theta\leqslant\pi)$ есть n-е собственное значение $H(\theta)$; функция $E_n(\theta)$ аналитична в $(0,\ \pi)$ и непрерывна при $\theta=0$ и $\theta=\pi$;

(e) для нечетных (соответственно четных) n функция $E_n(\theta)$ строго монотонно возрастает (соответственно убывает) при изменении θ от 0 до π; в частности,

$$E_1(0)<E_1(\pi)\leqslant E_2(\pi)<$$
$$<E_2(0)\leqslant\ldots\leqslant E_{2n-1}(0)<$$
$$<E_{2n-1}(\pi)\leqslant E_{2n}(\pi)<E_{2n}(0)\leqslant\ldots,$$

см. рис. XIII.13;

(f) собственные функции $\psi_n(\theta)$ можно выбрать аналитическими по $\theta\in(0,\ \pi)\cup(\pi,\ 2\pi)$ и непрерывными в π и 0 (причем $\psi_n(0)=\psi_n(2\pi)$).

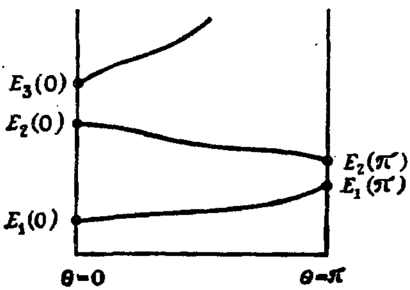


Рис. XIII.13. Зоны одномерных операторов Шредингера.

Доказательство. (a) следует прямо из леммы и основных теорем о возмущениях (теоремы XII.11 и XIII.64).

(b) При $V=0$ это простое следствие определения $(-d^2/dx^2)_\theta$. Поскольку $\overline{V\psi}=V\overline{\psi}$, сформулированные утверждения справедливы и при $V\neq 0$.

(c) Если E — собственное значение $H(\theta)$ при $\theta\in(0, \pi)$, то уравнение $-u''+Vu=Eu$ обладает решением, удовлетворяющим граничному условию (153). Функция $\bar{u}$ — решение этого же уравнения, но удовлетворяющее другим граничным условиям. Поскольку уравнение $-u''+Vu=Eu$ имеет только два линейно независимых решения и не все они удовлетворяют (153), нужное решение всего одно.

(d) Рассмотрим $E_1(0)$. Это простое собственное значение $H(0)$, поскольку $H(0)$ порождает полугруппу, сохраняющую положительность. Так как $H(\theta)$ аналитически зависит от θ вблизи $\theta=0$, можно найти собственное значение $\tilde{f}_1(\theta)$ оператора $H(\theta)$, аналитически зависящее от $\theta\in[0, \varepsilon)$ и такое, что $\tilde{f}_1(0)=E_1(0)$. Пусть $\varepsilon<\pi$. Единственной причиной, препятствующей аналитическому продолжению через точку $\theta=\varepsilon$, может быть лишь стремление $\tilde{f}_1(\theta)$ к ∞ при $\theta\uparrow\varepsilon$. В самом деле, если $\tilde{f}_1(\theta)$ не стремится к ∞, то, в силу неравенства $H(\theta)\geqslant-\|V\|_\infty$, должна существовать последовательность $\theta_n\to\varepsilon$, для которой $\tilde{f}_1(\theta_n)\to\tilde{E}$. Но тогда $\tilde{E}$ есть собственное значение $H(\varepsilon)$. В силу (c), это простое собственное значение, так что для $|\theta-\varepsilon|<\delta$ существует единственное собственное значение $g(\theta)$ оператора $H(\theta)$ около $\tilde{E}$ и функция g аналитична при $|\theta-\varepsilon|<\delta$. В частности, $g(\theta_n)=$ $=\tilde{f}_1(\theta_n)$ для больших n, и g дает аналитическое продолжение $\tilde{f}_1$ за точку ε. Таким образом, доказательство существования аналитического продолжения функции $\tilde{f}_1$ на весь отрезок $[0, \pi)$ сводится к доказательству конечности $\tilde{f}_1(\theta)$ при изменении θ внутри этого отрезка. Покажем сначала, что у $H(\theta)$ нет собственных значений, меньших $\tilde{f}_1(\theta)$, при $\theta\in[0, \varepsilon)$. Если бы такое собственное значение было, мы могли бы продолжить его обратно в точку $\theta=0$; это продолжение было бы конечным при уменьшении θ, поскольку оно всегда было бы строго меньше $\tilde{f}_1(\theta)$ в силу простоты собственных значений и в силу соображений, приведенных выше. В таком случае в $\theta=0$ мы нашли бы собственное значение, меньшее E_1, что невозможно. Теперь, поскольку $\tilde{f}_1(\theta)$ — наименьшее собственное значение $H(\theta)$ при $\theta\in[0, \varepsilon)$, оно не стремится к ∞ и при $\theta\to\varepsilon$. Таким образом, $\tilde{f}_1(\theta)$ обладает продолжением на весь отрезок $[0, \pi]$, и это продолжение — наименьшее собственное значение $H(\theta)$, т. е. равно $E_1(\theta)$.

Посмотрим теперь на $E_2(0)$. Оно может быть двукратно вырожденным; например, это так при $V=0$. Если это так, то при $\theta\neq 0$ вырождения быть не должно, ибо спектр $H(\theta)$ при $\theta\neq 0$ прост. По теории возмущений, охватывающей случай вырождения, собственное значение (или значения, если $E_2(0)$ вырождено) около $E_2(0)$ задается аналитической функцией (функциями). Пусть $\tilde{f}_2(\theta)$ — такая функция, если $E_2(0)$ — простое собственное значение, и меньшая из таких функций, если $E_2(0)$ вырожденно. Повторяя приведенные выше аргументы, можно продолжить $\tilde{f}_2(0)$ на весь отрезок $[0, \pi]$, и это даст второе собственное значение $E_2(\theta)$. Точно так же можно рассмотреть и все остальные собственные значения.

(е) Это наиболее глубокая часть теоремы, и потому мы дадим подробное доказательство. Сначала покажем, что $E_1(0)\leqslant E_1(\theta)$ при всех θ. В связи с тем что полугруппа $\exp[-tH(0)]$ усиливает положительность, собственный вектор $\psi_1(0)$, отвечающий $E_1(0)$, строго положителен и, в силу граничных условий, допускает периодическое продолжение на все $\mathbb{R}$. Фиксируем целое k и рассмотрим в качестве $H^{(k)}(0)$ оператор $-d^2/dx^2+V$ на $L^2(-2\pi k, 2\pi k)$ с периодическими граничными условиями. В таком случае периодически продолженный $\psi_1(0)$ есть строго положительный собственный вектор $H^{(k)}(0)$, и потому $E_1(0)=$ $=\inf\sigma(H^{(k)}(0))$ (см. § XIII.12). Тогда $(f, (-d^2/dx^2+V)f)=$ $=(f, H^{(k)}(0)f)\geqslant E_1(f, f)$, если $f\in C_0^\infty(-2\pi k, 2\pi k)$, и потому $-d^2/dx^2+V\geqslant E_1$ на $L^2(\mathbb{R})$. Воспользовавшись разложением в прямой интеграл, получаем, что $H(\theta)\geqslant E_1(0)$ для почти всех θ, значит, $E_1(\theta)\geqslant E_1(0)$ для почти всех θ, а поскольку $E_1(\theta)$ непрерывно зависит от θ, $E_1(\theta)\geqslant E_1(0)$ для всех $\theta\in(0, 2\pi)$.

Введем теперь важную величину $D(E)$, связанную с дифференциальным уравнением

$$-u''+Vu=Eu. \tag{156}$$

Пусть $u_1(E, x)$ — решение уравнения (156) с $u_1(0)=1$, $u_1'(0)=0$, а $u_2(E, x)$ — его решение с $u_2(0)=0$, $u_2'(0)=1$. Тогда, как известно из стандартной теории обыкновенных дифференциальных уравнений, $u_i(E, x)$ аналитически зависит от E при любом x. Пусть $M(E)$ — аналитическая 2×2-матрица

$$M(E)=\begin{bmatrix} u_1(E, 2\pi) & u_2(E, 2\pi) \\ u_1'(E, 2\pi) & u_2'(E, 2\pi)\end{bmatrix}. \tag{157}$$

Дискриминантом уравнения $-u''+Vu$ называют функцию

$$D(E)\equiv \operatorname{Tr}(M(E))=u_1(E, 2\pi)+u_2'(E, 2\pi).$$

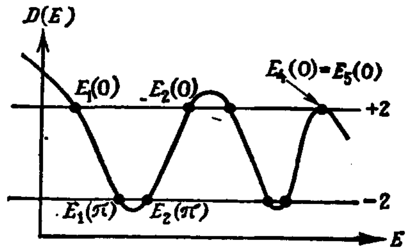


Рис. XIII.14. Типичный дискриминант.

Матрица $M(E)$ — довольно естественный объект, ибо если v удовлетворяет (156), то

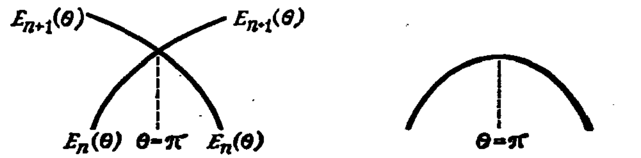
$$\begin{bmatrix} v(2\pi) \\ v'(2\pi) \end{bmatrix} = M(E) \begin{bmatrix} v(0) \\ v'(0) \end{bmatrix}.$$

В частности, уравнение $H(\theta)\psi = E\psi$ обладает ненулевым решением тогда и только тогда, когда $M(E)$ обладает собственным значением $e^{i\theta}$. Но детерминант $M(E)$ равен 1, поскольку $W(x) = u_1(E, x)u_2'(E, x) - u_1'(E, x)u_2(E, x)$ — константа, так что собственные значения $M(E)$ суть λ и λ^{-1} и $D(E) = \lambda + \lambda^{-1}$. Отсюда мы заключаем, что *E есть собственное значение $H(\theta)$ тогда и только тогда, когда $D(E) = 2\cos\theta$*. Мы будем доказывать, что график $D(E)$ имеет примерно такой вид, как на рис. XIII.14.

Мы уже доказали, что $E_1(0) \leqslant E_1(\theta)$ для всех θ, так что $D(E)$ не может принимать никакое значение из $[-2, 2]$ при $E < E_1(0)$. Но $D(E) = 2$ при $E = E_1(0)$. Когда θ изменяется от 0 до π, $D(E_1(\theta))$ изменяется от 2 до -2. Значит, функция $E_1(\cdot)$ должна строго монотонно убывать, поскольку она имеет обратную функцию $\arccos(^1/_2 D(E_1(\theta))) = \theta$. При $\theta = \pi$ имеем $D(E_1(\pi)) = -2$. График D в конечном счете поворачивает (поскольку у $H(\pi)$ есть дополнительное собственное значение), так что следующее значение $D(\theta)$ из $[-2, 2]$ равно -2. Оно отвечает точке $E_2(\pi)$, а затем D пробегает все значения от -2 до $+2$ при изменении θ от π до 0. В итоге и возникает картина типа изображенной на рис. XIII.14. Единственная тонкость — это доказательство того, что в точках $+2$ или -2 поворота графика D собственное значение $H(0)$ или $H(\pi)$ двукратно. Но ведь если $D(E)$ имеет точку поворота при $E = E_0$, причем в ней $D(E_0) = +2$, то для всех θ, близких к 0, у $H(\theta)$ два собственных значения вблизи E_0 в соответствии с тем, что у уравнения $D(E) = 2\cos\theta$ два решения около $E = E_0$. Согласно аналитической теории возмущений, E_0 должно быть двукратным собственным значением $H(0)$.

(f) Это утверждение вытекает из аналитической теории возмущений § XII.2. ∎

Читатель, возможно, заметил, что мы тщательно избегали утверждения об аналитичности $E_n(\theta)$ около $\theta = \pi$ или $\theta = 0$, хотя оно и справедливо. Однако если $E_n(\pi)$ — двукратно вырожденное собственное значение, то его продолжение через точку $\theta = \pi$ может оказаться равным $E_{n+1}(\theta)$ или $E_{n-1}(\theta)$ (см. рис. XIII.15).



(a) Вырожденное $E_n(\pi)$ (b) Невырожденное $E_n(\pi)$

Рис. XIII.15. Пересекающиеся зоны.

Аналогичное явление возможно при $\theta=0$, если отождествлять θ и $\theta-2\pi$.

Теперь мы можем собрать утверждения теорем XIII.85, 86, 88 и 89 и получить такую теорему:

Теорема XIII.90. Пусть V — кусочно непрерывная функция с периодом 2π. Пусть $H=-d^2/dx^2+V$ на $L^2(\mathbb{R}, dx)$. Пусть $E_1(0)$, $E_2(0)$, ... — собственные значения соответствующего оператора на $(0, 2\pi)$ с периодическими граничными условиями, и пусть $E_1(\pi)$, ... — собственные значения с антипериодическими граничными условиями. Положим

$$\alpha_n=\begin{cases} E_n(0), & n \text{ нечетно,} \\ E_n(\pi), & n \text{ четно,} \end{cases} \qquad \beta_n=\begin{cases} E_n(\pi), & n \text{ нечетно.} \\ E_n(0), & n \text{ четно.} \end{cases}$$

Тогда:

(a) $\sigma(H)=\bigcup\limits_{n=1}^{\infty}[\alpha_n, \beta_n]$;

(b) у H нет собственных значений;

(c) спектр H абсолютно непрерывен.

Доказательство. (a) Поскольку $E_n(\theta)$ непрерывны, при заданных θ_0 и ε

$$\{\theta\in(0, 2\pi) \mid |\theta-\theta_0|<\delta\}\subset\{\theta\in(0, 2\pi) \mid |E_n(\theta)-E_n(\theta_0)|<\varepsilon\}$$

с некоторым δ, так что по теореме XIII.85 $\sigma(H)=\bigcup\limits_n[\alpha_n, \beta_n]$.

(b) Ни одна из функций E_n не равна постоянной, ибо каждая E_n строго монотонна. Следовательно, для каждого E_0 множество $\{\theta \mid E_n(\theta)=E_0\}$ содержит не более двух точек. Мера такого множества равна нулю, так что по теореме XIII.86 E_0 не является собственным значением.

(c) следует из теорем XIII.86 и 89. ∎

Заметим, что $-d^2/dx^2+V$ имеет простое разложение по собственным функциям, но, поскольку дальше приводится соответствующий общий результат, относящийся к n-мерному случаю, здесь входить в подробности мы не будем.

Самая поразительная черта теоремы XIII.90 в том, что в $\sigma(H)$ существуют щели $(\beta_1, \alpha_2), \ldots, (\beta_n, \alpha_{n+1}), \ldots$. Конечно, мы знаем только, что $\beta_n \leqslant \alpha_{n+1}$, и некоторых из «щелей» может на самом деле не оказаться. Действительно, если $V=0$, то щелей нет вообще, и для того, чтобы каждая из щелей существовала, нужно накладывать дополнительные требования на V. Красота проведенного анализа — в возможности свести проблему существования щели к вопросу о вырожденности некоторого собственного значения.

Пример 1 (уравнение Матье). Пусть

$$V(x)=\mu\cos x$$

с $\mu \neq 0$. Мы утверждаем, что $\alpha_{n+1} \neq \beta_n$ для всех n, т. е. реализуется каждая щель. Пусть H_0^{P} (соответственно H_0^{A}) $= -d^2/dx^2$ на $L^2(0, 2\pi)$ с периодическими (соответственно антипериодическими) граничными условиями. Нам надо только показать, что $H_0^{\mathrm{P}}+V$ и $H_0^{\mathrm{A}}+V$ не имеют двукратных собственных значений. Приведем доказательство для $H_0^{\mathrm{P}}+V$; доказательство для $H_0^{\mathrm{A}}+V$ аналогично. Рассмотрим функции $\varphi_n(x)=(2\pi)^{-1/2}\exp(inx)$. Тогда $\varphi_n \in D(H_0^{\mathrm{P}})$ и $H_0^{\mathrm{P}}\varphi_n=n^2\varphi_n$. Если ψ есть решение уравнения $(H_0^{\mathrm{P}}+V)\psi=E\psi$ и $a_n=(\varphi_n, \psi)$, то

$$2(n^2-E)a_n+\mu(a_{n+1}+a_{n-1})=0. \tag{158a}$$

Если η тоже решение $(H_0^{\mathrm{P}}+V)\eta=E\eta$ и $b_n=(\varphi_n, \eta)$, то

$$2(n^2-E)b_n+\mu(b_{n+1}+b_{n-1})=0. \tag{158b}$$

Исключая из (158) член (n^2-E) и пользуясь условием $\mu\neq 0$, получаем $b_na_{n+1}-a_nb_{n+1}=a_nb_{n-1}-b_na_{n-1}$, так что $b_na_{n+1}-a_nb_{n+1}=c$, где c — некоторая константа. Поскольку $\eta, \psi \in L^2$, $\sum a_n^2<\infty$, $\sum b_n^2<\infty$ и $a_n\to 0$, $b_n \to 0$ при $n\to\infty$. Поэтому c должно быть нулем и

$$a_nb_{n+1}=b_na_{n+1}. \tag{159}$$

Если любые два последовательных a_j равны нулю, то, в силу (158a), равны нулю все a_j, а потому при любом n либо $a_n\neq 0$, либо $a_{n+1}\neq 0$. Аналогичное утверждение справедливо и относительно b_n. Предположим теперь, что E двукратно. Поскольку $\cos x$ — четная функция, в качестве решения уравнения $-\psi''+V\psi=E\psi$ можно выбрать четное ψ и нечетное η, ибо если E — вырожденное собственное значение $H_0^{\mathrm{P}}+V$, то все решения периодичны. Поскольку η нечетно, $b_0=\int_{-\pi}^{\pi}\eta(x)\,dx=0$. Таким образом, согласно приведенному выше замечанию, $b_1 \neq 0$. Поскольку ψ четно, $a_n = a_{-n}$, и потому, в частности, ввиду (158a)

$$-Ea_0 + \mu a_1 = 0.$$

Отсюда $a_0 \neq 0$, ибо если это не так, то a_1 тоже должно быть нулем, а это противоречит сказанному выше. Итак, $a_0 b_1 \neq 0$, в то время как $a_1 b_0 = 0$. Но это нарушает (159), откуда вытекает, что все собственные значения $H_0^{\mathrm{P}} + V$ невырожденны.

В задаче 139 приведен другой пример, когда можно получить асимптотическую формулу для $l_n = \alpha_{n+1} - \beta_n$ при $n \to \infty$, которая показывает, что по крайней мере для больших n (где $l_n \neq 0$) существует очень много щелей. Кроме того, справедливы следующие общие результаты, доказательства которых можно найти в ссылках, приведенных в Замечаниях.

Теорема XIII.91. Пусть V — периодический потенциал с периодом 2π. Тогда:

(a) если нет ни одной щели, V постоянен;

(b) если имеется только одна щель, V — эллиптическая функция Вейерштрасса;

(c) если отсутствуют все нечетные щели (т. е. у $H_0^{\mathrm{A}} + V$ есть только вырожденные собственные значения), то V имеет период π. Более общо, если для фиксированного n отсутствуют все щели (β_k, α_{k+1}) с $k \neq 2^n m$ $(m = 1, 2, \ldots)$, то V имеет период $2^{-n}(2\pi)$, и справедливо обратное утверждение.

(d) Если существует лишь конечное число щелей, то V — вещественно аналитическая функция на $\mathbb{R}$.

(e) Введем топологию в пространстве Y всех функций класса C^∞ с периодом 2π на $\mathbb{R}$ посредством полунорм $\|f\|_n = \|D^n f\|_\infty$, $n = 0, 1, \ldots$. Тогда множество потенциалов V, для которых *все* щели ненулевые, есть плотное G_δ-множество в Y (см. обсуждение понятия «почти всюду в смысле Бэра» в замечаниях к § III.5).

Имеют место некоторые общие результаты о том, когда два потенциала V и W порождают одинаковые энергетические зоны.

Теорема XIII.92. Пусть V и W — два таких 2π-периодических потенциала, что операторы $-d^2/dx^2 + V$ и $-d^2/dx^2 + W$ на $[0, 2\pi]$ с периодическими граничными условиями имеют одинаковые собственные значения. Тогда их энергетические зоны одинаковы.

Доказательство. Опишем основные идеи доказательства. Детали можно найти в ссылках, приводимых в Замечаниях. Пусть $D_V(E)$ и $D_W(E)$ — соответствующие дискриминанты. Имея в виду анализ, проведенный при доказательстве теоремы XIII.89, достаточно доказать, что они равны. Мы утверждаем, что

$$|D_V(E)|+|D_W(E)| \leqslant C_1 \exp(C_2 \sqrt{|E|}), \tag{160}$$

$$D_V(E)/2\cos(2\pi\sqrt{E}) \to 1 \quad \text{при} \quad E \to i\infty, \tag{161}$$

$$D_W(E)/2\cos(2\pi\sqrt{E}) \to 1 \quad \text{при} \quad E \to i\infty \tag{162}$$

Откладывая доказательство этих соотношений, покажем, что $D_V = D_W$. В силу (160) и теоремы Адамара из комплексного анализа,

$$2-D_V(E) = C_V\prod_{j=1}^{\infty}(1-E_j(V)^{-1}E),\ 2-D_W(E)=C_W\prod_{j=1}^{\infty}(1-E_j(W)^{-1}E),$$

где $E_j(V)$ — нули $D_V(E)-2$. По условию теоремы, нули $2-D_V$ и $2-D_W$ одинаковы. Но тогда из (161) и (162) следует, что $(2-D_V)/(2-D_W) \to 1$ при $E \to i\infty$, так что $D_V = D_W$.

Соотношения (160)—(162) можно доказать, анализируя решения $u_j(E, x)$. Достаточно доказать, что они служат решениями такого, например, интегрального уравнения:

$$u_1(E, x) = \cos(x\sqrt{E}) + \frac{1}{\sqrt{E}}\int_0^x \sin((x-y)\sqrt{E})\,V(y)\,u_1(E, y)\,dy.$$

Отсюда путем повторных итераций можно получить (160)—(162). ∎

На первый взгляд может показаться, что существует не так уж много пар V, W, для которых $D_V = D_W$. На самом деле все наоборот; ссылки по поводу двух следующих теорем приводятся в Замечаниях.

Теорема XIII.93. Пусть $V(t, x)$ есть решение следующего уравнения в частных производных:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = 3V\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{2}\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}, \tag{163}$$

и $V(0, x)$ — периодическая функция с периодом 2π. Тогда $V(t, x)$ есть 2π-периодическая функция при каждом t, приводящая к энергетическим зонам, не зависящим от t.

Уравнение (163) называется уравнением Кортевега — де Фриза.

Теорема XIII.94. Введем топологию в множестве 2π-периодических C^∞-функций на $\mathbb{R}$ при помощи полунорм $\|D^\alpha f\|_\infty$. Фиксируем V и предположим, что спектр оператора $-d^2/dx^2+V$ содержит n щелей (n может быть бесконечным). Тогда множество $\{W \mid D_V = D_W\}$ гомеоморфно n-мерному тору.

В одномерном случае довольно много можно сказать о глобальных аналитических свойствах $E_n(\theta)$.

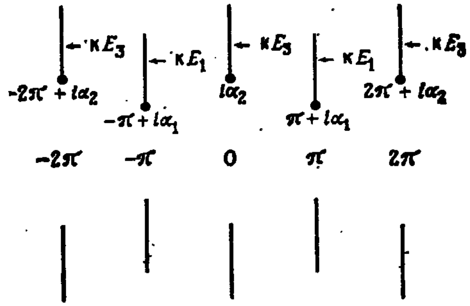


Рис. XIII.16. Римановы поверхности энергетической зоны; $n=2$.

Теорема XIII.95 (теорема Кона). Предположим, что все энергетические щели в одномерной задаче реализуются. Тогда функции $E_n(\theta)$ суть ветви одной многолистной функции, не имеющей других особенностей, кроме точек ветвления типа квадратного корня на прямых $\operatorname{Im}\theta = m\pi$, $m=0, \pm 1, \ldots$. Точнее, существуют положительные числа $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$, такие, что риманова поверхность функции $E(\theta)$ может быть описана следующим образом: $E(\theta)$ равна $E_n(\theta)$ на n-м листе с разрезами по линиям $\bigcup_m [(2m+1)\pi] \pm \pm i(\alpha_n, \infty)$ и $\bigcup_m [2m\pi] \pm i(\alpha_{n-1}, \infty)$ при нечетном n и по $\bigcup_m [2m\pi] \pm \pm i(\alpha_n, \infty)$ и $\bigcup_m [(2m+1)\pi] \pm i(\alpha_{n-1}, \infty)$ при четном n; n-й и $(n+1)$-й листы склеены вдоль берегов разрезов $2m\pi \pm i(\alpha_n, \infty)$ (n четно) и $(2m+1)\pi \pm i(\alpha_n, \infty)$ (n нечетно); см. рис. XIII.16.

Доказательство этой теоремы можно найти в ссылках, приводимых в Замечаниях.

Обратимся теперь к общему n-мерному случаю. Разложение с помощью прямого интеграла может быть проведено как в x-, так и в p-пространстве без существенных изменений. Главную трудность будет представлять анализ слоев H (обобщение теоремы XIII.89), ибо этот анализ существенно опирался на простоту собственных значений $H(\theta)$, чего не будет в многомерном случае. Дополнительное осложнение возникает из-за того, что в случае многих переменных собственные значения не обязательно аналитичны (в смысле однозначных функций) в вырожденных точках: см. пример в замечаниях к § XII.1. Оказывается, все эти проблемы легче разрешить, если проводить анализ слоев в p-пространстве.

При обсуждении n-мерного случая мы хотим допустить потенциалы V с локальными особенностями. Критерии, сформулированные в § X.2, неприменимы, если V неограничен, поскольку такие периодические потенциалы не могут лежать ни в каком L^p+L^∞ с $p<\infty$; но если $V\in L^p$ для всех ограниченных множеств и периодичен, то он равномерно локально принадлежит L^p в смысле следующего определения.

Определение. Измеримая функция V на $\mathbb{R}^n$ называется **равномерно локально лежащей в** L^p, если

$$\int_G |V(x)|^p d^n x \leqslant A$$

для любого единичного куба C с не зависящей от C постоянной A.

Теория возмущений § X.2 обобщается на равномерно локально лежащие в L^p (с некоторым p) потенциалы с помощью следующего метода локализации.

Теорема XIII.96. Пусть $p=2$ при $n\leqslant 3$, $p>2$ при $n=4$ и $p>n/2$ при $n\geqslant 5$. Тогда любая вещественнозначная функция на $\mathbb{R}^n$, равномерно локально лежащая в L^p, определяет $-\Delta$-ограниченный оператор с нулевой относительной гранью.

Доказательство. Пусть q таково, что $p^{-1}+q^{-1}=1/2$. В § X.2 было доказано, что для любого ε существует такое A_ε, что

$$\|\varphi\|_q^2 \leqslant \varepsilon \|\Delta\varphi\|_2^2 + A_\varepsilon \|\varphi\|_2^2. \tag{164}$$

Пусть для любого куба C

$$\|\varphi\|_{r;\,C}^r \equiv \int_C |\varphi(x)|^r d^n x.$$

Пусть C — единичный куб, и пусть C' — куб с ребром 3 и тем же центром, что и C. Пусть η есть C^∞-функция с носителем в C', тождественно равная 1 на C. В силу (164),

$$\begin{aligned}\|\varphi\|_{q;\,C}^2 &\leqslant \|\eta\varphi\|_q^2 \leqslant \varepsilon\|\Delta(\eta\varphi)\|_2^2 + A_\varepsilon\|\eta\varphi\|_2^2 \leqslant \\ &\leqslant 3\varepsilon\|\Delta\varphi\|_{2;\,C'}^2 + B\|\nabla\varphi\|_{2;\,C'}^2 + D\|\varphi\|_{2;\,C'}^2,\end{aligned} \tag{165}$$

где мы воспользовались равенством $\Delta(\eta\varphi)=\varphi\Delta\eta+\eta\Delta\varphi+2\nabla\eta\cdot\nabla\varphi$, неравенством треугольника, неравенством $(a+b+c)^2\leqslant 3(a^2+b^2+c^2)$ и тем, что η, $\nabla\eta$ и $\Delta\eta$ — ограниченные функции с носителем в C'. Заметим, что, поскольку различные $\|D^2\eta\|_\infty$ можно выбрать независимо от C, (165) справедливо с константами, не зависящими от C. Пусть C_α для $\alpha\in Z^n$ — единичный куб с центром α и C'_α — соответствующий куб C'. Тогда, поскольку V равномерно локально лежит в L^p,

$$|||V|||^2 \equiv \sup_\alpha \|V\|_{p;\,C_\alpha}^2 < \infty,$$

и потому

$$\begin{aligned}\|V\varphi\|_2^2 &= \sum_\alpha \|V\varphi\|_{2;\,C_\alpha}^2 \leqslant \sum_\alpha \|V\|_{p;\,C_\alpha}^2 \|\varphi\|_{q;\,C_\alpha}^2 \leqslant \\ &\leqslant |||V|||^2 \sum_\alpha \left(3\varepsilon\|\Delta\varphi\|_{2;\,C'_\alpha}^2 + B\|\nabla\varphi\|_{2;\,C'_\alpha}^2 + D\|\varphi\|_{2;\,C'_\alpha}^2\right) = \\ &= |||V|||^2\, 3^n (3\varepsilon\|\Delta\varphi\|_2^2 + B\|\nabla\varphi\|_2^2 + D\|\varphi\|_2^2) \leqslant \\ &\leqslant |||V|||^2\, 3^n (4\varepsilon\|\Delta\varphi\|_2^2 + (D + {}^1\!/_4\varepsilon^{-1}B)\|\varphi\|_2^2).\end{aligned}$$

На предпоследнем шаге мы воспользовались тем, что всякая точка $x \in \mathbb{R}^n$, не лежащая на границе какого-нибудь C_α, лежит точно в 3^n кубах C'_α, а на последнем — неравенством

$$\|\nabla\varphi\|_2^2 \leqslant \delta\|\Delta\varphi\|_2^2 + {}^1\!/_4\delta^{-1}\|\varphi\|_2^2,$$

которое в силу теоремы Планшереля следует из числового неравенства $a \leqslant \delta a^2 + {}^1\!/_4\delta^{-1}$. ∎

Отметим, что если V равномерно локально лежит в L^p при некотором $p > n/2$, то это же автоматически справедливо для $L^{n/2}$, поэтому мы и сформулировали предыдущую теорему для $p > n/2$.

Обладая таким критерием, можно дать такое доказательство следующей теоремы, которое лишь обозначениями отличается от соответствующего одномерного результата (теоремы XIII.88).

Теорема XIII.97. Пусть $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ — линейно независимые векторы в $\mathbb{R}^n$, а V — вещественнозначная функция на $\mathbb{R}^n$, такая, что

(i) $V(\mathbf{x} + \mathbf{a}_i) = V(\mathbf{x})$, $i = 1, \ldots, n$;

(ii) $\int_Q |V(\mathbf{x})|^p d^n x < \infty$, где Q — **элементарная ячейка**

$$Q = \left\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,\middle|\, \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n t_i \mathbf{a}_i,\ 0 \leqslant t_i < 1\right\},$$

и $p = 2$ при $n \leqslant 3$, $p > 2$ при $n = 4$, $p = n/2$ при $n \geqslant 5$.

Пусть $H^0(\theta)$ для каждого $\theta \in [0, 2\pi)^n$ — оператор $-\Delta$ на $\mathcal{H}' \equiv L^2(Q, d^n x)$ с граничными условиями

$$\varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a}_j) = e^{i\theta_j}\varphi(\mathbf{x}), \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y_j}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_j) = e^{i\theta_j}\frac{\partial\varphi}{\partial y_j}(\mathbf{x}) \qquad (166)$$

для всех $\mathbf{x}$, для которых $\mathbf{x}$, $\mathbf{x} + \mathbf{a}_j \in \overline{Q}$ (т. е. для $\mathbf{x}$ на соответствующих гранях ∂Q с координатами y_j, определяемых разложением $\mathbf{x} = \sum y_j \mathbf{a}_j$). Пусть

$$\mathcal{H} = \int_{[0,\,2\pi)^n}^{\oplus} \mathcal{H}' \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n},$$

и пусть преобразование U': $L^2(\mathbb{R}^n, d^n x) \to \mathscr{H}$ задано на $\mathscr{S}$ соотношением

$$(U'f)_\theta(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^n} e^{-i\theta \cdot \mathbf{m}} f(\mathbf{x} + \sum m_i \mathbf{a}_i)$$

и продолжено на все L^2 до унитарного оператора U. Тогда:

(a) для почти всех $\theta \in [0, 2\pi)^n$ функция V определяет на $L^2(Q, d^n x)$ ограниченный относительно $H^{(0)}(\theta)$ оператор умножения с нулевой относительной гранью;

(b) $U(-\Delta + V)U^{-1} = \int\limits_{[0, 2\pi)^n}^{\oplus} H(\theta) \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}$, где $H(\theta) = H^{(0)}(\theta) + V$.

Отметим, что можно доказать $H^{(0)}(\theta)$-ограниченность V с нулевой относительной гранью не только почти всюду, но и поточечно. Это достигается, например, с помощью рассуждений, основанных на свойствах аналитичности.

Одно из следствий этой теоремы — существование разложения по собственным функциям оператора H в смысле § XI.6:

Теорема XIII.98. Каждый $H(\theta)$ обладает полной системой собственных функций $\psi_m(\theta; \mathbf{x})$, отвечающих собственным значениям $E_m(\theta)$. Если с помощью граничных условий (166) продолжить $\psi_m(\theta; \mathbf{x})$ на все $\mathbb{R}^n$ и для $\varphi \in \mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$ положить

$$\tilde{\varphi}(m; \theta) = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi_m(\theta; \mathbf{x})} \varphi(\mathbf{x}) d^n x,$$

то

(a) $\int\limits_{\mathbb{R}^n} |\varphi(\mathbf{x})|^2 d^n x = \sum\limits_m \int\limits_{[0, 2\pi)^n} |\tilde{\varphi}(m; \theta)|^2 \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}$;

(b) $\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \sum\limits_m \int\limits_{[0, 2\pi)^n} \tilde{\varphi}(m; \theta) \psi_m(\theta; \mathbf{x}) d^n\theta$;

(c) $H = -\Delta + V$ при всех $\varphi \in D(H)$ обладает свойством

$$\widetilde{H\varphi}(m; \theta) = E_m(\theta) \tilde{\varphi}(m; \theta),$$

где операция $\sim$ считается продолженной на все $L^2(\mathbb{R}^n)$ по непрерывности;

(d) операция $\sim$ отображает $L^2(\mathbb{R}^n, d^n x)$ *на* $\bigoplus\limits_m L^2([0, 2\pi)^n, d^n\theta)$.

Доказательство. Полную систему собственных функций $H^{(0)}(\theta)$ можно найти в явном виде, а именно

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\theta; \mathbf{x}) = (2\pi)^{-n/2} \exp\left[i \sum_{j=1}^{n} (\theta_j + 2\pi k_j) y_j\right]$$

для $k_j \in Z$, где y_j определены разложением $\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{n} y_j \mathbf{a}_j$. Соответствующие собственные значения стремятся к бесконечности при $|\mathbf{k}| \to \infty$, так что резольвента $H^{(0)}(\theta)$ — компактный оператор. Тогда, в силу теоремы XIII.68, резольвента $H(\theta)$ также компактный оператор, и потому спектр $H(\theta)$ состоит из дискретных собственных значений $\{E_m(\theta)\}_{m=1}^{\infty}$, а набор соответствующих собственных функций полон. С помощью принципа минимакса можно доказать, что $E_m(\theta)$ — измеримые функции и что соответствующие собственные функции можно выбрать также измеримыми (задача 140). Поскольку при фиксированном θ собственные функции $\psi_m(\theta)$ оператора $H(\theta)$ образуют ортонормированный базис в $\mathscr{H}'$, то для $\eta \in \mathscr{H} = \int_{[0,\,2\pi)^n}^{\oplus} \mathscr{H}' \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}$ имеем

$$(\eta, \eta)_{\mathscr{H}} = \sum_m \int |(\eta_\theta, \psi_m(\theta))_{\mathscr{H}'}|^2 \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n},$$

$$\eta_\theta = \sum_m (\psi_m(\theta), \eta_\theta)_{\mathscr{H}'} \psi_m(\theta), \qquad (\psi_m(\theta), (A\eta)_\theta) = E_m(\theta)(\psi_m(\theta), \eta_\theta),$$

где

$$A = \int_{[0,\,2\pi)^n}^{\oplus} H(\theta) \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}.$$

Утверждения (a)—(c) теперь следуют просто из определения U и способа, которым мы продолжили $\psi_m(\theta)$. Аналогично доказывается (d). ∎

Для проведения анализа в p-пространстве удобнее использовать величины, отличающиеся множителем 2π от обычно применяемых величин.

Определение. Пусть $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ — некоторый базис в $\mathbb{R}^n$. Базис $\mathbf{K}_1, \ldots, \mathbf{K}_n$, определяемый соотношениями

$$(\mathbf{K}_j, \mathbf{a}_l) = (2\pi)\,\delta_{lj},$$

будем называть сопряженным к $\{\mathbf{a}_l\}$.

Теорема XIII.99. Пусть V — функция на $\mathbb{R}^n$, такая, что $V(\mathbf{x}+\mathbf{a}_j) = V(\mathbf{x})$ $(j = 1, \ldots, n)$, где $\{\mathbf{a}_j\}_{j=1}^{n}$ — базис в $\mathbb{R}^n$. Пусть Q — элементарная ячейка этого базиса, и пусть $\tilde{Q}$ — элементарная ячейка сопряженного базиса $\{\mathbf{K}_l\}$, т. е.

$$\tilde{Q} = \left\{ \sum_{l=1}^{n} t_l \mathbf{K}_l \,\middle|\, 0 \leqslant t_i < 1 \right\}.$$

Пусть $\mathscr{H}' = l_2(\mathbf{Z}^n)$ и $\mathscr{H} = \int_{\tilde{Q}}^{\oplus} \mathscr{H}' d^n k$. Предположим, что V равномерно локально принадлежит L^p (где $p=2$ при $n\leqslant 3$, $p>2$ при $n=4$ и $p=n/2$ при $n\geqslant 5$), и пусть $\tilde{V}_{\mathbf{m}}$ — коэффициенты Фурье V как функции на Q, т. е. для любого $\mathbf{m}\in Z^n$

$$\tilde{V}_{\mathbf{m}}=(\operatorname{vol} Q)^{-1}\int_Q \exp\left(-i\sum_{j=1}^n m_j \mathbf{K}_j\cdot\mathbf{x}\right)V(\mathbf{x})\,d^n x. \tag{167}$$

Для $\mathbf{k}\in\tilde{Q}$ определим оператор $H(\mathbf{k})$ на $\mathscr{H}'$

$$(H(\mathbf{k})g)_{\mathbf{m}}=(\mathbf{k}+\sum m_j\mathbf{K}_j)^2 g_{\mathbf{m}}+\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha g_{\mathbf{m}-\alpha} \tag{168}$$

с областью определения

$$D_0=\{g\in\mathscr{H}'\mid\sum \mathbf{m}^2|g_{\mathbf{m}}|^2<\infty\}.$$

Наконец, пусть U: $L^2(\mathbb{R}^n)\to\mathscr{H}$ задано соотношением

$$[(Uf)(\mathbf{k})]_{\mathbf{m}}=\hat{f}(\mathbf{k}+\sum m_j\mathbf{K}_j).$$

Тогда U — унитарный оператор и

$$U(-\Delta+V)U^{-1}=\int_{\tilde{Q}}^{\oplus}H(\mathbf{k})\,d^n k.$$

Доказательство. То, что U унитарен, следует из теоремы Планшереля. Более того, ясно, что

$$[(U(-\Delta)U^{-1})g](\mathbf{k})_{\mathbf{m}}=(\mathbf{k}+\sum m_j\mathbf{K}_j)^2 g(\mathbf{k})_{\mathbf{m}},$$

поскольку $-\widehat{\Delta f}(l)=l^2\hat{f}(l)$. Учитывая $-\Delta$-ограниченность V с нулевой относительной гранью, остается доказать только, что

$$[(UVU^{-1})g(\mathbf{k})]_{\mathbf{m}}=\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha g_{\mathbf{m}-\alpha}(\mathbf{k}),$$

а для этого достаточно показать, что для $f\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$

$$\widehat{Vf}(\mathbf{k})=\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha\hat{f}\left(\mathbf{k}-\sum_{j=1}^n\alpha_j\mathbf{K}_j\right). \tag{169}$$

Для доказательства (169) нужно только убедиться, что V как обобщенная функция умеренного роста имеет фурье-образ

$$\hat{V}(\mathbf{k})=(2\pi)^{n/2}\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha\delta\left(\mathbf{k}-\sum_{j=1}^n\alpha_j\mathbf{K}_j\right).$$

Но это верно, поскольку, как и в одномерном случае, ряд Фурье

$$V(\mathbf{x})=\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha\exp\left(i\sum_{j=1}^n\alpha_j\mathbf{K}_j\cdot\mathbf{x}\right)$$

сходится локально в смысле L^2, ибо V равномерно локально принадлежит L^2. ∎

Одно из преимуществ описанной процедуры разложения в k-пространстве — независимость области определения D_0 операторов $H(\mathbf{k})$ от k. В действительности можно с помощью (168) определить $H(\mathbf{k})$ для любого $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^n$, и так определенные операторы $H(\mathbf{k})$ образуют аналитическое семейство типа (A). Простейший способ убедиться в этом — ввести

$$(\mathbf{P}g)_{\mathbf{m}} = \left(\sum_{l=1}^{n} m_l \mathbf{K}_l\right) g_{\mathbf{m}},$$

так чтобы $\mathbf{P}$ был $H(\mathbf{0})$-ограниченным с нулевой относительной гранью, и

$$H(\mathbf{k}) = H(\mathbf{0}) + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{P} + \sum_{l=1}^{n} k_l^2. \tag{170}$$

$H(\mathbf{k})$ зависит от n параметров, но нам удобно фиксировать $n-1$ из них. Этому есть две причины. Во-первых, таким способом мы избегаем неаналитичности, с которой можно столкнуться в многопараметрической задаче на собственные значения в вещественном случае. Вторая причина более деликатная. Пусть $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ — фиксированные векторы в $\mathbb{R}^n$. Пусть $z = \lambda + iy$. Определим

$$E_{\mathbf{m}}(z) = (\mathbf{a} + z\mathbf{b} + \sum m_l \mathbf{K}_l)^2.$$

Конечно, $H(\mathbf{k}) = H_0(\mathbf{k}) + V$, где $H_0(\mathbf{a} + z\mathbf{b})$ обладает полным ортонормированным набором собственных векторов с собственными значениями $E_{\mathbf{m}}(z)$ Далее,

$$\operatorname{Im} E_{\mathbf{m}}(z) = 2y[\mathbf{b} \cdot (\mathbf{a} + \lambda\mathbf{b} + \sum m_l \mathbf{K}_l)]'$$

имеет особенно простой вид, если разумно выбрать числа $\mathbf{b} \cdot \mathbf{K}_l$, так чтобы число в квадратных скобках не обращалось в нуль при изменении $\mathbf{m}$. Удобно выбрать в качестве $\mathbf{b}$ первый вектор решетки в x-пространстве:

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{K}_l = 2\pi\delta_{l1}, \tag{171}$$

а λ определить равенством

$$\mathbf{b} \cdot (\mathbf{a} + \lambda\mathbf{b}) = \pi. \tag{172}$$

В этом случае $\operatorname{Im} E_{\mathbf{m}}(z) = 2\pi y(2m_1 + 1)$ и

$$|\operatorname{Im} E_{\mathbf{m}}(z)| \geqslant \pi |y| (1 + |m_1|). \tag{173a}$$

Более того, легко показать (задача 141a), что

$$|\operatorname{Re}(E_{\mathbf{m}}(z) + 1)| \geqslant c_1 |\mathbf{m}|^2, \quad \text{если } |\mathbf{m}| \geqslant c_2(1 + |y|), \tag{173b}$$

с подходящими c_1 и c_2 (зависящими от $\mathbf{a}$ в силу выбора λ в (172)). Из (173) вытекает (задача 141) следующая

Лемма 1. Пусть $n \geqslant 2$. Пусть $\mathbf{b}$ и λ заданы формулами (171) и (172). Тогда:

(a) если $\alpha > n/2$ и $\alpha \geqslant n-1$, то ряд

$$f_\alpha(y) \equiv \sum_{\mathbf{m}} |E_{\mathbf{m}}(\lambda + iy) + 1|^{-\alpha}$$

сходится и ограничен при $|y| \geqslant 1$;

(b) если, кроме того, $\alpha > n-1$, то $\lim\limits_{y \to \pm\infty} f_\alpha(y) = 0$.

Смысл леммы 1 в том, что она позволяет контролировать поведение $\|V(H_0(\lambda + iy) + 1)^{-1}\|$ при $y \to \infty$ для подходящих V.

Лемма 2. Пусть $n \geqslant 2$. Пусть V — периодический потенциал с коэффициентами Фурье (167), такими, что

$$\sum_{\mathbf{m}} |\tilde{V}_{\mathbf{m}}|^\beta < \infty, \tag{174}$$

где $\beta < (n-1)/(n-2)$ при $n \geqslant 3$ и $\beta = 2$ при $n = 2$. Фиксируем $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, и пусть $\mathbf{b}$ удовлетворяет (171). Пусть

$$A(t) = H(\mathbf{a} + \mathbf{b}t)$$

для всех $t \in \mathbb{R}$. Тогда:

(a) резольвента каждого $A(t)$ компактна;

(b) существуют вещественно аналитические функции $\{E_j(t)\}$ и соответствующие аналитические векторнозначные функции $\{\psi_j(t)\}$, такие, что $\psi_j(t)$ образуют базис в $\mathcal{H}' = l^2(Z^n)$ и для каждого t

$$A(t)\psi_j(t) = E_j(t)\psi_j(t);$$

(c) среди функций $E_j(t)$ нет постоянных.

Доказательство. (a) Поскольку $\beta \leqslant 2$, из (174) и неравенства Хаусдорфа—Юнга следует, что $V \in L^\alpha(Q)$ с $\alpha < n-1$ при $n \geqslant 3$ и $\alpha = 2$ при $n = 2$. Таким образом, V ограничен относительно $H_0(\mathbf{k})$, и достаточно доказать, что компактна резольвента $H_0(\mathbf{k})$, а это следует из того, что $H_0(\mathbf{k})$ обладает полным набором собственных векторов с собственными значениями, уходящими на бесконечность.

(b) Пусть $E_j(0)$ — собственные значения $A(t=0)$, упорядоченные так, что $E_1(0) \leqslant E_2(0) \leqslant \ldots$. Используя, если понадобится, теорию возмущений для вырожденных собственных значений, можно продолжить эти собственные значения и собственные векторы на ненулевые t. Как и в одномерном случае, для того чтобы убедиться в возможности такого продолжения на любые t, нужно только показать, что $E_j(t)$ не уходят на бесконечность при каком-то конечном t. В силу (170),

$$\frac{dA(t)}{dt} = 2(\mathbf{b}\cdot\mathbf{P} + \mathbf{b}\cdot(\mathbf{a}+t\mathbf{b})),$$

откуда, в силу теории возмущений первого порядка и $H_0(\mathbf{k})$-ограниченности $\mathbf{P}$,

$$\left|\frac{dE_j(t)}{dt}\right| \leqslant c(|E_j(t)| + |t| + 1)$$

Следовательно, $E_j(t)$ не могут уходить на бесконечность для конечных *вещественных* t.

(c) В силу леммы 1, предположений о V, неравенства Гёльдера и неравенства Юнга,

$$\lim_{y\to\infty} \|(A_0(\lambda+iy)+1)^{-1}\| = 0, \quad \lim_{y\to\infty} \|V(A_0(\lambda+iy)+1)^{-1}\| = 0,$$

где λ выбрано так, что выполнено (172). Отсюда с помощью обычной теории возмущений получаем, что $(A(\lambda+iy)+1)^{-1}$ существует при $|y| \geqslant Y_0$ и

$$\lim_{y\to\infty} \|[A(\lambda+iy)+1]^{-1}\| = 0. \tag{175}$$

Предположим теперь, что некоторая $E_j(t)$ равна константе C для всех t. Поскольку резольвента $A(t)$ компактна для всех вещественных t, она компактна и для всех $t \in \mathbb{C}$, так что C — всегда собственное значение $A(t)$. Тогда $(C+1)^{-1}$ — всегда собственное значение $(A(t)+1)^{-1}$, так что

$$\|(A(t)+1)^{-1}\| \geqslant (C+1)^{-1}.$$

Но это противоречит (175), и потому $E_j(t)$ не может быть постоянной. ∎

Теперь мы готовы провести полный анализ спектральных свойств операторов Шредингера с периодическими потенциалами.

Теорема XIII.100. Пусть V — периодический потенциал с коэффициентами Фурье из l_β, где $\beta < (n-1)/(n-2)$ при $n \geqslant 3$ и $\beta = 2$ при $n = 2, 3$. Тогда спектр $-\Delta + V$ состоит лишь из абсолютно непрерывной части.

Доказательство. Векторы $\mathbf{b}$, $\mathbf{K}_2, \ldots, \mathbf{K}_n$ образуют базис в $\mathbb{R}^n$, и потому внутренность Q можно представить в соответствии с разложением $\mathbf{k} = s_1\mathbf{b} + s_2\mathbf{k}_2 + \ldots + s_n\mathbf{K}_n$ как множество $\{\langle s_1, s_\perp\rangle \mid s_1 \in M(s_\perp),\ s_\perp \in N\}$, где $M(s_\perp)$ для каждого $s_\perp \in N$ — открытое связ-

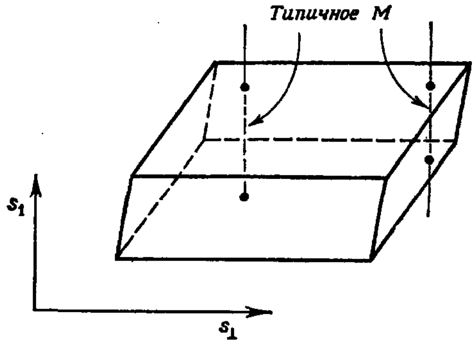


Рис. XIII.17. s-разложение $\tilde{Q}$.

ное множество (см. рис. XIII.17). Тогда в подходящем разложении в прямой интеграл

$$H = \int_{s_\perp \in N} \int_{s_1 \in M(s_1)} H(s_1\mathbf{b} + \ldots + s_n\mathbf{K}_n)\, ds_1 d^{n-1}s.$$

В силу леммы 2 и теоремы XIII.86, прямой интеграл по s_1 для каждого $s_\perp \in N$ обладает лишь абсолютно непрерывным спектром, и потому, в силу пункта (f) теоремы XIII.85, спектр H состоит лишь из абсолютно непрерывной части ∎

Подчеркнем, что подобно ситуации в одномерном случае спектр H разбивается на «зоны», но с двумя существенными отличиями. Во-первых, из-за вырожденности возможны неопределенности в особых точках функций многих переменных. Во-вторых, в отличие от одномерного случая зоны могут «перекрываться».

Прежде чем приступить к обсуждению связей изложенных здесь идей с простой моделью физики твердого тела, мы хотим еще упомянуть о произволе в выборе $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$. Пусть V задан; то, что определяется без всякого произвола,— это множество

$$\mathcal{L}_V = \{\mathbf{a} \mid V(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = V(\mathbf{x}) \text{ п. в. по } \mathbf{x}\}.$$

Для периодических потенциилов $\mathcal{L}_V$ всегда представляет собой решетку в смысле следующего определения.

Определение. Решетка — это подмножество $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$, обладающее следующими свойствами:

(i) $\mathcal{L}$ дискретно, т. е. не имеет конечных предельных точек;

(ii) $\mathcal{L}$ — подгруппа аддитивной группы $\mathbb{R}^n$;

(iii) $\mathcal{L}$ не содержится ни в одном нетривиальном подпространстве $\mathbb{R}^n$.

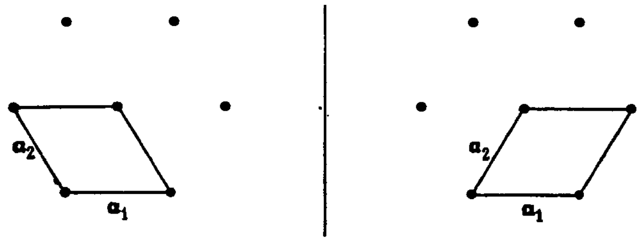


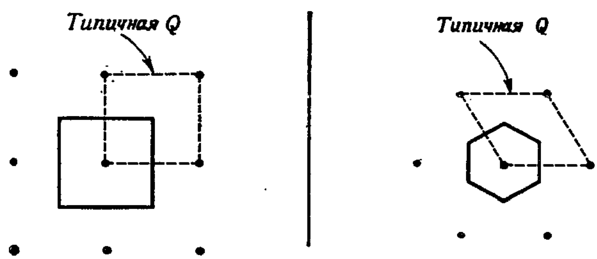
Рис. XIII.18. Два выбора базиса и элементарной ячейки.

Любая решетка $\mathscr{L}$ обладает **базисом**, т. е. набором таких элементов $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n \in \mathscr{L}$, что каждый $\mathbf{a} \in \mathscr{L}$ однозначно представим в виде $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{n} m_i \mathbf{a}_i$ с $m_i \in \mathbb{Z}$. Такой базис не единствен, и соответствующая элементарная ячейка также не единственна (пример см. на рис. XIII.18). Свойство, которым обладают все элементарные ячейки,— это равенство $\mathbb{R}^n = \bigcup_{\mathbf{a} \in \mathscr{L}} \overline{\tau_{\mathbf{a}} Q}$, где $\tau_{\mathbf{a}} S = \{\mathbf{x} + \mathbf{a} \mid \mathbf{x} \in S\}$ с $\tau_{\mathbf{a}} Q^{\text{int}} \cap \tau_{\mathbf{b}} Q^{\text{int}} = \varnothing$, если $\mathbf{a} \neq \mathbf{b}$. Существует и другая «элементарная ячейка» C, обладающая таким свойством, хотя она и не связана ни с каким базисом. Это **ячейка Вигнера — Зейтца решетки** $\mathscr{L}$, определяемая формулой

$$C = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} \text{ — ближайшая к 0 точка в } \mathscr{L}\}.$$

Два примера ячеек Вигнера — Зейтца приведены на рис. XIII.19. Можно показать (задача 143), что любая ячейка Вигнера — Зейтца представляет собой многогранник, т. е. пересечение конечного числа слоев $\{x \mid a \leqslant l(x) \leqslant b\}$, где l — линейный функционал. Ячейка Вигнера — Зейтца определена однозначно.

Точно так же сопряженный базис зависит от выбора базиса в $\mathscr{L}_V$, а сопряженная решетка $\mathscr{L}'_V = \{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} \in 2\pi\mathbb{Z}$ для всех



(*a*) *Квадратная решетка* (*b*) *Гексагональная решетка*

Рис. XIII.19. Две ячейки Вигнера — Зейтца.

$a \in \mathscr{L}\}$ и ее ячейка Вигнера—Зейтца, называемая **зоной Бриллюэна** B, не зависят от выбора базиса в $\mathscr{L}_V$.

Мы коснулись этой терминологии по следующей причине. Можно провести разложение в прямой интеграл в x-пространстве, заменив Q на C, и в p-пространстве, заменив Q на B. Изучение твердых тел в физической литературе обычно начинается с построений, представляющих собой не что иное, как замаскированную форму разложения в прямой интеграл в p-пространстве по зоне Бриллюэна.

Вернемся теперь к обещанному описанию связей всего изложенного с физикой твердого тела. Человеку, занимающемуся математической физикой и привыкшему иметь дело с атомной физикой или даже квантовой теорией поля, внушительный ряд сбивающих с толку приближений, называемых теорией твердого тела, представляется скорее искусством, чем наукой. Хотя в таком представлении есть некоторая доля правды, мы хотели бы подчеркнуть, что различие между атомной физикой и физикой твердого тела на самом деле измеряется лишь степенью приближения к реальным явлениям: ведь «стандартный» чисто кулонов гамильтониан атома—всего лишь приближенная модель «реального» атома. Прежде всего в ней не учтены ни релятивистские поправки к кинетической энергии, ни спин-орбитальное взаимодействие. Далее, эксперименты в атомной физике никогда не проводятся с отдельными атомами, так что, обсуждая простую модель атома, а затем сравнивая ее с результатами эксперимента, мы всегда делаем определенное приближение. Наконец, в эксперименте присутствует взаимодействие с полем излучения (квантовая электродинамика), которое, без сомнения, еще не понято во всей глубине. Большая разница между атомной физикой и физикой твердого тела состоит в том, что в атомной физике одна модель описывает большинство основных физических явлений в этой области, тогда как в физике твердого тела модель, которую мы описываем ниже, качественно объясняет лишь ограниченную область явлений. Многие явления требуют учета колебаний решетки («фононы») и взаимодействия электронов между собой и с фононами. Но, в конце концов, человеку, занимающемуся математической физикой, выдается для изучения точно описанная модель (или несколько таких моделей), а это все, что он или она могут потребовать с достаточным основанием.

Замечено, что ядра в твердом теле расположены более или менее регулярным образом, т. е. в $\mathbb{R}^n$ существует решетка, примерно в узлах которой находятся ядра. Никто пока не объяснил, опираясь только на основные законы природы, почему образуются кристаллы, т. е. никто не доказал, что большое число тяжелых ядер с достаточным для нейтральности числом электронов, взаимодействующих посредством кулоновых потенциалов, обладает основным состоянием, приближенно представляющим собой кристалл. Поэтому мы просто постулируем, что в нашей модели *заданное* число ядер с некоторым числом окружающих их электронов располагается в каждом узле решетки. Для простоты мы заменим большое твердое тело кристаллом, заполняющим все $\mathbb{R}^n$. В итоге, если пренебречь электрон-электронным взаимодействием, получится модель электронов, движение которых описывается гамильтонианом $-\Delta+V$, где V — периодический потенциал. Эта модель носит название **одноэлектронной модели твердого тела.** Мы хотим с помощью проведенного анализа периодических операторов Шредингера описать две вещи:

(1) понятие плотности состояний и качественное объяснение разницы между металлами и диэлектриками;

(2) рассеяние на примеси в одноэлектронной модели.

Для упрощения обозначений рассматривается трехмерное пространство.

Определение. Пусть $\tilde{Q}$ — элементарная ячейка сопряженной решетки, и пусть $E_n(\mathbf{k})$ — уровни энергии $H(\mathbf{k})$ (упорядоченные неравенствами $E_1 \leqslant E_2 \leqslant \ldots$). **Мерой плотности состояний** называется заданная на $\mathbb{R}$ мера ρ, определяемая равенством

$$\rho(-\infty, E] = \frac{2}{|\tilde{Q}|} \sum_n |\{\mathbf{k} \in \tilde{Q} \mid E_n(\mathbf{k}) \leqslant E\}|, \tag{176}$$

где $|\tilde{Q}|$ — мера Лебега ячейки $\tilde{Q}$ и $|\{\ldots\}|$ — мера Лебега множества $\{\ldots\}$.

Отметим, что, поскольку $E_n(\mathbf{k}) \to \infty$ равномерно по $\mathbf{k}$ при $n \to \infty$ (задача 144), число $\rho(-\infty, E]$ конечно. Более того, основываясь на проведенном общем анализе, легко показать (задача 145), что ρ абсолютно непрерывна относительно dE, меры Лебега на $\mathbb{R}$. Производную Радона — Никодима $d\rho/dE$ обычно называют **плотностью состояний**. Для того чтобы объяснить важность ρ в теории твердого тела, введем еще одно понятие. Пусть Q — элементарная ячейка в x-пространстве, фиксировано некоторое $m \in Z$ и $Q^{(m)}$ — множество объема $m^3 |Q|$, полученное прикладыванием друг к другу $m \times m \times m$ множеств Q. Пусть H_m — оператор $-\Delta_P + V$ на $L^2(Q^{(m)})$, где $-\Delta_P$ — оператор с периодическими граничными условиями. Пусть $P_m(\Omega)$ — спектральные проекторы H_m; введем

$$\rho_m(-\infty, E] = 2 \dim P_m(-\infty, E]/m^3.$$

Тогда справедлива

Теорема XIII.101. Если $m\to\infty$, то $\rho_m\to\rho$ в том смысле, что $\rho_m(-\infty, E]\to\rho(-\infty, E]$ для любого E.

Доказательство. Опишем основные идеи доказательства, оставляя детали читателю (задача 147). Ключевой момент состоит в том, что H_m имеет следующее разложение в прямую *сумму*. Параметризуем $\tilde{Q}$ так: $\left\{\sum_{i=1}^{3} t_i\mathbf{K}_i \,\middle|\, 0\leqslant t_i<1\right\}$. Тогда

$$L^2(Q^{(m)})\cong\bigoplus_{\alpha_1,\,\alpha_2,\,\alpha_3=0}^{m-1} l^2(\mathbf{Z}^3),$$

и, таким образом, H_m можно представить в виде

$$\bigoplus_{\alpha_1,\,\alpha_2,\,\alpha_3=0}^{m-1} H\left(\frac{\alpha_1}{m}\mathbf{K}_1+\frac{\alpha_2}{m}\mathbf{K}_2+\frac{\alpha_3}{m}\mathbf{K}_3\right),$$

где $H(\mathbf{k})$ — слои оператора H в бесконечном объеме. Возможность такого разложения объясняется тем, что любая функция φ, периодическая на $Q^{(m)}$, есть сумма функций φ, обладающих свойством $\varphi(\mathbf{x}+\mathbf{a}_j)=\exp(2\pi\alpha_j i/m)\varphi(\mathbf{x})$. В результате такого разложения имеем

$$\rho_m(-\infty, E]=2m^{-3}\,\#\{n;\ \alpha_i\in\{0, 1, \dots, m-1\}\mid E_n\big(m^{-1}\textstyle\sum(\alpha_j\mathbf{K}_j)\big)\leqslant E\},$$

и, поскольку $E(.)$ непрерывно, это выражение служит приближением $\rho(-\infty, E]$. ∎

Вернёмся теперь к нашей модели твердого тела. Предположим, что каждое свободное ядро окружено l электронами. Тогда в нашей модели мы хотим иметь l электронов на единичную ячейку. Хотя мы и пренебрегаем взаимодействием между электронами, игнорировать принцип Паули, который в случае свободных электронов утверждает, что в каждом собственном состоянии H может находиться не более двух электронов, нельзя. Однако, как же мы можем его учесть, когда H не имеет собственных векторов и когда в нашем (бесконечном) кристалле находится бесконечное число электронов? Мы утверждаем, что разумный путь учесть принцип Паули состоит в том, чтобы считать, что в основном состоянии электроны заполняют континуум состояний до энергии E, при которой $\rho(-\infty, E]=l$. Действительно, если бы мы взяли большой, но конечный кристалл размера $m\times m\times m$ с периодическими граничными условиями, у нас было бы m^3l электронов и в основном состоянии они заполняли бы собственные состояния H_m до энергии E_m, определяемой равенством $\rho_m(-\infty, E_m]=l$. Наименьшее число E, при котором $\rho(-\infty, E]=l$, называется **энергией Ферми** E_F. Множество тех

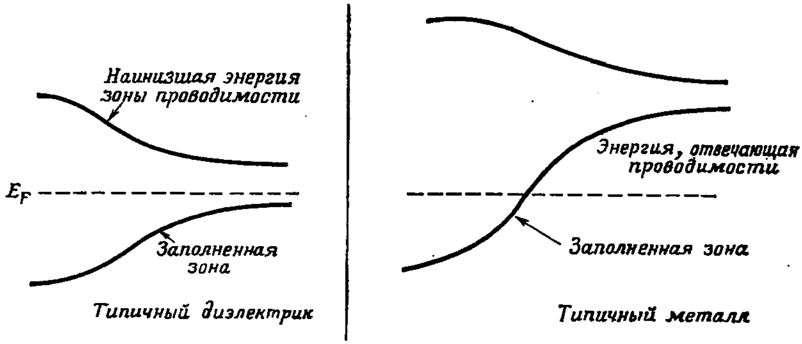


Рис. XIII.20. Энергетические зоны проводников и диэлектриков.

$\mathbf{k} \in B$ (т. е. $\mathbf{k}$ из зоны Бриллюэна), при которых $E_n(\mathbf{k}) = E_F$ для некоторого n, называется **поверхностью Ферми.** Эта картина похожа на ту, которая возникает при элементарном обсуждении периодической таблицы элементов, основанном на спектре атома водорода, но осложняется присутствием континуума состояний.

Теперь мы готовы к объяснению, почему электронная проводимость в одних твердых телах (диэлектрики) мала, а в других (металлы) велика. Используя симметрию основного состояния относительно комплексного сопряжения, можно доказать, что в нем нет движения электронов. Для того чтобы получить поток электронов, нужно возбудить некоторые из них. Мы уже знаем, что в типичных случаях периодический оператор Шредингера обладает щелями (запрещенными зонами) в энергетическом спектре. Существует качественная разница между тем, когда E_F располагается на дне щели, и случаем, когда это не так. Если E_F лежит на дне щели, то спектр H не пересекается с интервалом $(E_F, E_F + \varepsilon)$, и потому нужна конечная порция энергии для возбуждения тока (см. рис. XIII.20). В этом случае мы имеем диэлектрик. Если E_F не находится на дне щели, мы имеем металл! Конечно, если E_F лежит на дне узкой щели (ε мало) или не лежит на дне, но достаточно близко к нему, мы имеем промежуточные случаи, где различия металл/диэлектрик выражены не резко (полуметаллы, полупроводники). Имея дело с реальными телами, нужно учитывать, что реальное тело находится не в основном состоянии, а в состоянии с конечной температурой, описываемом статистической физикой. Подчеркнем, что учет щелей в спектре энергии — важный момент теории твердого тела.

В качестве заключительной темы из одноэлектронной теории твердых тел обсудим рассеяние на примеси. Предположим, что один из узлов решетки занят атомом примеси, отличающимся от атомов во всех остальных узлах. На электрон в таком криссталле действует потенциал $V+W$, где V периодичен, а W, представляющий различие между примесью и атомом, который она замещает, имеет короткий радиус действия. Можно ожидать, что электроны в таком кристалле рассеиваются на примеси в соответствии с обычной теорией рассеяния.

Теорема XIII.102. Пусть V — периодический потенциал на $\mathbb{R}^3$, квадратично интегрируемый по элементарной ячейке. Пусть W — потенциал из $L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)$. Тогда

$$\Omega^{\pm} = \operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} \exp[it(H_0+V+W)]\exp[-it(H_0+V)]$$

существуют и обладают одинаковой областью значений, так что S-матрица унитарна.

Доказательство. Поскольку спектр H_0+V состоит лишь из абсолютно непрерывной части (теорема XIII.100), достаточно доказать, что $(-\Delta+V+W+c)^{-1}-(-\Delta+V+c)^{-1}$ при некотором c лежит в классе операторов со следом, ибо тогда можно использовать теорию Като — Бирмана (теорема XI.9). Выберем c так, чтобы $-\Delta+V+W\geqslant -c+1$, $-\Delta+V\geqslant -c+1$. Поскольку V и W ограничены относительно $-\Delta$ с нулевой относительной гранью, то

$$\begin{aligned}
&(-\Delta+V+W+c)^{-1}-(-\Delta+V+c)^{-1}= \\
&= -(-\Delta+V+W+c)^{-1}W(-\Delta+V+c)^{-1}= \\
&= -[(-\Delta+V+W+c)^{-1}(-\Delta+1)][(-\Delta+1)^{-1}W(-\Delta+1)^{-1}]\times \\
&\qquad\qquad\times[(-\Delta+1)(-\Delta+V+c)^{-1}].
\end{aligned}$$

Первый и третий множители суть ограниченные операторы благодаря относительной ограниченности; средний множитель лежит в классе операторов со следом (см. теорему XI.20), поскольку $W\in L^1\cap L^2$. Следовательно, разность резольвент также имеет конечный след. ∎

XIII.17. Введение в спектральную теорию несамосопряженных операторов

До сих пор мы изучали спектральные свойства главным образом самосопряженных операторов. В этом последнем разделе мы хотим кое-что сказать о спектральном анализе компактных операторов, которые не обязательно самосопряжены. В § VI.5 мы уже видели, что если A — компактный оператор, то $\sigma(A)$ состоит из нуля и множества отличных от нуля чисел $\{\lambda_i\}_{i=1}^{N(A)}$, где $N(A)$ конечно или счетно. Единственной точкой накопления спектра может служить лишь 0. Более того, каждое число λ_i есть собственное значение, и, в силу утверждений § XII.1 и

XII.2, каждый спектральный проектор

$$P_i = -\frac{1}{2\pi i} \int\limits_{|\lambda - \lambda_i| = \varepsilon} (A - \lambda)^{-1}\, d\lambda$$

конечномерен и $\operatorname{Ran} P_i = \{\psi \mid (A - \lambda_i)^n \psi = 0$ для некоторого $n\}$. Назовем вектор ψ **обобщенным собственным вектором**, если $(A - \lambda)^n \psi = 0$ для некоторого $n \geqslant 1$. Возникает ряд естественных вопросов.

(1) Порождают ли собственные и обобщенные собственные векторы оператора A (векторы из области значений некоторых P_i или решения уравнений $(A - \lambda_i)^n \psi = 0$ для некоторых n) все пространство $\mathscr{H}$, т. е. образуют ли они тотальное подмножество?

(2) Предположим, что A лежит в классе $\mathscr{I}_1$ операторов со следом, введенном в § VI.6. Пусть $\lambda_i(A)$ — все ненулевые собственные значения A. Будем повторять каждое $\lambda_i(A)$ столько раз, какова его **алгебраическая кратность**, по определению равная $\dim P_i$. Правда ли, что

$$\operatorname{Tr}(A) = \sum_{j=1}^{N(A)} \lambda_j(A)? \tag{177}$$

(3) В силу мероморфной версии теоремы Фредгольма (теорема XIII.13), $(1 + \mu A)^{-1}$ — мероморфная функция μ на всем $\mathbb{C}$. Можно ли найти в явном виде целые по μ функции, просто выражающиеся через A и такие, что $(1 + \mu A)^{-1} = F(\mu)/G(\mu)$?

Мы обсудим решение задачи 3 в случае $A \in \mathscr{I}_1$ и воспользуемся им при обсуждении задач 1 и 2. Завершает этот раздел обсуждение «явных» решений двух интегральных уравнений, которые уже появлялись раньше, в томе 1 и в этом томе. Задача 2 не столь проста, как кажется. Во-первых, a priori не ясно, сходится ли сумма в (177). Кроме того, если у A есть только нулевое собственное значение, далеко не очевидно, что $\operatorname{Tr}(A)$, определенный как сумма диагональных матричных элементов, равен нулю. Наконец, в связи с задачей 1 рассмотрим следующий пример.

Пример 1. Пусть $\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ — ортонормированный базис в $\mathscr{H}$. Пусть $\{\alpha_n\}_{n=1}^{\infty}$ — последовательность положительных чисел, монотонно сходящаяся к нулю. Пусть $A = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n (\varphi_n, \cdot)\, \varphi_{n+1}$. Это компактный оператор, поскольку

$$\left\| A - \sum_{n=1}^{N} \alpha_n (\varphi_n, \cdot)\, \varphi_{n+1} \right\| = \sup_{n \geqslant N+1} |\alpha_n| \to 0.$$

Более того, норма $\|A^n\|^{1/n}=\left(\prod_{m=1}^{n}|\alpha_m|\right)^{1/n}$ стремится к нулю при $n\to\infty$. Отсюда по формуле для спектрального радиуса и по теореме VI.6 вытекает, что $\sigma(A)=\{0\}$. Предположим что все $\alpha_n\neq 0$. Поскольку ясно, что тогда $\operatorname{Ker}(A^n)=\{0\}$, то A не имеет собственных значений, а линейная оболочка собственных векторов равна $\{0\}$.

Пример 2. Предположим, что $\{\psi_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ — базис в $\mathcal{H}$ и $\{\alpha_n\}$ — двусторонняя последовательность ненулевых чисел, стремящаяся к нулю на $\pm\infty$. Пусть

$$A=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\alpha_n(\psi_n,\ \cdot)\,\psi_{n+1}.$$

Тогда

$$B=A^{-1}\equiv\sum_{n=-\infty}^{\infty}\alpha_n^{-1}(\psi_{n+1},\ \cdot)\,\psi_n$$

есть оператор, плотно определенный на

$$D(B)=\{\eta\mid\sum\alpha_n^{-2}|(\psi_{n+1},\ \eta)|^2<\infty\}.$$

Отметим, что поскольку $\sigma(A)=\{0\}$, то $(B-\lambda)^{-1}=A(1-\lambda A)^{-1}$. Таким образом, B — замкнутый оператор, резольвентное множество которого совпадает со всей плоскостью $\mathbb{C}$! (См. также пример 5 в § VIII.1.)

Итак, вопрос 1 не всегда имеет утвердительный ответ. Позже мы покажем, что если A — строго m-аккретивный оператор из $\mathcal{I}_1$, то его обобщенные собственные векторы порождают все $\mathcal{H}$.

Впредь $\{\lambda_n(A)\}_{n=1}^{N(A)}$ будет списком всех ненулевых собственных значений компактного оператора A. Каждое собственное значение будет входить в этот список столько раз, какова его алгебраическая кратность. Мы упорядочим $\{\lambda_n(A)\}$ условием

$$|\lambda_{n+1}(A)|\leqslant|\lambda_n(A)|\quad\text{и}\quad\arg\lambda_{n+1}(A)\geqslant\arg\lambda_n(A),$$

если $|\lambda_{n+1}(A)|=|\lambda_n(A)|$, где $\arg\lambda_l\in[0,\ 2\pi)$. Для начала докажем, что $\sum_{n=1}^{N(A)}\lambda_n(A)$ абсолютно сходится, если $A\in\mathcal{I}_1$.

Лемма 1. Пусть A — компактный оператор. Тогда существует ортонормированное семейство $\{e_n\}_{n=1}^{N(A)}$, такое, что

$$Ae_n=\lambda_n(A)\,e_n+\sum_{m=1}^{n-1}\nu_{nm}e_m \tag{178}$$

с подходящими ν_{nm}. В частности,

$$(e_n,\ Ae_n)=\lambda_n(A). \tag{179}$$

Доказательство. Пусть P_i — спектральные проекторы, отвечающие ненулевым собственным значениям. Записав $A \upharpoonright \operatorname{Ran} P_i$ для каждого i в жордановой нормальной форме, можно найти множество линейно независимых векторов $\{f_i\}_{i=1}^{N(A)}$, таких, что

$$Af_n = \lambda_n(A) f_n + \beta_n f_{n-1}, \tag{180}$$

где $\beta_n = 1$ либо 0. Применяя к $\{f_n\}_{n=1}^{N(A)}$ процедуру Грама — Шмидта, можно найти ортонормированное семейство $\{e_n\}_{n=1}^{N(A)}$, такое, что

$$e_n = \sum_{m=1}^{n} \gamma_{nm} f_m \tag{181}$$

с $\gamma_{nn} \neq 0$. Тогда (178) следует из (180) и (181). ∎

Ортонормированное семейство $\{e_n\}_{n=1}^{N(A)}$ называют **базисом Шура** (хотя оно не обязательно базис).

Пусть теперь $\{\mu_n(A)\}$ — сингулярные числа A, т. е. собственные значения $|A|$.

Теорема XIII.103 (теорема Шура — Лалеско — Вейля). Для любого $1 \leqslant p < \infty$

$$\sum_{n=1}^{N(A)} |\lambda_n(A)|^p \leqslant \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(A)^p, \tag{182}$$

где A — компактный оператор, $\{\lambda_n(A)\}$ — его собственные значения, а $\{\mu_n(A)\}$ — его сингулярные числа. В частности, если $A \in \mathscr{I}_1$, то

$$\sum_{n=1}^{N(A)} |\lambda_n(A)| < \infty.$$

Доказательство. Рассмотрим каноническое разложение A:

$$A = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(A)(f_n, \cdot) g_n,$$

где $\{f_n\}$ и $\{g_n\}$ — ортонормированные базисы (теорема VI.17). Пусть $\{e_n\}_{n=1}^{N(A)}$ — базис Шура для A. Тогда, в силу (179),

$$\lambda_m(A) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_{mn} \mu_n(A),$$

где $\alpha_{mn} = (f_n, e_m)(e_m, g_n)$. Теперь мы утверждаем, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_{mn}| \leqslant 1, \tag{183}$$

$$\sum_{m=1}^{\infty} |\alpha_{mn}| \leqslant 1. \tag{184}$$

Для доказательства (184) заметим, что, в силу неравенства Шварца,

$$\sum_{m=1}^{\infty} |\alpha_{mn}| \leqslant \left(\sum_{m=1}^{\infty} |(f_n, e_m)|^2\right)^{1/2} \left(\sum_{m=1}^{\infty} |(g_n, e_m)|^2\right)^{1/2} \leqslant \|f_n\| \|g_n\| = 1,$$

где на последнем шаге использовано неравенство Бесселя и ортонормированность $\{e_n\}$. Неравенство (183) получается похожим образом из ортонормированности $\{g_n\}$ и $\{f_n\}$. Пусть теперь q — сопряженный к p индекс. Тогда

$$\sum_{m=1}^{M} |\lambda_m(A)|^p \leqslant \sum_{m=1}^{M} |\lambda_m(A)|^{p-1} \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_{mn}| |\mu_n(A)| =$$

$$= \sum_{n,m} |\alpha_{nm}|^{1/p} |\alpha_{nm}|^{1/q} |\lambda_m|^{p-1} |\mu_n| \leqslant$$

$$\leqslant \left(\sum_{n,m} |\alpha_{nm}| |\mu_n|^p\right)^{1/p} \left(\sum_{n,m} |\alpha_{nm}| |\lambda_m|^p\right)^{1/q} =$$

$$\leqslant \left(\sum_{n} |\mu_n|^p\right)^{1/p} \left(\sum_{m=1}^{M} |\lambda_m|^p\right)^{1/q}.$$

На предпоследнем шаге использовано неравенство Гёльдера и равенство $q(p-1)=p$, а на последнем — неравенства (183) и (184). Отсюда легко получается (182). ∎

Прежде чем обратиться к основной теме этого раздела, отметим одно следствие (182).

Следствие (обобщенное неравенство Голдена — Томпсона). Пусть $-A$ и $-B$ — положительные самосопряженные операторы, причем $A+B$ в существенном самосопряжен на $D(A) \cap D(B)$. Предположим, что $e^{A/2}e^{B}e^{A/2} \in \mathfrak{I}_p$. Тогда $e^{A+B} \in \mathfrak{I}_p$ и

$$\|e^{A+B}\|_p \leqslant \|e^{A/2}e^{B}e^{A/2}\|_p.$$

Доказательство. Докажем сначала, что если C и D — ограниченные положительные операторы и $CD \in \mathfrak{I}_r$, то $C^{1/2}DC^{1/2} \in \mathfrak{I}_r$ и

$$\|C^{1/2}DC^{1/2}\|_r \leqslant \|CD\|_r.$$

Сначала заметим, что для любых ограниченных E, F имеем $\sigma(EF)\setminus\{0\} = \sigma(FE)\setminus\{0\}$ (задача 166a), и если $\lambda \neq 0$ есть собственное значение EF, то это же λ есть собственное значение FE с той же кратностью (задача 166b). Поскольку $CD = C^{1/2}(C^{1/2}D) \in \mathfrak{I}_r$, его спектр вне нуля чисто дискретен, поэтому спектр самосопряженного оператора $C^{1/2}DC^{1/2}$ вне нуля чисто дискретен, а он сам компактен. В силу сказанного выше, $\lambda_n(C^{1/2}DC^{1/2}) = \lambda_n(CD)$, а поскольку $C^{1/2}DC^{1/2}$ самосопряжен и положителен, $\lambda_n(C^{1/2}DC^{1/2}) =$

$=\mu_n(C^{1/2}DC^{1/2})$. Таким образом, в силу (182),

$$\|C^{1/2}DC^{1/2}\|_r^r=\sum_n|\lambda_n(CD)|^r\leqslant\sum_n|\mu_n(CD)|^r=\|CD\|_r^r.$$

Теперь мы утверждаем, что $Q_n=(e^{A/2^{n+1}}e^{B/2^n}e^{A/2^{n+1}})^{2^n}\in\mathfrak{I}_p$ и

$$\|Q_n\|_p\leqslant\|e^{A/2}e^Be^{A/2}\|_p.$$

Докажем это по индукции. Случай $n=0$ тривиален. Пусть $C_n=\exp(A/2^n)$, $D_n=\exp(B/2^n)$ и $r_n=2^np$. Тогда если $Q_{n-1}\in\mathfrak{I}_p$, то $C_nD_n\in\mathfrak{I}_{r_n}$ и

$$\|Q_n\|_p=\|C_n^{1/2}D_nC_n^{1/2}\|_{r_n}^{2^n}\leqslant\|C_nD_n\|_{r_n}^{2^n}=\|Q_{n-1}\|_p,$$

что дает нужную оценку $\|Q_n\|_p$.

По формуле Троттера Q_n сильно сходится к e^{A+B}, так что (задача 167) $e^{A+B}\in\mathfrak{I}_p$ и

$$\|e^{A+B}\|_p\leqslant\varliminf\|Q_n\|_p\leqslant\|e^{A/2}e^Be^{A/2}\|_p. \blacksquare$$

Наша первая цель — доказательство (177). В процессе этого доказательства мы разовьем теорию бесконечных определителей, полезную и в ряде других приложений. Такая теория будет основываться на понятиях теории внешних алгебр, т. е. теории антисимметрических тензорных произведений. В § II.4 и VIII.10 мы уже дали основные определения нужных объектов, используя «фермионные пространства Фока»; сейчас мы повторим эти определения в несколько других обозначениях. Для заданного гильбертова пространства $\mathscr{H}$ пусть $\otimes^n\mathscr{H}$ — линейное пространство полилинейных функционалов на $\mathscr{H}$. Подробнее, по заданным $\varphi_1,\ldots,\varphi_n\in\mathscr{H}$ определим $\varphi_1\otimes\ldots\otimes\varphi_n\in\otimes^n\mathscr{H}$ равенством

$$(\varphi_1\otimes\ldots\otimes\varphi_n)(\langle\eta_1,\ldots,\eta_n\rangle)=(\varphi_1,\eta_1)\ldots(\varphi_n,\eta_n).$$

Легко показать (см. предложение 1 в § II.4), что конечная линейная оболочка набора $\{\varphi_1\otimes\ldots\otimes\varphi_n\}$ допускает корректное введение внутреннего произведения

$$(\varphi_1\otimes\ldots\otimes\varphi_n,\ \eta_1\otimes\ldots\otimes\eta_n)=(\varphi_1,\eta_1)\ldots(\varphi_n,\eta_n),$$

и $\otimes^n\mathscr{H}$ — пополнение этой линейной оболочки по такому внутреннему произведению. Любому заданному оператору $A\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$ отвечает естественно определенный оператор $\Gamma_n(A)$ в $\mathscr{L}(\otimes^n\mathscr{H})$:

$$\Gamma_n(A)(\varphi_1\otimes\ldots\otimes\varphi_n)=A\varphi_1\otimes\ldots\otimes A\varphi_n.$$

При этом Γ_n — функтор, т. е. $\Gamma_n(AB)=\Gamma_n(A)\Gamma_n(B)$.

Пусть $\mathscr{P}_n$ обозначает группу всех перестановок n объектов. Пусть $\varepsilon(\cdot)$ — функция на $\mathscr{P}_n$, равная $+1$ (соответственно -1) на четных (соответственно нечетных) перестановках. Определим

$\varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_n \in \otimes^n \mathcal{H}$ равенством

$$\varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_n = (n!)^{-1/2} \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} \varepsilon(\pi) [\varphi_{\pi(1)} \otimes \cdots \otimes \varphi_{\pi(n)}], \quad (185)$$

и пусть $\wedge^n(\mathcal{H})$ — подпространство в $\otimes^n \mathcal{H}$, порождаемое всеми $\{\varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_n\}$. Нормировочный множитель $(n!)^{-1/2}$ выбран так, чтобы для ортонормированных $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$ норма $\varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_n$ была равна 1. Более обще, из (185) следует (задача 149), что

$$(\varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_n, \eta_1 \wedge \ldots \wedge \eta_n) = \det((\varphi_i, \eta_j)), \quad (186)$$

где $\det(a_{ij}) = \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} \varepsilon(\pi) a_{1\pi(1)} \ldots a_{n\pi(n)}$.

Для заданного $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ оператор $\Gamma_n(A)$ оставляет $\wedge^n(\mathcal{H})$ инвариантным. и мы обозначим его сужение на $\wedge^n(\mathcal{H})$ через $\wedge^n(A)$. Поскольку Γ_n — функтор, $\wedge^n$ тоже функтор:

$$\wedge^n(AB) = \wedge^n(A) \wedge^n(B). \quad (187)$$

При $n=0$ определим $\wedge^n(\mathcal{H})$ как $\mathbb{C}$, а $\wedge^n(A)$ — как $1: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$.

Связь между определителями конечномерных операторов и $\wedge^n(\cdot)$ устанавливает

Лемма 2. (a) Пусть $\mathcal{H}$ есть n-мерное гильбертово пространство. Тогда $\wedge^n(\mathcal{H})$ одномерно.

(b) Если размерность $\mathcal{H}$ равна n, то $\wedge^n(A)$ есть умножение на число $\det(A)$, т. е. обычный определитель A.

(c) $\det(AB) = \det(A)\det(B)$.

Доказательство. (a) Установим более общий факт: $\dim \wedge^k(\mathcal{H}) = \binom{n}{k}$, где $\binom{n}{k}$ — число способов выбрать k объектов из n. В самом деле, пусть $e_1, \ldots, e_n$ — ортонормированный базис в $\mathcal{H}$. Мы утверждаем, что

$$\{e_{i_1} \wedge \ldots \wedge e_{i_k} \mid 1 \leqslant i_1 < i_2 < \ldots < i_k \leqslant n\}$$

— ортонормированный базис в $\wedge^k(\mathcal{H})$; отсюда будет следовать нужное равенство. Но это так, ибо рассматриваемые векторы ортонормированы, а потому линейно независимы и порождают $\wedge^k(\mathcal{H})$, ибо отображение $\langle \varphi_1, \ldots, \varphi_k \rangle \mapsto \varphi_1 \wedge \ldots \wedge \varphi_k$ полилинейно и кососимметрично относительно перестановок.

(b) Поскольку $\wedge^n(\mathcal{H})$ одномерно, $\wedge^n(A)$ должен быть умножением на какое-то число α. Если $e_1, \ldots, e_n$ — ортонормированный базис, то, в силу (186),

$$\alpha = (e_1 \wedge \ldots \wedge e_n, \wedge^n(A) e_1 \wedge \ldots \wedge e_n) =$$
$$= (e_1 \wedge \ldots \wedge e_n, Ae_1 \wedge \ldots \wedge Ae_n) = \det((e_i, Ae_j)).$$

(c) следует из (b) и (187). ∎

Это довольно легкое доказательство равенства $\det(AB) = \det(A)\det(B)$ демонстрирует мощь методов теории внешних алгебр при изучении определителей.

Чтобы пояснить определение, которым мы пользуемся для $\det(1+A)$, когда $A \in \mathcal{J}_1$, предположим что A — оператор в конечномерном пространстве $\mathcal{H}$ с $\dim \mathcal{H} = n$. Пусть $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ — собственные значения A, а $e_1, \ldots, e_n$ — базис Шура для A. Легко видеть, что

$$\det(1+A) = (e_1 \wedge \ldots \wedge e_n, (1+A)e_1 \wedge \ldots \wedge (1+A)e_n) = \prod_{j=1}^{n}(1+\lambda_j)$$

и

$$\operatorname{Tr}(\wedge^k(A)) = \sum_{1 \leqslant i_1 < \ldots < i_k \leqslant n} (e_{i_1} \wedge \ldots \wedge e_{i_k}, Ae_{i_1} \wedge \ldots \wedge Ae_{i_k}) = \sum_{1 \leqslant i_1 < \ldots < i_k \leqslant n} \lambda_{i_1} \ldots \lambda_{i_k},$$

так что в случае $\dim \mathcal{H} = n < \infty$

$$\det(1+A) = \sum_{j=0}^{n} \operatorname{Tr}(\wedge^j(A)). \tag{188}$$

В случае $\dim \mathcal{H} = \infty$ мы *определим* $\det(1+A)$ формулой (188). Для доказательства сходимости суммы нам понадобится

Лемма 3. Пусть A — оператор со следом и $\mu_n(A)$ — его сингулярные числа. Тогда для любого k оператор $\wedge^k(A)$ имеет след и

(a) $\| \wedge^k(A) \|_1 = \sum_{i_1 < \ldots < i_k} \mu_{i_1}(A) \ldots \mu_{i_k}(A)$;

(b) $\| \wedge^k(A) \|_1 \leqslant \| A \|_1^k / k!$.

Доказательство. Пусть $A = U|A|$ — полярное разложение A (теорема VI.10). Легко видеть, что $\wedge^k(A) = \wedge^k(U) \wedge^k(|A|)$ — полярное разложение $\wedge^k(A)$ и, в частности,

$$|\wedge^k(A)| = \wedge^k(|A|).$$

Пусть $e_1, \ldots$ — ортонормированный базис из собственных векторов $|A|$. Тогда $e_{i_1} \wedge \ldots \wedge e_{i_k}$ — ортонормированный базис из собственных векторов $\wedge^k(|A|)$. Таким образом,

$$\operatorname{Tr}(|\wedge^k(A)|) = \sum_{i_1 < \ldots < i_k} \mu_{i_1}(A) \ldots \mu_{i_k}(A) \leqslant \frac{1}{k!} \sum_{i_1, \ldots, i_k} \mu_{i_1}(A) \ldots \mu_{i_k}(A) = [\operatorname{Tr}(|A|)]^k / k!.$$

Следовательно, $\wedge^k(A)$ имеет след, и утверждения (a), (b) справедливы. ∎

Определение. Пусть $A \in \mathscr{I}_1$. Тогда по определению

$$\det(1+A)=\sum_{k=0}^{\infty}\operatorname{Tr}(\wedge^k(A)). \tag{188}$$

Лемма 4. Сумма (188) сходится для любого $A \in \mathscr{I}_1$. Более того,

(a) $|\det(1+A)| \leqslant \prod_{j=1}^{\infty}(1+\mu_j(A))$;

(b) $|\det(1+A)| \leqslant \exp(\|A\|_1)$;

(c) для любых $A_1, \ldots, A_n \in \mathscr{I}_1$

$$\langle z_1, \ldots, z_n\rangle \longmapsto \det\left(1+\sum_{j=1}^{n} z_j A_j\right)$$

есть целая аналитическая функция;

(d) для любых $A, B \in \mathscr{I}_1$

$$|\det(1+A)-\det(1+B)| \leqslant \|A-B\|_1 \exp(\|A\|_1+\|B\|_1+1). \tag{189}$$

Доказательство. Поскольку $|\operatorname{Tr}(\wedge^k(A))| \leqslant \|\wedge^k(A)\|_1/k!$, сходимость в (188) и неравенства (a), (b) следуют из леммы 3. Поскольку у нас есть оценки членов суммы (188), равномерные на компактных множествах в $\mathbb{C}^n$, достаточно доказать, что аналитично отображение

$$\langle z_1, \ldots, z_n\rangle \longmapsto \operatorname{Tr}(\wedge^k(z_1A_1+\ldots+z_kA_k)).$$

Ясно, что $\wedge^k(z_1A_1+\ldots+z_kA_k)$ аналитична как $\mathscr{I}_1$-значная функция, поэтому ее след аналитичен, ибо $\operatorname{Tr}(\cdot)$—ограниченный линейный функционал на $\mathscr{I}_1$. Это доказывает (c). Неравенство (d) вытекает из (b), (c) и следующей теоремы. ∎

Теорема XIII.104. Пусть X—комплексное банахово пространство. Пусть F: $X \to \mathbb{C}$—функция со следующими свойствами:

(i) $\mu \longmapsto F(x+\mu y)$—целая функция μ при любых $x, y \in X$;

(ii) для некоторой монотонно возрастающей функции G на $[0, \infty)$ при всех $x \in X$

$$|F(x)| \leqslant G(\|x\|).$$

Тогда

$$|F(x)-F(y)| \leqslant \|x-y\| G(\|x\|+\|y\|+1). \tag{190}$$

Доказательство. Фиксируем x и y в X, и пусть f: $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$ задана равенством

$$f(\mu)=F(^1/_2(x+y)+\mu(y-x)),$$

так что, в силу (i), f—целая функция. Отметим, что

$$|F(x)-F(y)|=|f(-^1/_2)-f(^1/_2)| \leqslant \sup_{-1/2 \leqslant t \leqslant 1/2}|f'(t)|. \tag{191}$$

По формуле Коши

$$f'(t)=\frac{1}{2\pi i}\oint\limits_{|\mu-t|=\|x-y\|^{-1}}\frac{f(\mu)}{(\mu-t)^2}d\mu,$$

и потому

$$\sup_{|t|<1/2}|f'(t)|\leqslant\|x-y\|\sup_{|\mu|<1/2+\|x-y\|^{-1}}|f(\mu)|. \tag{192}$$

При $|\mu|\leqslant{}^1/_2+\|x-y\|^{-1}$ справедливо неравенство

$$\|{}^1/_2(x+y)+\mu(y-x)\|\leqslant\|x\|+\|y\|+1,$$

так что для таких μ, в силу (ii),

$$|f(\mu)|\leqslant G(\|x\|+\|y\|+1). \tag{193}$$

Из неравенств (191)—(193) следует (190). ∎

Предположим, что $A\in\mathfrak{I}_1$. Идея доказательства равенства $\operatorname{Tr}(A)=\sum\lambda_n(A)$ такова. Допустим, что мы сумели доказать сходимость разложения $\prod\limits_{j=1}^{N(A)}(1+z\lambda_j(A))$ для $\det(1+zA)$. Член, линейный по z, в этом произведении с очевидностью равен $\sum\limits_{j=1}^{N(A)}\lambda_j(A)$, тогда как линейный по z член в $\det(1+zA)$ по определению есть $\operatorname{Tr}(A)$. Поэтому нам следует изучить функцию $\det(1+zA)$. Сначала сведем вместе свойства $\det(1+A)$.

Теорема XIII.105. Пусть A и B взяты из $\mathfrak{I}_1$. Тогда:

(a) $$\det(1+A)\det(1+B)=\det(1+A+B+AB); \tag{194}$$

(b) $(1+A)$ обратим тогда и только тогда, когда $\det(1+A)\neq 0$;

(c) если $-\mu^{-1}$ есть собственное значение A, то $\det(1+zA)$ имеет нуль n-го порядка в точке $z=\mu$, где n — алгебраическая кратность $-\mu^{-1}$;

(d) для каждого ε существует зависящая от A константа C_ε, такая, что

$$|\det(1+zA)|\leqslant C_\varepsilon\exp(\varepsilon|z|).$$

Доказательство. (a) Поскольку множество операторов конечного ранга плотно в $\mathfrak{I}_1$ (следствие теоремы VI.21), а $\det(1+\cdot)$, в силу (189),— непрерывная функция, достаточно установить (194) в случае, когда A и B — операторы конечного ранга. Пусть V—линейная оболочка подпространств $(\operatorname{Ker}A)^\perp$, $(\operatorname{Ker}B)^\perp$, $\operatorname{Ran}A$, $\operatorname{Ran}B$. Тогда V — конечномерное подпространство, инвариантное относительно действия A, B, A^*, B^*, причем A и B равны нулю на $V^\perp$. Таким образом, A и B оставляют инвариантными V и $V^\perp$. Пусть $\tilde{A}=$

$= A \restriction V$, $\tilde{B} = B \restriction V$. Тогда $\operatorname{Tr}(\wedge^k(A)) = \operatorname{Tr}(\wedge^k(\tilde{A}))$ и т. д. Следовательно,

$$\det(1+A) = \det_V(1+\tilde{A}),$$

и аналогично для B и $A+B+AB$, где $\det_V$ есть определитель на V. Теперь (194) вытекает из пункта (c) леммы 2.

(b) Если оператор $1+A$ обратим, то $(1+A)^{-1} = 1+B$, где $B = -A(1+A)^{-1} \in \mathcal{J}_1$. Тогда, в силу (194),

$$\det(1+A)\det(1+B) = \det(1) = 1,$$

так что $\det(1+A) \neq 0$. Если $1+A$ необратим, то -1 есть собственное значение A, и потому $\det(1+A) = 0$ в силу пункта (c), который мы сейчас докажем.

(c) Пусть P — спектральный проектор, отвечающий $-\mu^{-1}$. Пусть $B = AP$ и $C = A(1-P)$. Тогда

$$1+zA = (1+zB)(1+zC),$$

так что $\det(1+zA) = \det(1+zB)\det(1+zC)$. Поскольку $1+zC$ обратим для любых z около $-\mu^{-1}$, достаточно показать, что $\det(1+zB)$ обладает нулем n-го порядка в точке $-\mu^{-1}$. Расширяя базис Шура оператора B до базиса всего $\mathcal{H}$, можно построить ортонормированный базис, такой, что

$$Be_i = \lambda_i e_i + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} e_j,$$

где $\lambda_1 = \ldots = \lambda_n = -\mu^{-1}$ и $\lambda_{n+1} = \ldots = 0$. Здесь мы воспользовались тем, что $\operatorname{Ran} B \subset P = \{$линейная оболочка базиса Шура$\}$. Теперь легко вывести, что $\operatorname{Tr}(\wedge^k(B)) = \binom{n}{k}(-\mu^{-1})^k$ при $k \leqslant n$ и $\operatorname{Tr}(\wedge^k(B)) = 0$ при $k > n$. В итоге $\det(1+zB) = (1-z\mu^{-1})^n$ имеет при $z = \mu$ нуль n-го порядка.

(d) Пусть $\mu_n(A)$ — сингулярные числа A. Выберем N таким, чтобы

$$\sum_{n>N} \mu_n(A) < \varepsilon/2.$$

Тогда, в силу пункта (a) леммы 4,

$$|\det(1+zA)| \leqslant \prod_{j=1}^{\infty}(1+|z|\mu_j(A)) \leqslant \prod_{j=1}^{N}(1+|z|\mu_j(A)) \exp\left(\frac{\varepsilon}{2}|z|\right),$$

ибо $1+x \leqslant e^x$ при $x \geqslant 0$. Теперь, поскольку $\prod_{j=1}^{N}(1+|z|\mu_j(A))$ — полином, можно найти такую константу C_ε, чтобы

$$\prod_{j=1}^{N}(1+|z|\mu_j(A)) \leqslant C_\varepsilon \exp\left(\frac{\varepsilon}{2}|z|\right). \blacksquare$$

Теорема XIII.106. Для любого $A \in \mathfrak{I}_1$

$$\det(1+A) = \prod_{j=1}^{N(A)} (1+\lambda_j(A)),$$

где $\{\lambda_j(A)\}_{j=1}^{N(A)}$ — собственные значения A, выписанные с учетом алгебраической кратности.

Доказательство. Пусть $f(z) = \det(1+zA)$ и

$$g(z) = \prod_{j=1}^{N(A)} (1+z\lambda_j(A)).$$

Если $N(A) = \infty$, то это произведение сходится к аналитической функции в силу общих результатов теории бесконечных произведений (см. задачу 150), ибо по теореме XIII.103

$$\sum_{j=1}^{\infty} |\lambda_j(A)| < \infty.$$

Покажем, что $f(z) = g(z)$. В силу пунктов (b) и (c) теоремы XIII.105, f и g имеют одни и те же нули одной и той же кратности. Поэтому f/g — целая аналитическая функция, не имеющая нулей, так что

$$f = ge^h,$$

где произвол в выборе h устраняется требованием, чтобы она была целой функцией с $h(0) = 0$. Этого можно требовать, ибо $f(0) = g(0) = 1$. Покажем, что $h(z) = 0$ для $|z| < 1$, так что h есть тождественный нуль. При $R \geqslant 2$ и $|z| < R$ введем

$$h_R(z) = \ln[f_R(z)], \quad k_R(z) = -\sum_{\{j \mid |\lambda_j|^{-1} > R\}} \ln(1+z\lambda_j(A)),$$

$$f_R(z) = f(z) \Big/ \prod_{\{j \mid |\lambda_j|^{-1} < R\}} (1+z\lambda_j(A)).$$

Произвол в определении h_R и k_R устраняется условием $h_R(0) = k_R(0) = 0$. Отметим, что f_R — целая функция. Поскольку $h = h_R + k_R$, достаточно показать, что $|h_R(z)| \to 0$ и $|k_R(z)| \to 0$ при $R \to \infty$ для каждого z с $|z| \leqslant 1$.

Поскольку $\ln(1+x)$ равен нулю при $x = 0$ и аналитичен в окрестности $\{x \mid |x| \leqslant 1/2\}$, для всех x с $|x| \leqslant 1/2$

$$|\ln(1+x)| \leqslant C|x|$$

с подходящей константой C. Таким образом, для $R \geqslant 2$

$$|k_R(z)| \leqslant |z| \sum_{\{j \mid |\lambda_j|^{-1} > R\}} |\lambda_j(A)| \to 0$$

при $R \to \infty$, ибо сумма в правой части сходится.

Рассмотрим теперь целую функцию $f_R(z)$. Если $|z|=2R$ и $|\lambda_j|^{-1}\leqslant R$, то $|1+z\lambda_j|\geqslant 1$. Тогда, в силу пункта (d) теоремы XIII.105, $|f_R(z)|\leqslant C_\varepsilon \exp(2\varepsilon R)$, если $|z|=2R$. В силу принципа максимума модуля это остается справедливым и при $|z|=R$, так что

$$\operatorname{Re}(h_R(z))\leqslant \ln C_\varepsilon+2\varepsilon R$$

при $|z|=R$. Ниже мы докажем лемму, согласно которой для любой аналитической в окрестности $|z|\leqslant R$ функции f справедливо неравенство (195). Поэтому с учетом условия $h_R(0)=0$

$$\max_{|z|\leqslant 1}|h_R(z)|\leqslant 2(R-1)^{-1}[\ln C_\varepsilon+2\varepsilon R].$$

В итоге для любого z с $|z|\leqslant 1$

$$\overline{\lim_{R\to\infty}}\,|h_R(z)|\leqslant 4\varepsilon,$$

и так как ε произвольно, то $|h_R(z)|\to 0$ при $R\to\infty$. ∎

Следствие (теорема Лидского). Для любого $A\in\mathfrak{I}_1$ имеет место формула (177):

$$\operatorname{Tr}(A)=\sum_{j=1}^{N(A)}\lambda_j(A),$$

где $\lambda_j(A)$ — собственные значения A.

Доказательство. Рассмотрим разложение $\det(1+\mu A)$ в ряд Тейлора около $\mu=0$. В силу (188), первый член разложения, определяющий det, есть $\operatorname{Tr}(A)$, а первый член в произведении $\prod_{j=1}^{N(A)}(1+\mu\lambda_j(A))$ есть $\sum_{j=1}^{N(A)}\lambda_j(A)$. ∎

Можно попытаться извлечь что-то из каждого члена разложения $\det(1+\mu A)$ в ряд Тейлора. Действительно, k-й член разложения дает в точности равенство (177) для $\wedge^k(A)$, т. е.

$$\operatorname{Tr}(\wedge^k(A))=\sum_{j=1}^{N(\wedge^k(A))}\lambda_j(\wedge^k(A))=\sum_{1\leqslant i_1<\ldots<i_k\leqslant N(A)}\lambda_{i_1}(A)\ldots\lambda_{i_k}(A).$$

Ввиду этого равенства теорему XIII.106 можно вывести из (177).

При доказательстве теоремы 106 был использован следующий факт из комплексного анализа.

Лемма 5 (теорема Бореля—Каратеодори). Пусть f аналитична в окрестности $|z|\leqslant R$. Тогда для любого $r<R$

$$\max_{|z|\leqslant r}|f(z)|=\frac{2r}{R-r}\max_{|z|=R}[\operatorname{Re}(f(z))]+\frac{R+r}{R-r}|f(0)|. \qquad (195)$$

Доказательство. Прежде всего отметим, что без ограничения общности можно считать $f(0)=0$, ибо если (195) выполнено для $h(z)=f(z)-f(0)$, то оно выполнено и для f. Таким образом, положим $f(0)=0$, и пусть $A=\max\limits_{|x|=R}[\operatorname{Re} f(z)]$. Опять-таки без потери общности предположим, что f отлична от тождественного нуля, так что $A>0$. В силу принципа максимума модуля, примененного к $\exp(f)$, $\operatorname{Re} f(z)\leqslant A$ для всех z с $|z|\leqslant R$, так что функция

$$g(z)\equiv\frac{f(z)}{z(2A-f(z))}$$

аналитична при $|z|<R$. Представив f в виде $u+iv$, мы видим, что в случае $|z|=R$

$$|g(z)|^2=\frac{1}{R^2}\frac{u^2+v^2}{(2A-u)^2+v^2}\leqslant\frac{1}{R^2},$$

поскольку $|u|\leqslant|2A-u|$. Таким образом, в силу принципа максимума модуля, $|g(z)|\leqslant 1/R$ для всех z с $|z|\leqslant R$. Поскольку

$$f(z)=\frac{2Azg(z)}{1+zg(z)},$$

получаем, что для $|z|=r$

$$|f(z)|\leqslant\frac{2Ar/R}{1-r/R}=\frac{2Ar}{R-r}.$$

Привлекая еще раз принцип максимума модуля, заключаем, что (195) справедливо. ∎

Применим теперь развитую теорию к изучению третьего вопроса, сформулированного в начале раздела, т. е. попытаемся найти в явном виде такие функции $f(\mu)$ и $g(\mu)$, что $(1+\mu A)^{-1}=$ $=f(\mu)/g(\mu)$.

Теорема XIII.107. Пусть $A\in\mathfrak{I}_1$. Функцию

$$F_A(\mu)=[\det(1+\mu A)][1+\mu A]^{-1},$$

определенную на $\{\mu\,|\,-\mu^{-1}\notin\sigma(A)\}$, можно продолжить на всю плоскость $\mathbb{C}$ так, что F будет целой функцией. Более того,

$$\|F_A(\mu)\|\leqslant\exp(|\mu|\,\|A\|_1)\tag{196}$$

и

$$\|F_A(1)-F_B(1)\|\leqslant\|A-B\|_1\exp(\|A\|_1+\|B\|_1+1).\tag{197}$$

Доказательство. По теореме VI.5 функция $G(\mu)=(1+\mu A)^{-1}$ аналитична на $\{\mu\,|\,-\mu^{-1}\notin\sigma(A)\}$. Если показать, что $G(\mu)$ в точке $\mu=\mu_0$, такой, что $-\mu_0^{-1}\in\sigma(A)$, имеет полюс порядка k, причем k не превосходит алгебраической кратности $-\mu_0^{-1}$, то $\det(1+\mu A)\,G(\mu)$

будет регулярной функцией в точке $\mu=\mu_0$, поскольку $\det(1+\mu A)$ имеет нуль, порядок которого равен этой же кратности. Если есть такая точка μ_0, обозначим через P спектральный проектор, отвечающий $-\mu_0^{-1}$. Пусть $B=AP$ и $C=A-B$. Тогда

$$(1+\mu A)^{-1}=(1+\mu B)^{-1}P+(1+\mu C)^{-1}(1-P).$$

Второй член в правой части не сингулярен в точке μ_0, поскольку $-\mu_0^{-1}\notin\sigma(C)$. Используя теорию конечномерных определителей и матриц и учитывая конечность ранга оператора B, можно обратить оператор $1+\mu B$ и представить $(1+\mu B)^{-1}$ в виде отношения со знаменателем $\det(1+\mu B)$, равным некоторому полиному степени d, где $d=\dim P$. В итоге получаем, что $(1+\mu B)^{-1}$ обладает полюсом порядка не выше d.

Остается доказать (196) и (197). Имея в виду предельный переход (задача 151), можно ограничиться доказательством (196) в конечномерном случае, когда $(1+\mu A)$ в придачу еще и обратим. Поскольку $1+\mu A=U\,|1+\mu A|$ с унитарным оператором U, то

$$\|(1+\mu A)^{-1}\det(1+\mu A)\|=\|\,|1+\mu A|^{-1}\det(|1+\mu A|)\,\|.$$

Пусть $\lambda_1,\ldots,\lambda_k$ — собственные значения $|1+\mu A|$, причем $\lambda_1\geqslant\ldots\geqslant\lambda_k$. Тогда

$$\|\,|1+\mu A|^{-1}\det(|1+\mu A|)\,\|=\lambda_k^{-1}\prod_{l=1}^{k}\lambda_l=\prod_{l=1}^{k-1}\lambda_l.$$

Пусть $\alpha_1,\ldots,\alpha_k$ — собственные значения $|A|$. Можно доказать (задача 158), что $\lambda_l\leqslant1+|\mu|\alpha_l$, и, значит,

$$\begin{aligned}\|(1+\mu A)^{-1}\det(1+\mu A)\|&\leqslant\prod_{l=1}^{k-1}(1+|\mu|\alpha_l)\leqslant\\&\leqslant\prod_{l=1}^{k-1}\exp(|\mu|\alpha_l)\leqslant\exp(|\mu|\operatorname{Tr}|A|),\end{aligned}$$

откуда следует (196). Применяя теперь теорему XIII.104 с учетом (196) к функции $(\varphi, F_A(1)\psi)$, получаем (197) (задача 170). ∎

Неравенства (196) и (b) леммы 4 позволяют оценить ошибки, допускаемые при обрывании рядов для $\det(1+\mu A)$ и $(1+\mu A)^{-1}\times\times\det(1+\mu A)$ (задача 152). По этой причине интересно найти коэффициенты этих рядов. У нас уже есть разложение $\det(1+\mu A)$ в терминах $\wedge^k(A)$; подобное разложение возможно и для функции

$$D_\mu(A)\equiv A(1+\mu A)^{-1}\det(1+\mu A)$$

в терминах частичных следов операторов $\wedge^k(A)$ (задача 153). Это разложение, по существу, есть абстрактный вариант разложения, которое использовал Фредгольм в своей знаменитой статье об интегральных уравнениях. Заметим, что $D_\mu(A)$ определена таким образом, что

$$(1+\mu A)^{-1} = 1 - \mu\,[D_\mu(A)/\det(1+\mu A)].$$

Однако вычислить выражения $\wedge^k(A)$ через A не так уж просто, поэтому желательно иметь выражение коэффициентов ряда Тейлора для $\det(1+\mu A)$ и $D_\mu(A)$ через величины типа A, A^2, ... и их следы.

Лемма 6. Пусть A — фиксированный элемент из $\mathfrak{I}_1$. Тогда для малых $|\mu|$ ряд $\sum\limits_{k=1}^{\infty} \mu^k \operatorname{Tr}((-A)^k)/k$ сходится и

$$\det(1+\mu A) = \exp\left[-\sum_{k=1}^{\infty} \mu^k \operatorname{Tr}[(-A)^k]/k\right].$$

Доказательство. Поскольку

$$|\operatorname{Tr}[(-A)^k]| \leqslant \|A^k\|_1 \leqslant \|A\|_1 \|A\|^{k-1},$$

ряд сходится, если $|\mu|\,\|A\|_{\text{op}} < 1$. Более того, в силу теоремы Лидского (теорема XIII.106 и ее следствие) и выражения det в виде произведения, для $|\mu| \max\limits_{1 \leqslant j \leqslant N(A)} |\lambda_j(A)| < 1$ имеем

$$\begin{aligned}
\ln[\det(1+\mu A)] &= \sum_{j=1}^{N(A)} \ln(1+\mu\lambda_j(A)) = \sum_{j=1}^{N(A)} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \mu^k \lambda_j(A)^k/k = \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \mu^k \left[\sum_{j=1}^{N(A)} \lambda_j(A)^k\right] \Big/ k = \\
&= -\sum_{k=1}^{\infty} \mu^k \operatorname{Tr}((-A)^k)/k.
\end{aligned}$$

Выше мы учли сходимость разложения $\ln(1+x)$ на множестве $\{x \mid |x| < 1\}$. Возможность перемены порядка суммирования легко обосновать, показав, что, в силу неравенств $\sum|\lambda_j(A)| < \infty$ и $|\mu| \max|\lambda_j(A)| < 1$, двойная сумма абсолютно сходится. ∎

Лемма 7. Пусть $f(z)$ — функция, аналитическая при малых $|z|$ и представимая в виде

$$f(z) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} b_n \frac{z^n}{n}.$$

Пусть

$$g(z) \equiv \exp(f(z)) = \sum_{m=0}^{\infty} B_m \frac{z^m}{m!}.$$

Тогда $B_0=1$, а B_m задаются определителями $m\times m$-матриц:

$$B_m=\begin{vmatrix} b_1 & m-1 & 0 & \dots & 0 \\ b_2 & b_1 & m-2 & \dots & 0 \\ b_3 & b_2 & b_1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{m-1} & b_{m-2} & b_{m-3} & \dots & 1 \\ b_m & b_{m-1} & b_{m-2} & \dots & b_1 \end{vmatrix}. \tag{198}$$

Доказательство. Поскольку $g'(z)=f'(z)g(z)$, рассматриваемые степенные ряды связаны соотношениями

$$B_n=\sum_{k=1}^{n} b_k B_{n-k}(-1)^{k+1}\left(\frac{(n-1)!}{(n-k)!}\right). \tag{199}$$

При $m=1$ равенство (198) выполняется очевидным образом. Но тогда, если оно справедливо для $B_1, \dots, B_{m-1}$, то (199) есть в точности разложение определителя (198) по первому столбцу, и утверждение леммы получается по индукции. ∎

Теорема XIII.108 (формула Племеля—Смитиса). Введем $\alpha_m(A)$ и $\beta_m(A)$ формулами

$$\det(1+\mu A)=\sum_{m=0}^{\infty}\mu^m\frac{\alpha_m(A)}{m!},\qquad D_\mu(A)=\sum_{m=0}^{\infty}\mu^m\frac{\beta_m(A)}{m!}.$$

Тогда $\alpha_m(A)$ задается $m\times m$-определителем

$$\alpha_m(A)=\begin{vmatrix} \operatorname{Tr}(A) & m-1 & 0 & \dots & 0 \\ \operatorname{Tr}(A^2) & \operatorname{Tr}(A) & m-2 & \dots & 0 \\ \operatorname{Tr}(A^3) & \operatorname{Tr}(A^2) & \operatorname{Tr}(A) & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & 1 \\ \operatorname{Tr}(A^m) & \operatorname{Tr}(A^{m-1}) & \operatorname{Tr}(A^{m-2}) & \dots & \operatorname{Tr}(A) \end{vmatrix}, \tag{200}$$

а $\beta_m(A)$ задается $(m+1)\times(m+1)$-определителем

$$\beta_m(A)=\begin{vmatrix} A & m & 0 & \dots & 0 \\ A^2 & \operatorname{Tr}(A) & m-1 & \dots & 0 \\ A^3 & \operatorname{Tr}(A^2) & \operatorname{Tr}(A) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A^m & \operatorname{Tr}(A^{m-1}) & \operatorname{Tr}(A^{m-2}) & \dots & 1 \\ A^{m+1} & \operatorname{Tr}(A^m) & \operatorname{Tr}(A^{m-1}) & \dots & \operatorname{Tr}(A) \end{vmatrix}. \qquad (201)$$

Формулу (201) следует понимать в том смысле, что $(\varphi, \beta_m(A)\psi)$ задается числовым определителем, который получается заменой A^j в правой части (201) на $(\varphi, A^j\psi)$.

Доказательство. Формула (200) следует прямо из лемм 6 и 7. Для малых μ по формуле геометрической прогрессии, примененной к $A(1+\mu A)^{-1}$, имеем

$$D_\mu(A)=(A-\mu A^2+\mu^2 A^3-\dots)\det(1+\mu A).$$

Таким образом,

$$\beta_m(A)=m!\left[A\frac{\alpha_m(A)}{m!}-A^2\frac{\alpha_{m-1}(A)}{(m-1)!}+\dots\right].$$

Разлагая правую часть (201) по первому столбцу и используя (200), можно убедиться в справедливости (201). ∎

В качестве последнего абстрактного результата приведем теорему, в которой развитая выше техника применена к проблеме полноты системы обобщенных собственных векторов для одного специального класса операторов в $\mathcal{I}_1$.

Теорема XIII.109. Пусть A — строго m-аккретивный оператор со следом, т. е. для любого $\varphi\in\mathcal{H}$ существует такое $\varepsilon>0$, что

$$\arg[(\varphi, A\varphi)]\leqslant\pi/2-\varepsilon.$$

Тогда обобщенные собственные векторы оператора A порождают все $\mathcal{H}$.

Доказательство. Сначала мы докажем, что обобщенные собственные векторы, отвечающие ненулевым собственным значениям, порождают $\overline{\operatorname{Ran} A}$, а затем, что $\overline{\operatorname{Ran} A}+\operatorname{Ker} A=\mathcal{H}$. Пусть $\mathcal{M}$ — линейная оболочка обобщенных собственных векторов, отвечающих ненулевым собственным значениям. Поскольку A оставляет $\mathcal{M}$ инвариантным, A^* оставляет инвариантным $\mathcal{M}^\perp$. Пусть B — сужение A^* на $\mathcal{M}^\perp$. Докажем, что $B=0$; тогда из $\varphi\in\mathcal{M}^\perp$ следует $A^*\varphi=0$, откуда будет вытекать, что $\varphi\in(\operatorname{Ran} A)^\perp$, т.е. $\mathscr{M}^\perp\subset$ $\subset(\operatorname{Ran} A)^\perp$ и, значит, $\operatorname{Ran} A\subset\mathscr{M}$.

Прежде всего мы утверждаем, что $\sigma(B)=\{0\}$. Действительно, предположим, что $\lambda\in\sigma(B)$ и $\lambda\neq 0$. Тогда λ есть собственное значение B, поскольку B как сужение компактного оператора A^* компактен. По этой причине существует ненулевой вектор $\varphi\in\mathscr{M}^\perp$, такой, что $A^*\varphi=\lambda\varphi$. Тогда $\varphi\in(\operatorname{Ran}(A-\bar\lambda))^\perp$ и $\bar\lambda\in\sigma(A)$. Пусть P — спектральный проектор, отвечающий $\bar\lambda$. Тогда $\operatorname{Ran} P\subset\mathscr{M}$ и $\varphi\in(\operatorname{Ran} P)^\perp$. Но $\bar\lambda\notin\sigma(A\restriction(1-P)\mathscr{H})$, и потому $\operatorname{Ran}(1-P)\subset\operatorname{Ran}(A-\bar\lambda)$, так что $\varphi\in(\operatorname{Ran}(1-P))^\perp$. Поскольку $\operatorname{Ran} P+\operatorname{Ran}(1-P)=\mathscr{H}$, отсюда следует, что $\varphi=0$. Итак, спектр B состоит лишь из нуля.

Пусть $\varphi\in\mathscr{M}^\perp$. Введем векторнозначную аналитическую функцию

$$F(\mu)=(1-\mu B)^{-1}\varphi=-\mu^{-1}(B-\mu^{-1})^{-1}\varphi.$$

Поскольку $\sigma(B)=\{0\}$, F — целая функция. Более того, поскольку у B нет ненулевых собственных значений, $\det(1-\mu B)=1$, в силу теоремы XIII.106, и потому, в силу (196),

$$\|F(\mu)\|\leqslant\exp(|\mu|\,\|B\|_1)\,\|\varphi\|. \tag{202}$$

Но B еще и m-аккретивен, и потому, в силу теоремы VIII.17,

$$\|(B-\lambda)^{-1}\|\leqslant[\operatorname{dist}(\lambda,\ \{z\,|\,|\arg z|\leqslant\pi/2-\varepsilon\})]^{-1}.$$

В итоге для $|\arg\lambda|\geqslant\pi/2-\varepsilon/2$ имеем $\|(B-\lambda)^{-1}\varphi\|\leqslant$ $\leqslant|\lambda|^{-1}\operatorname{cosec}(\varepsilon/2)\,\|\varphi\|$. Отсюда при $|\arg\mu|\geqslant\pi/2-\varepsilon/2$

$$\|F(\mu)\|\leqslant\alpha, \tag{203}$$

где $\alpha=\|\varphi\|\operatorname{cosec}(\varepsilon/2)$. Мы утверждаем, что (203) справедливо для всех μ. Действительно, пусть $\beta=\frac{\pi}{2}\left[\frac{\pi}{2}-\frac{\varepsilon}{3}\right]^{-1}$. Для любого $C>0$ функция $F_C(\mu)=F(\mu)\exp(-C\mu^\beta)$ аналитична на множестве $D=\{\mu\,|\,|\arg\mu|\leqslant\pi/2-\varepsilon/2\}$ и, согласно (202), неравенствам $\beta>1$ и $\beta(\pi/2-\varepsilon/2)<\pi/2$, равномерно стремится к нулю при $|\mu|\to\infty$. Таким образом, по принципу максимума модуля $|F_C(\mu)|$ принимает свое наибольшее значение при $\arg\mu=\pm(\pi/2-\varepsilon/2)$, где она ограничена величиной α. Итак, для любого $C>0$ и $\mu\in D$ имеем $|F_C(\mu)|\leqslant\alpha$, откуда, полагая $C\downarrow 0$, получаем (203). Но если (203) выполняется, то по теореме Лиувилля $F(\mu)$ постоянна и, в частности, $F'(0)=B\varphi$ есть нуль. Таким образом, $B=0$ и, следовательно, как говорилось выше, $\overline{\operatorname{Ran} A}\subset\mathscr{M}$.

Пусть теперь φ произволен и $\psi_n=n^{-1}(A+n^{-1})^{-1}\varphi$. Поскольку A секториален, $\|\psi_n\|\leqslant\|\varphi\|$. Пусть ψ — слабая предельная точка последовательности $\{\psi_n\}$ при $n\to\infty$. Мы утверждаем, что $A\psi=0$

и $\varphi-\psi_n\in\operatorname{Ran}A$. Отсюда будет следовать, что $\varphi\in\operatorname{Ker}A+\overline{\operatorname{Ran}A}^w$, где $\overline{}^w$ — слабое замыкание. Но по теореме Хана — Банаха $\overline{\operatorname{Ran}A}^w=\overline{\operatorname{Ran}A}$, поскольку $\operatorname{Ran}A$—подпространство. Итак, теорема будет доказана, если показать, что $A\psi=0$ и $\varphi-\psi_n\in\operatorname{Ran}A$.

Фиксируем произвольный вектор η. Тогда

$$(\eta, A\psi)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\left(\eta, A\left(A+\frac{1}{n}\right)^{-1}\varphi\right)=$$

$$=\lim_{n\to\infty}\left[\frac{1}{n}(\eta,\varphi)-\frac{1}{n^2}\left(\eta,\left(A+\frac{1}{n}\right)^{-1}\varphi\right)\right]=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}(\eta,\varphi-\psi_n)=0,$$

поскольку $\|\psi_n\|\leqslant 1$. Это доказывает равенство $A\psi=0$. Более того,

$$\varphi-\psi_n=\left[1-\frac{1}{n}\left(A+\frac{1}{n}\right)^{-1}\right]\varphi=A\left(A+\frac{1}{n}\right)^{-1}\varphi,$$

так что $\varphi-\psi_n\in\operatorname{Ran}A$. ∎

Иногда при помощи методов этого раздела удается узнать кое-что и о неограниченных несамосопряженных операторах.

Следствие. Пусть A — генератор голоморфной сжимающей полугруппы. Предположим, что $(A+1)^{-1}$ имеет след. Тогда обобщенные собственные векторы A порождают все $\mathscr{H}$.

Доказательство. В силу предыдущей теоремы достаточно показать, что $(A+1)^{-1}$ есть строго m-аккретивный оператор, поскольку обобщенные собственные векторы A те же, что и у $(A+1)^{-1}$ (задача 159). Пусть $\eta\in\mathscr{H}$ и $\varphi=(A+1)^{-1}\eta$. Тогда

$$(\eta,(A+1)^{-1}\eta)=((A+1)\varphi,\varphi)=\overline{(\varphi, A\varphi)}+(\varphi,\varphi).$$

Таким образом, $|\arg(\eta,(A+1)^{-1}\eta)|\leqslant\pi/2-\varepsilon$, если $|\arg(\varphi, A\varphi)|\leqslant\pi/2-\varepsilon$. Поскольку A строго m-аккретивен, таков же и $(A+1)^{-1}$. ∎

Явная формула для $(1+\mu A)^{-1}$ при $A\in\mathscr{I}_1$ как в форме Племеля — Смитиса, которую мы обсуждали выше, так и в форме Фредгольма, которую мы не обсуждали, имеет ограниченную ценность по той причине, что многие компактные операторы, представляющие практический интерес, не имеют следа, хотя и принадлежат какому-то классу $\mathscr{I}_p$ с $p>1$. Отсюда понятно, почему важно распространить формулу Племеля — Смитиса на операторы из $\mathscr{I}_p$. Мы предлагаем читателю сделать это в задаче 155. Окончательные формулы столь же просты, как и формулы для операторов со следом, и тоже допускают оценку ошибок. В приводимых ниже примерах мы будем иногда пользоваться результатами обобщенной теории.

Пример 3. В § XI.6 мы нашли амплитуду рассеяния для потенциала $V \in R \cap L^1$ в виде решения φ интегрального уравнения

$$\varphi(x, k) = |V(x)|^{1/2} e^{ikx} - \int K(x, y)\varphi(y, k)\, dy,$$

где

$$K(x, y) = (4\pi |x-y|)^{-1} |V(x)|^{1/2} e^{i|k||x-y|} V(y)/|V(y)|^{1/2}.$$

Заметим, что, поскольку $V \in R$, оператор, задаваемый ядром K, есть оператор Гильберта—Шмидта и что K *не* самосопряжен. Модифицированная теория Фредгольма дает явные выражения для $\varphi(x, k)$ и $T(k, k')$. В отличие от ряда Борна (который, вообще говоря, сходится только при больших $|k|$) эти выражения справедливы для всех $k \notin \mathscr{E}$, где $\mathscr{E}$ — исключительное множество.

Пример 4. В примере, приведенном в конце § VI.5, было показано, как можно решить задачу Дирихле для уравнения Лапласа в $D \subset \mathbb{R}^3$ с помощью решения интегрального уравнения на ∂D. Там мы обсуждали это уравнение с точки зрения пространства $C(\partial D)$, но это же уравнение можно рассматривать в $L^2(\partial D, dS)$. В этом случае его ядро *не* принадлежит ни $\mathfrak{I}_1$, ни даже $\mathfrak{I}_2$, но простые соображения показывают, что оно лежит в $\mathfrak{I}_4$, а более тонкие рассуждения — что оно лежит в $\mathfrak{I}_3$ (или даже в любом $\mathfrak{I}_{2+\varepsilon}$ с $\varepsilon > 0$) (задача 160). Таким образом, можно выписать «явные» решения задачи Дирихле.

Пример 5. Согласно теореме XIII.11, оператор Шредингера $-d^2/dx^2 + \lambda V$ имеет неотрицательные собственные значения для всех достаточно малых положительных λ при условии, что потенциал V класса C_0^∞ неположителен и не равен тождественно нулю. Теория определителей, развитая в этом разделе, дает естественные средства для ответа на два дальнейших вопроса в связи с такими операторами. Что можно сказать о спектре таких операторов, если нарушено свойство неположительности V почти всюду? Является ли зависимость собственного значения, определенного при малых λ, аналитической в нуле? В этом примере мы все-таки будем считать, что $V \in C_0^\infty$.

Метод доказательства теоремы XIII.11 показывает, что $E < 0$ есть собственное значение $p^2 + \lambda V$ тогда и только тогда, когда 1 есть собственное значение $-\lambda |V|^{1/2} (p^2 - E)^{-1} V^{1/2}$, где $V^{1/2} = |V|^{1/2} \operatorname{sgn} V$. Пусть $E = -\alpha^2$ для $\alpha > 0$. Тогда $(p^2 - E)^{-1}$ — интегральный оператор с ядром $(2\alpha)^{-1} \exp(-\alpha |x - y|)$. Введем операторы K_α, L_α, M_α с ядрами

$$K_\alpha(x, y) = (2\alpha)^{-1} |V(x)|^{1/2} \exp(-\alpha |x-y|) V^{1/2}(y),$$

$$L_\alpha(x, y) = (2\alpha)^{-1} |V(x)|^{1/2} V^{1/2}(y), \qquad M_\alpha(x, y) = K_\alpha(x, y) - L_\alpha(x, y).$$

Простые соображения (задача 161) показывают, что M_α имеет след при всех α, а не только при $\alpha > 0$, и аналитичен по α. В силу высказанных выше соображений, $E < 0$ служит собственным значением $p^2 + \lambda V$ тогда и только тогда, когда

$$\det(1 + \lambda K_\alpha) = 0 \tag{204}$$

при $\alpha = +\sqrt{|E|}$. Далее, собственное значение $p^2 + \lambda V$, если оно существует, стремится к нулю при $\lambda \to 0$, поскольку V — ограниченное в смысле форм возмущение p^2. Поскольку M_α непрерывен в точке $\alpha = 0$, то, если $\alpha(\lambda)$ — решение (204), оператор $(1 + \lambda M_{\alpha(\lambda)})$ обратим для малых λ. Таким образом,

$$\det(1 + \lambda K_\alpha) = \det(1 + \lambda M_\alpha) \det(1 + \lambda L_\alpha (1 + \lambda M_\alpha)^{-1}),$$

поэтому (204) равносильно равенству

$$\det(1 + \lambda L_\alpha (1 + \lambda M_\alpha)^{-1}) = 0 \tag{205}$$

для малых λ. Но это оператор ранга 1, а для любого оператора B ранга 1 справедливо равенство (задача 162)

$$\det(1 + B) = 1 + \operatorname{Tr}(B).$$

В итоге (205) равносильно условию

$$F(\alpha, \lambda) \equiv \alpha + {}^1/_2 \lambda (V^{1/2}, (1 + \lambda M_\alpha)^{-1} |V|^{1/2}) = 0. \tag{206}$$

Теперь можно ответить на оба заданных выше вопроса. Функция F аналитична по совокупности переменных вблизи $\langle \alpha, \lambda \rangle = \langle 0, 0 \rangle$, $(\partial F / \partial \alpha)_{\lambda = 0} = 1$, $F(0, 0) = 0$. Следовательно, по теореме о неявной функции уравнение $F(\alpha, \lambda) = 0$ имеет единственное решение $\alpha(\lambda)$ для λ вблизи нуля, причем $\alpha(\lambda)$ близко к нулю и аналитично по λ. Отсюда заключаем, что $p^2 + \lambda V$ имеет собственное значение для малых положительных λ тогда и только тогда, когда $\alpha(\lambda) > 0$ при малых положительных λ. В таком случае $E(\lambda) = -\alpha(\lambda)^2$ аналитично по λ около $\lambda = 0$. Когда $\alpha(\lambda) > 0$? Вычисляя два первых члена разложения в ряд Тейлора $\alpha(\lambda)$, видим, что

$$\alpha(\lambda) = -\frac{\lambda}{2} \int V(x)\, dx - \frac{\lambda^2}{4} \int V(x) \, |x - y| \, V(y)\, dx\, dy + O(\lambda^3).$$

Заметим, что если член порядка $O(\lambda)$ в этом разложении равен нулю, то член порядка $O(\lambda^2)$ автоматически положителен, потому что $-|x - y|$ условно (строго) положительно определена (задача 163). Итак, справедлива следующая

Теорема XIII.110. Пусть V — ненулевая функция класса $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Тогда $-d^2/dx^2 + \lambda V$ обладает отрицательным собственным значением для *всех* положительных λ в том и только том случае, когда $\int V(x)\, dx \leqslant 0$, и это собственное значение аналитически зависит от λ около $\lambda = 0$.

Дальнейшее обсуждение этого примера, включающее случай, когда V нарушает как требование гладкости, так и компактности носителя, и случай двумерных потенциалов, для которых собственное значение *никогда* не является аналитическим около $\lambda = 0$, проводится в Замечаниях и цитированной там литературе.

ЗАМЕЧАНИЯ

§ XIII.1. Минимаксная характеристика собственных значений впервые была сформулирована в качестве технической леммы Фишером в работе: E. Fischer, Über Quadratische Formen mit reellen Koeffizienten.— *Monatsh. Math. Phys.* **16** (1905), 234—249. Г. Вейль в работе: H. Weyl, Das asymptotische Verteilungsgesetz der Eigenwerte linearer partieller Differentialgleichungen.— *Math. Ann.* **71** (1911), 441—469, воспользовался результатами, по духу очень близкими к принципу минимакса. Однако только Р. Курант в двадцатые годы впервые осознал далеко идущие последствия принципа минимакса, а также его мощь как инструмента исследования. Первая из серии его работ следующая: R. Courant, Über die Eigenwerte bei den Differentialgleichungen der mathematischen Physik.— *Math. Z.* 7 (1920), 1—57.

Расширение принципа минимакса с операторов, имеющих компактные резольвенты (что было основным приложением, сделанным Вейлем и Курантом), на произвольные операторы путем выделения существенного спектра давно широко известно. Его приложения (хотя и без точной формулировки) восходят (в опубликованном виде) по крайней мере к работе Като в *Trans. Amer. Math. Soc.*, указанной в замечаниях к § 3.

§ XIII.2. Многие дальнейшие приложения вариационных методов можно найти в книге: С. Гулд, Вариационные методы в задачах о собственных значениях. Введение в метод промежуточных задач Вайнштейна.— М.: Мир, 1970. Большое количество их также рассеяно по монографии Р. Куранта и Д. Гильберта, Методы математической физики. Т. 1, 2.— М.—Л.: Гостехтеориздат, 1951.

Центральная роль метода Релея—Ритца в развитии вариационных методов описана в обзорном докладе Р. Куранта: R. Courant, Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations.— *Bull. Amer. Math. Soc.* **49** (1943), 1—23:

«Со времен Гаусса и У. Томсона центральным пунктом анализа стала эквивалентность между краевыми задачами для уравнений в частных производных и задачами вариационного исчисления. Сначала превалировал теоретический интерес к доказательствам существования, и только намного позднее два физика: лорд Релей и Вальтер Ритц—предугадали возможные практические приложения. Они независимо выдвинули идею применить эту эквивалентность для численного нахождения решений, заменяя вариационные задачи более простыми задачами на отыскание экстремума, в которых следовало определить уже лишь конечное число параметров. Релей в своей классической работе «Теория звука», а также в других публикациях первым воспользовался такой процедурой. Но только впечатляющий успех Вальтера Ритца, а также сопутствовавшие ему трагические обстоятельства стали причиной общего к ней интереса. В двух публикациях 1908 и 1909 гг. Ритц, сознававший свою надвигающуюся смерть от чахотки, дал блестящее изложение этой теории и одновременно применил свой метод к вычислению линий узлов колебаний пластин—задаче классической физики, не имевшей до этого удовлетворительного решения».

«Теория звука» лорда Релея имеется в русском переводе: Дж. В. Стресс (лорд Релей), Теория звука.— М.: Гостехиздат, 1955. Две упомянутые работы

В. Ритца — это: W. Ritz, Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik.— *J. Reine Angew. Math.* **135** (1908), 1—61; Theorie der Transversalschwingungen einer quadratischen Platte mit freien Rändern.— *Ann. Physik* **28** (1909), 737—786. Ритц получил для своего метода теоремы сходимости, аналогичные по форме теореме XIII.4.

Неравенство Темпля впервые появилось в работе: G. Temple, The theory of Rayleigh's principle as applied to continuous systems.— *Proc. Roy. Soc.* **119A** (1928), 276—293. Темпль фактически доказал несколько неравенств для одной специальной задачи. Широкая область применимости и высокая точность оценки из теоремы XIII.5 впервые были отмечены Като: T. Kato, On the upper and lower bounds of eigenvalues.— *J. Phys. Soc. Japan* **4** (1949), 334—339. Простое доказательство, которое мы даем и которое использует некоторые из идей Като, принадлежит Т. Киносите и содержится в его первой статье об атоме гелия (см. ниже).

Неравенство Темпля — полезный инструмент в теории возмущений. Это было подчеркнуто Харрелом в его диссертации: E. Harrel, II, Thesis.— Princeton Univ. Press, 1976. Например, пользуясь неравенством Темпля, легко доказать, что если энергия E_0 основного состояния некоторого оператора H_0 невырожденна и дискретна, а V — регулярное возмущение, то, когда возмущенный собственный вектор $\psi_n(\lambda)$ известен до порядка n, будучи подставленным в выражение $E(\lambda)\approx(\psi(\lambda),\psi(\lambda))^{-1}\cdot(\psi(\lambda), H(\lambda)\psi(\lambda))$, он дает возмущенное значение энергии $E(\lambda)$ до порядка $2n+1$ (задача 12).

Существует множество других способов получения нижних оценок. Ситуация накануне пятидесятых годов резюмирована Като: «Формула, данная Темплем, наиболее точная среди подобных ей, хотя она самая старая и самая простая». Три недавних метода, интересных для квантовой теории,— это метод Базли, метод Лёвдина и метод Тирринга. Метод Базли основан на подходе, развитом Вайнштейном для вычисления оценок частоты вибрации зажатых пластин. Этот подход впервые возник в мемуаре Вайнштейна: A. Weinstein, Étude des spectres des équations aux dérivées partielles de la théorie des plaques élastique.— *Mémor. Sci. Math.*, No. 88, 1937. Базли первым применил этот метод к квантовой механике в работе: N. Bazley, Lower bounds for eigenvalues with application to the helium atom.— *Phys. Rev.* **120** (1958), 144—149. Далее этот метод был развит в работах: N. Bazley, D. Fox, Lower bounds for eigenvalues of Schrödinger's equation.— *Phys. Rev.* **124** (1961), 483—492; A procedure for estimating eigenvalues.— *J. Math. Phys.* **3** (1962), 469—471; Lower bounds for energy levels of molecular systems.— *J. Math. Phys.* **4** (1963), 1147—1153. Метод Лёвдина был развит в работе: P.-O. Löwdin, Studies in perturbation theory X, XI.— *Phys. Rev.* **139A** (1965), 357—372; *J. Chem. Phys.* **43S** (1965), 175—185. Сравнение этих двух методов в приложении к осциллятору с нелинейностью x^4 дано в работе: C. Reid, Lower bounds for the energy levels of anharmonic oscillators.— *J. Chem. Phys.* **43S** (1965), 180—189 (см. особенно примечание 4а).

Оценки Тирринга даны в лекциях: W. Thirring, Vorlesungen über Mathematische Physik, T7, Quantenmechanik.— Univ. Wien Lecture Notes, § 2.9. Его оценки включают как специальный случай неравенство Темпля, а также следующую оценку (задача 13): если ψ — основное состояние для H_0 и $V\geqslant 0$, то

$$H_0+(\psi, V^{-1}\psi)^{-1}(\psi,\ \cdot)\,\psi\leqslant H_0+V.$$

В частности, если энергия основного состояния дискретна и невырожденна, то энергия $E(\lambda)$ основного состояния $H_0+\lambda V$ удовлетворяет оценке

$$\lambda(\psi, V^{-1}\psi)^{-1}\leqslant E(\lambda)-E(0)\leqslant\lambda(\psi, V\psi),$$

коль скоро $\lambda(\psi, V^{-1}\psi)^{-1}\leqslant d$, где d — расстояние $E(0)$ от остального спектра H_0.

Эти методы, за исключением оценок Тирринга, дают не слишком хорошие оценки для систем с большим числом частиц. Для атомов можно пользоваться специальными свойствами кулонова потенциала, см.: P. Hertel, E. Lieb,

W. Thirring, Lower bound to the energy of complex atoms.— *J. Chem. Phys.* **62** (1975), 3355—3356.

По поводу применения техники оценок снизу к задачам описания мембран и пластин см. мемуар Вайнштейна (отмеченный выше), недавнюю книгу: A. Weinstein, W. Stenger, Methods of Intermediate Problems for Eigenvalues: Theory and Ramifications.— New York: Academic Press, 1971, а также: H. F. Weinberger, Lower bounds for higher eigenvalues by finite difference methods.— *Pacific J. Math.* **8** (1958), 339—368; J. Hersch, Lower bounds for all eigenvalues by cell functions: A refined form of H. F. Weinberger's method.— *Arch. Rational Mech. Anal.* **12** (1963), 361—366.

Приложение методов Релея—Ритца к атому гелия впервые было сделано Келльнером: G. W. Kellner, Die Ionisierungsspannung des Heliums nach der Schrödingerschen Theorie.— *Z. Phys.* **44** (1927), 91—109. Систематическое построение адекватных пробных функций восходит к трем фундаментальным работам Хиллераса: E. Hylleraas, Über den Grundzustand des Helium Atoms.— *Z. Phys.* **48** (1928), 469—494; Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium.— *Z. Phys.* **54** (1929), 347—366; Über den Grundterm der Zweielektronenprobleme von H^-, He, Li^+, Be^{++} usw.— *Z. Phys.* **65** (1930), 209—225. Прекрасное и очень личное описание истории этой задачи см. в статье Хиллераса: E. Hylleraas, Reminiscences from early quantum mechanics of two-electron atoms.— *Rev. Mod. Phys.* **35** (1963), 421—436.

Подробное рассмотрение релятивистских поправок к спектру атома гелия вместе с историей вопроса можно найти в книге: Г. Бете, Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами.— М.: Физматгиз, 1960.

В связи с тем что благодаря работе Герцберга стали доступны очень точные экспериментальные данные, возродился интерес к вычислениям энергии ионизации гелия для проверки квантовой электродинамики. Первые вычисления с высокой точностью появились в работах: T. Kinoshita, Ground state of the helium atom, I, II.— *Phys. Rev.* **105** (1957), 1490—1502; **115** (1959), 366—374. Более точные вычисления можно найти в работе: C. L. Pekeris, Ground state of two-electron atoms.— *Phys. Rev.* **112** (1958), 1649—1658; 1^1S and 2^3S states of helium.— *Phys. Rev.* **115** (1959), 1216—1221; 1^1S, 2^1S and 2^3S states of H^- and He.— *Phys. Rev.* **126** (1962), 1470—1476. К последней статье можно обращаться также за ссылками на экспериментальные данные и расчеты лембова сдвига.

§ XIII.3. Теорема XIII.6 (в несколько более слабой форме) появилась в книге Куранта и Гильберта (замечания к § 1). Наше доказательство взято из работы Саймона: B. Simon, On the infinitude or finiteness of the number of bound states for an N-body quantum system.— *Helv. Phys. Acta* **43** (1970), 607—630. В этой статье можно также найти пример трехчастичной системы, для которой чередуются конечные и бесконечные значения $N(\lambda)$. Дополнительное обсужденне в связи с теоремой XIII.6 можно найти в работе Л. Д. Фаддеева, О разложении произвольных функций по собственным функциям оператора Шреднигера.— *Вестник ЛГУ*, Матем., мех., астр. № 7 (1957), 164—172, а также в работе М. Ш. Бирмана, указанной ниже в связи с неравенством Бирмана—Швингера.

То, что модельный гамильтониан гелия имеет бесконечный дискретный спектр, было доказано Като: T. Kato, On the existence of solutions of the helium wave equation.— *Trans. Amer. Math. Soc.* **70** (1951), 212—218. Теорема Жислина (теорема XIII.7) впервые появилась в работе: Г. М. Жислин, Исследование спектра оператора Шредингера для системы многих частиц.— *Тр. Моск. матем. об-ва* **9** (1960), 81—128. Дополнительное обсуждение этой теоремы, ее обобщения на подпространства с фиксированной симметрией, а также другие доказательства можно найти в статье Саймона и в статьях: J. Uchiyama, On the discrete eigenvalues of the many particle systems.— *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **A2** (1966/67), 117—132; Г. М. Жислин, А. Г. Сигалов, О спектре оператора энергии для атомов с неподвижными ядрами на подпространствах, отвечающих неприводимым представлениям группы перестановок.— *Изв. АН СССР*, сер. матем., 29 (1965), 853—860, и E. Balslev, Spectral theory of Schrödinger operators of many body systems with permutation and rotation symmetries.— *Ann. Phys.* 73 (1972), 49—107.

Во многих ситуациях можно доказать, что многочастичная система имеет конечное число собственных значений в дискретном спектре, включая случай некоторых отрицательно заряженных ионов. См., например: J. Uchiyama, Finiteness of the number of discrete eigenvalues of the Schrödinger operator for a three particle system.— *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* A5 (1969), 51—63; Г. М. Жислин, О конечности дискретного спектра оператора энергии отрицательных атомарных и молекулярных ионов.— *Теор. и матем. физ* 7 (1971), 332—341; Д. Р. Яфаев, Точечный спектр в квантовомеханической задаче многих частиц.— *Функц. анализ и прилож.* 6 (1972), 103—104; М. А. Антонец, Г. М. Жислин, И. А. Шерешевский, О дискретном спектре гамильтониана квантовой системы N частиц.— *Теор. и матем. физ.* 16 (1973), 235—246; I. Sigal, On the point spectrum of the Schrödinger operators of multiparticle systems.— *Commun. Math. Phys.* 48 (1976), 137—154; B. Simon, Geometric methods in multiparticle quantum systems.— *Commun. Math. Phys.* 55 (1977), 259—274; R. Hill, Proof that the H^- ion has only one bound state.— *Phys. Rev. Lett.* 38 (1977), 643—646.

Теорема XIII.8 — классический результат, хотя ее доказательство основывается обычно на тщательном исследовании поведения нулей парциальной волновой функции $u_l(r;\ E)$, а не на принципе минимакса. Идея применения теоремы XIII.8 для получения оценок на $n_l(V)$ и оценки из теоремы XIII.9(a) появилась в работе Баргмана: V. Bargmann, On the number of bound states in a central field of forces.— *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 38 (1952), 961—966. Работа Баргмана была отчасти вызвана теоремой Йоста и Пайса: R. Jost, A. Pias, On the scattering of a particle by a static potential.— *Phys. Rev.* 82 (1951), 840—850, которые доказали, что $N(V)=0$, если $\int r\,|V(r)|\,dr < 1$. Действительно, в силу общих соображений (задача 23) результат Йоста — Пайса ведет к оценке Баргмана. Оценка Калоджеро и теорема XIII.9(d) впервые появились в работе: F. Calogero, Upper and lower limits for the number of bound states in a given central potential.— *Commun. Math. Phys.* 1 (1965), 80—88. Дальнейшее обсуждение см. в книге: F. Calogero, Variable Phase Approach to Potential Scattering.— New York: Academic Press, 1967. Теорема XIII.9(c) восходит к работе: V. Glaser, A. Martin, H. Grösse, W. Thirring, A family of optimal conditions for the absence of bound states in a potential.— Studies in Mathematical Physics: Essays in honor of V. Bargmann (E. Lieb, B. Simon, A. S. Wightman, eds).— Princeton Univ. Press, 1976. В том же томе содержится обзорная статья Саймона: B. Simon, On the number of bound states of two-body Schrödinger operators: A review. Теорема XIII.9(e) и аналогичная оценка $A\lambda^{3/2} < N(\lambda V) < B\lambda^{3/2}$ для больших λ принадлежат Саймону: B. Simon, On the growth of the number of bound states with increase in potential strength.— *J. Math. Phys.* 10 (1969), 1123—1126. Формулы для асимптотического поведения $N(\lambda V)$ обсуждаются в § 15. За ссылками читатель должен обратиться к замечаниям к § 15.

Оценка Бирмана — Швингера была независимо открыта М. Ш. Бирманом (О спектре сингулярных граничных задач.— *Матем. сб.* 55 (1961), 125—174) и Швингером (J. Schwinger, On the bound states of a given potential.— *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 47 (1961), 122—129). Существует множество различных усовершенствований теоремы Бирмана — Швингера. Ссылки можно найти в указанной выше обзорной статье Саймона.

Первые оценки на $N(V)$ при $n \geqslant 3$, обладающие правильным поведением при больших константах связи, были получены Саймоном (B. Simon, Weak trace ideals and the number of bound states of Schrödinger operators.— *Trans.*

Amer. Math. Soc. **224** (1976), 367—380), который доказал, что при $n \geqslant 3$ выполняется оценка $N(V) \leqslant c_{n,\varepsilon}(\|V_-\|_{n/2+\varepsilon} + \|V_-\|_{n/2-\varepsilon})^{n/2}$ с константами $c_{n,\varepsilon}$, расходящимися при $\varepsilon \to 0$. Здесь $\|\cdot\|_p$ есть $L^p(\mathbb{R}^n)$-норма. Независимо и другим методом Мартен (A. Martin, A Bound on the total number of bound states in a potential) доказал, что в трехмерном случае $N(V) \leqslant (2\pi)^{-1} \times \times (\|V_-\|_1 \|V_-\|_2^2)^{1/3}$. Оценки Цвикеля—Либа—Розенблюма, из которых следуют оценки Саймона и Мартена (за исключением возможной величины констант), появились независимо в работах: M. Cwikel, Weak type estimates for singular values and the number of bound states of Schrödinger operators.— *Ann. Math.* **106** (1977), 93—100; E. Lieb, The number of bound states of one-boby Schrödinger operators and the Weyl problem, и Г. В. Розенблюм, Распределение дискретного спектра сингулярных дифференциальных операторов.— *ДАН СССР* **202** (1972), 1012—1015.

Либ также дал новые доказательства оценок на сумму степеней отрицательных собственных значений оператора $-\Delta + V$. Такие оценки ранее доказали Либ и Тирринг; см. задачи 31—33. Оценки Цвикеля—Либа—Розенблюма и Либа—Тирринга особенно интересны в связи с интуитивными представлениями о фазовом пространстве, о которых говорилось в § 15.

Приведенное нами доказательство оценки Цвикеля—Либа—Розенблюма представляет собой принадлежащий Либу простой вариант его доказательства (не опубликовано). Доказательство Цвикеля опирается на теорему XI.22.

Оценки Либа и Тирринга на сумму отрицательных собственных значений оператора $-\Delta + V$, которые доказаны с помощью оценок Бирмана—Швингера на $N_E(V)$, особенно интересны, поскольку они представляют собой важную часть простого доказательства «стабильности вещества»; см. E. Lieb, W. Thirring, Bound for the kinetic energy of fermions which proves the stability of matter.— *Phys. Rev. Lett.* 35 (1975), 687—689.

§ XIII.4. Г. Вейль в работе: H. Weyl, Über beschränkte quadratische Formen, deren Differenz vollstetig ist.— *Rend. Circ. Mat. Palermo* **27** (1909), 373—392, доказал теорему, которая в современной терминологии есть теорема XIII.14 в случае, когда A и B—ограниченные самосопряженные операторы с компактной разностью $A-B$. Для несамосопряженных операторов существует много разных определений существенного спектра и формулировок теоремы Вейля. Например, на стр. 304—307 книги Т. Като, Теория возмущений линейных операторов.— М.: Мир, 1972, обсуждается такое определение $\sigma_{\text{ess}}(A)$, что $\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ess}}(B)$, когда разность $A-B$ компактна. Если B — оператор из примера 1, то по определению Като $\sigma_{\text{ess}}(B)$ есть единичная окружность $\{z \mid |z| = 1\}$, в то время как по нашему определению—единичный круг $\{z \mid |z| \leqslant 1\}$. В качестве введения в литературу по различным типам существенных спектров укажем работу: K. Gustafson, Necessary and sufficient conditions for Weyl's theorem.— *Michigan Math. J.* **19** (1972), 71—81.

Мероморфная теорема Фредгольма в своей полной общности появилась в работе: M. Ribaric, I. Vidav, Analytic properties of the inverse $A(z)^{-1}$ of an analytic linear operator-valued function $A(z)$.— *Arch. Rat. Mech. Anal.* **32** (1969), 298—310. В этой работе теорема доказана для операторов на произвольном банаховом пространстве.

Следствие 3 теоремы XIII.14—сочетание результатов Шехтера (M. Schechter, On the essential spectrum of an arbitrary operator, I.— *J. Math. Anal. Appl.* **13** (1966), 205—215), который провел доказательство для случая $n=2$, и Густафсона—Вейдмана (K. Gustafson, J. Weidmann, On the essential spectrum.— *J. Math. Anal. Appl.* **25** (1969), 121—127). Другое «прямое» доказательство имеется в работе: J. Weidmann, Spectral theory of partial differential operators. In: Spectral Theory and Differential Equations (W. N. Everitt, ed.).— Lecture Notes in Mathematics, № 448, Berlin and New York: Springer-Verlag, 1974.

Результаты, связанные со следствием 4 теоремы XIII.14, а также обобщения заложенных в нем идей, позволяющие включить операторы A, не ограниченные снизу, можно найти в работе: G. Nenciu, Self-adjointness and invariance of the essential spectrum for Dirac operators defined as quadratic forms.— *Commun. Math. Phys.* 48 (1976), 235—247.

Дальнейшее обсуждение существенного спектра одночастичных операторов Шредингера см. в задаче 41 и в работах: E. Balslev, The singular spectrum of elliptic differential operators in $L^p(\mathbb{R}^n)$.— *Math. Scand.* **19** (1966), 193—210; P. Rejto, On the essential spectrum of the hydrogen energy and related operators.— *Pacific J. Math.* **19** (1966), 109—140, а также в книге: M. Schechter, Spectra of Partial Differential Operators.— Amsterdam: North Holland, 1972.

Идеи, лежащие в основе примера 8, взяты из статьи: J. E. Avron, I. W. Herbst, Spectral and scattering theory of Schrödinger operators related to the Stark effect.— *Commun. Math. Phys.* 52 (1977), 239—254. В одномерном случае, когда можно воспользоваться теорией обыкновенных дифференциальных уравнений, удалось доказать, что $\sigma(-d^2/dx^2+W)=(-\infty,\ \infty)$ для класса потенциалов W, более общих, чем те, которые имеют вид $x+V$, где V — короткодействующий потенциал. См., например: Э. Ч. Титчмарш, Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка.— М.: ИЛ, 1960—1961; K. Kodaira, The eigenvalue problem for ordinary differential equations of second order and Heisenberg's theory of S-matrices.— *Amer. J. Math.* **71** (1949), 921—945; J. Weidmann, Zur Spetraltheorie von Sturm—Liouville Operatoren.— *Math. Z.* **98** (1967), 286—302; М. А. Наймарк, *Линейные дифференциальные операторы*.— М.: Наука, 1969; J. Walter, Absolute continuity of the essential spectrum of $-d^2/dx^2+q(x)$ without monotony of q.— *Math. Z.* **129** (1972), 83—94; P. Rejto, On a theorem of Titchmarsh—Neumark—Walter concerning absolutely continuous operators, I, II.— *Lett. Math. Phys.* **1** (1975), 49—56, 57—66.

Круг идей, связанных с теоремами XIII.16.1 и XIII.16.2, восходит к работам Вейля и фон Неймана: H. Weyl, Über Beschränkte quadratischen Formen deren Differenz vollstetig ist.— *Rend. Circ. Math. Palermo* **27** (1909), 373—392; J. von Neumann, Charakterisierung des Spectrums eines Integraloperators.— *Acta Sci. Ind.* № **229** (1935), 38—55. Приведенные нами доказательства не обобщаются на случай нормальных операторов, поскольку, даже если оператор A и нормален, оператор $PAP+(1-P)A(1-P)$ не обязан обладать этим свойством. Тем не менее сами теоремы обобщаются на случай нормальных операторов — это теорема Берга и Сиконии (I. D. Berg, An extension of the Weyl—von Neumann Theorem to normal operators.— *Trans. Amer. Math. Soc.* **160** (1971), 365—371; W. Sikonia, The von Neumann Converse of Weyl's Theorem.— *Ind. Math. J.* **20** (1970), 529—544). Войклеску доказал следующий эффектный результат, обобщающий теорему Вейля—фон Неймана. Пусть π — представление *сепарабельной* C^*-алгебры A. Тогда существует другое представление π' в том же гильбертовом пространстве, такое, что разность $\pi(x)-\pi'(x)$ компактна для каждого $x\in A$ и π' — прямая *сумма* неприводимых представлений (так что если работать по модулю компактных операторов, то прямые интегралы не нужны).

Классификация нормальных операторов по модулю компактных была обобщена на «в существенном нормальные» операторы (т. е. такие A, для которых компактен оператор AA^*-A^*A) Брауном, Дугласом и Филмором в работах: L. Brown, R. Douglas, P. Filmore, Unitary Equivalence Modulo the Compact Operators and Extensions of C^*-Algebras.— In: Proceedings of a Conference on Operator Theory. Springer Notes in Mathematics, 345. 1973, pp. 58—128; Extensions of C^*-Algebras and K-homology.— *Ann. Math.* **105** (1977), 265—324. Их доказательства существенно опираются на идеи, заимствованные из гомологической алгебры и алгебраической топологии!

Теорема XIII.16.2 без большого труда обобщается на неограниченые самосопряженные операторы. Теорема XIII.16.1 для неограниченных операторов неверна, однако если в ее утверждении равенство $U(A+C)U^{-1}=B$

заменить на $U((A+i)^{-1}+C)U^{-1}=(B+i)^{-1}$, то результат справедлив; действительно, это следует из указанного выше случая нормальных операторов.

§ XIII.5. Теорема ХВЖ названа так в честь Хунцикера, ван Винтера и Г. М. Жислина за результаты, содержащиеся в следующих фундаментальных статьях: W. Hunziker, On the spectra of Schrödinger multiparticle Hamiltonians.— *Helv. Phys. Acta* **39** (1966), 451—462; C. Van Winter, Theory of finite systems of particles, I.— *Mat.-Fys. Skr. Danske Vid. Selsk.* **1** (1964), 1—60, и Г. М. Жислин, Исследование спектра оператора Шредингера для системы многих частиц.— *Тр. Моск. матем. об-ва* **9** (1960), 81—128. Жислин доказал, что для ограниченного класса систем, включающего гамильтонианы атомов, $\sigma_{ess}=[\Sigma, \infty)$. Его метод далее рассматривался в работах: K. Jörgens, Zur Spektraltheorie der Schrödinger Operatoren.— *Math. Z.* **96** (1967), 355—372; K. Jörgens, J. Weidmann, Spectral Properties of Hamiltonian Operators.— Lecture Notes in Mathematics, № 319. Berlin and New York: Springer-Verlag, 1973. Ван Винтер исходил из уравнений Вайнберга—ван Винтера и (неявно) доказал теорему ХВЖ в случае $V\in L^2$ с помощью теории интегральных уравнений с ядрами Гильберта—Шмидта. Хунцикер дал доказательство для случая $L^2+(L^\infty)_\varepsilon$ независимо от работы ван Винтера. Случай потенциала Рольника впервые был рассмотрен в монографии Саймона: B. Simon, Quantum Mechanics for Hamiltonians Defined as Quadratic Forms.— Princeton Univ. Press, 1972.

Уравнения Вайнберга—ван Винтера (в форме (24), а не (29)) и обобщение на N-частичные системы появились в указанной выше работе ван Винтера и независимо в работе: S. Weinberg, Systematic solution of multiparticle scattering problems.— *Phys. Rev.* **133** (1964), 232—256. Вайнберг доказал компактность $I(E)$ только для трехчастичных систем. Компактность для произвольного N (при $V\in L^2$) доказана в той же работе ван Винтера и независимо в работе: W. Hunziker, Proof of a conjecture of S. Weinberg.— *Phys. Rev.* **135B** (1964), 800—803. Наше доказательство этого факта (лемма 4B), и в частности обращение к лемме 5, взято из монографии Саймона (см. выше). В той же монографии введена и симметризованная версия уравнений (29), которая необходима, если $V_{ij}\in R\setminus L^2$.

Другой набор уравнений для резольвенты, также с компактным ядром,— это уравнения Фаддеева—Якубовского, которые для $N=3$ выведены в работе Л. Д. Фаддеева, Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех частиц.— *Тр. МИАН СССР* **69** (1963), а для произвольного N—в работе О. А. Якубовского, Об интегральных уравнениях в теории N-частичного рассеяния.— *ЯФ* **5** (1967), 937—942. Уравнения Фаддеева—Якубовского существенно сложнее, чем уравнения Вайнберга—ван Винтера, однако они не могут иметь «ложных нулей» типа описанных ниже. Это делает их более полезными в теории рассеяния. Еще один набор уравнений (также без ложных нулей) содержится в работе Ньютона: R. G. Newton, Equations with connected kernels for N-particle T-operators.— *J. Math. Phys.* **8** (1967), 851—856.

При доказательстве теоремы ХВЖ мы видели, что $\sigma_{disc}(H)\subset\{z \mid$ оператор $1-I_R(z)$ необратим$\}$. Действительно, если $H\psi=E\psi$, то $I_R(E)[(H_0-E)^{1/2}\psi]=(H_0-E)^{1/2}\psi$. Однако может случиться, что оператор $1-I_R(E)$ необратим для некоторого $E\in\rho(H)$. Впервые это было отмечено Федербушем (P. Federbush, Existence of spurious solutions to many body Bethe—Salpeter equations.— *Phys. Rev.* **148** (1966), 1551—1552) и далее исследовано Ньютоном (R. Newton, Spurious solutions of three particle equations.— *Phys. Rev.* **153** (1967), 1502). Такие значения E называются «ложными нулями». Причина такого названия в том, что для того, чтобы оператор $(1-I_R(E))^{-1}$ имел полюс, а резольвента $R(E)=(1-I_R(E))^{-1}D_R(E)$ его не имела, операторы $D_R(E)$ и $1-I_R(E)$ должны иметь компенсирующие «нули». Эти нули оператора $1-I_R(E)$ (или, точнее, определителя Фредгольма $\det(1-I_R(E))$) могут и не попадать на собственные значения.

Второе из приведенных нами доказательств теоремы XIII.17 восходит к первоначальному доказательству Жислина и одному варианту доказательства Энса (V. Enss, A Note on Hunziker's Theorem.— *Commun. Math. Phys.* 52 (1977), 233—238). Наше изложение следует работе Саймона: B. Simon, Geometric methods in multiparticle quantum systems.— *Commun. Math. Phys.* 55 (1977), 259—274. Одно из технических упрощений по сравнению с построением Жислина, Йоргенса и Вейдмана, а также Энса состоит в применении теоремы XIII.77 (лемма 7 из этого раздела) вместо критерия Вейля.

Теоремы типа XIII.17′, основанные на теореме ХВЖ при сужении на подпространства с определенными симметриями, рассматривались в работах Жислина — Сигалова, Балслева и Саймона, указанных в замечаниях к § 3, в монографии Йоргенса и Вейдмана, указанной выше, и в только что упомянутой работе Саймона.

§ XIII.6. Наше изложение того, что мы называем теорией Ароншайна — Доногью, следует работе: W. F. Donoghue, On the perturbation of spectra.— *Comm. Pure Appl. Math.* 18 (1965), 559—579, в которой автор отметил, что его результаты в существенном содержатся в работе Ароншайна: N. Aronszajn, On a problem of Weyl.— *Amer. J. Math.* 79 (1957), 597—610. Д. Пирсон нашел такое $V\in C^\infty$ с условием $DV\to 0$ на $\pm\infty$, что $-D^2+V$ обладает только сингулярным спектром.

§ XIII.7. Теория гладких операторов построена Като в двух замечательных статьях: T. Kato, Wave operators and similarity for some non-self-adjoint operators.— *Math. Ann.* 162 (1966), 258—279; Smooth operators and commutators.— *Studia Math.* 31 (1968), 535—546. В первой статье Като ввел понятие H-гладкости и доказал теоремы XIII.22 (в более сильной форме; см. задачу 49), XIII.23 (неявно), XIII.24, XIII.25, XIII.26 (в более сильной форме; см. задачи 53, 54 и дальнейшее обсуждение) и XIII.27 (в случае $N=2$). Вторая статья Като содержит критерий H-гладкости, если H ограничен (в случае, когда H имеет простой спектр, это критерий из примера 4 и задачи 50), и доказательство теоремы Путнама — Като (теоремы XIII.28). Наши доказательства этих результатов следуют рассуждениям Като.

То, что мы называем теоремой Като о гладкости, появилось в более сильной форме в его статье в *Math. Ann.* Во-первых, он доказывает, что $H_0+\lambda V$ и H_0 подобны, т. е. $W(H_0+\lambda V)W^{-1}=H_0$ для обратимого ограниченного оператора W даже при комплексном λ. Его доказательство основано на стационарной формулировке теории рассеяния. Во-вторых, ни H_0, ни V не обязаны быть самосопряженными. Важно лишь, чтобы $\sigma(H_0)\subset\mathbb{R}$ и чтобы $|V|^{1/2}$ был H_0-гладким и H_0^*-гладким в смысле основного определения (а не в смысле эквивалентных формулировок из теоремы XIII.25), а также чтобы $\sup_{\mu\notin\mathbb{R}}\||V|^{1/2}(H_0-\mu)^{-1}|V|^{1/2}\|<\infty$.

Результаты о слабом взаимодействии, доказывающие, что операторы $-\Delta$ и $-\Delta+W$ унитарно эквивалентны для подходящего класса малых V, появились впервые в работе Шварца: J. Schwartz, Some non-self adjoint operators.— *Comm. Pure Appl. Math.* 13 (1960), 609—639. Шварц рассмотрел (редуцированный) двухчастичный случай в $\mathbb{R}^m$ при $m\geq 3$ и доказал, что если $\int(1+x^2)|D^\alpha V|\,dx<\infty$ для всех $\alpha\leq m-1$, то $-\Delta$ и $-\Delta+\lambda V$ унитарно эквивалентны для малых λ.

Применяя ряд Дайсона (см. § X.12), Проссер доказал теорему о слабом взаимодействии в двухчастичном случае: R. Prosser, Convergent perturbation expansions for certain wave operators.— *J. Math. Phys.* 5 (1964), 708—713. Като доказал теорему XIII.27 в случае $N=2$ в своей работе в *Math. Ann.*, в частности, он применял формулу (43). Доказательства Проссера и Като основаны на применении рядов

$$\Omega^- = 1 + i\int_0^\infty V_{s_1}\,ds_1 + i^2\int_0^\infty\int_0^{s_1} V_{s_2}V_{s_1}\,ds_2\,ds_1 + \dots$$

для $\Omega^-\varphi$, где $V_s = e^{iH_0s}Ve^{-iH_0s}$, и следующей формулы для нормы:

$$\|V_{s_1}V_{s_2}\dots V_{s_n}\varphi\| = \||V|^{1/2}\|\cdot\||V|^{1/2}e^{i(s_2-s_1)H_0}|V|^{1/2}\|\dots\||V|^{1/2}e^{-is_nH_0}\varphi\|.$$

Результаты, относящиеся к малым константам связи, для трехчастичных задач были доказаны Хунцикером в его лекциях (Boulder Lectures; см. замечания к § XI.5), где он воспользовался техникой Проссера. Он отметил, что эта техника не работает для N-частичных систем при $N \geqslant 4$, поскольку норма $\||V_{ij}|^{1/2}e^{isH_0}|V_{kl}|^{1/2}\|$ постоянна, если все i, j, k, l различны. Идея следить за поведением $\int |V_{ij}|^{1/2}e^{isH_0}|V_{kl}|^{1/2}ds$, которая проявляется как «случай (3)» в нашем доказательстве теоремы XIII.27, а следовательно, и N-частичные результаты при $N \geqslant 4$ восходят к работе: R. Iorio, M. O'Carroll, Asymptotic completeness for multi-particle Schrödinger Hamiltonians with weak potentials.— *Commun. Math. Phys.* 27 (1972), 137—145. Справедливость утверждения теоремы XIII.27 для $V_{ij} \in L^{m/2}$ остается недоказанным предположением.

Теорема о том, что H обладает только абсолютно непрерывным спектром, если существует такой оператор A, что $i[H, A] \geqslant 0$, появилась впервые в книге Путнама: C. R. Putnam, Commutation Properties of Hilbert Space Operators and Related Topics.— Berlin and New York: Springer-Verlag, 1967. Приводимое нами доказательство взято из статьи Като в *Studia*.

Приложение теории Като—Путнама к потенциалам отталкивания впервые рассмотрено в работе Лавина: R. Lavine, Absolute continuity of Hamiltonian operators with repulsive potentials.— *Proc. Amer. Math. Soc.* **22** (1969), 55—60. Теория была продвинута существенно дальше (в частности, появились теоремы XIII.29 и XIII.32) в работе: R. Lavine, Commutators and scattering theory, I. Repulsive interactions.— *Commun. Math. Phys.* 20 (1971), 301—323. Теорема XIII.29 приведена там в несколько более слабой форме (при дополнительном условии, что $r\,\partial V/\partial r \leqslant H_0$). Для потенциалов отталкивания, центрально-симметричных потенциалов и потенциалов порядка $O(r^{-1-\varepsilon})$ Лавин доказал аналог теоремы XIII.32 в работе: R. Lavine, Completeness of the wave operators in the repulsive N-body problem.— *J. Math. Phys.* **14** (1973), 376—379. Дальнейшее рассмотрение двухчастичного случая отталкивания можно найти в работе: M. Arai, Absolute continuity of Hamiltonian operators with repulsive potentials.— *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* 7 (1971/72), 621—635. Наше доказательство того, что $i[A, H_0] \geqslant 0$, следует этой статье.

Теорема XIII.31 и понятие H-гладкости на Ω взято из статьи: R. Lavine, Commutators and scattering theory, II. A class of one-body problems.— *Indiana Univ. Math. J.* 21 (1972), 643—656.

Теория гладких возмущений была применена Девисом к проблеме существования пропагаторов и теории рассеяния (E. B. Davies, Time dependent scattering theory.— *Math. Ann.* 210 (1974), 149—162), а затем переложена на язык банаховых пространств Эвансом (D. E. Evans, Smooth perturbations in non-reflexive Banach spaces.— *Math. Ann.* **221** (1976), 183—194).

§ XIII.8. Теорема XIII.33 принадлежит Агмону. Он анонсировал свои результаты в докладе: S. Agmon, Spectral properties of Schrödinger operators.— *Proc. Int. Cong. Math.*, v. 2, pp. 679—684, Paris: Gauthier-Villars, 1971. Детали появились в работе: S. Agmon, Spectral properties of Schrödinger operators

and scattering theory.— *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa II*, 2 (1975), 151—218. Наш подход основан на серии лекций Агмона вместе с полезными замечаниями Эпстейна, Жинибра и Лавина. Теорема XIII.33 (d) была доказана до Агмона в работе: T. Kato, S. Kuroda, Theory of simple scattering and eigenfunctions expansions. In: Functional Analysis and Related Fields.— Berlin and New York: Springer-Verlag, 1970, pp. 99—131. То, что (d) следует из априорных оценок Агмона и теории локальной гладкости,— замечание Лавина в указанной ниже работе.

Работа Агмона представляет собой кульминацию нескольких направлений развития. Первое включает доказательство того, что $\sigma_{\text{sing}}(-\Delta+V)=\varnothing$, когда V есть $O(|x|^{-\mu})$ на ∞ (в некоторых из перечисленных ниже статей требуются дополнительные условия гладкости). Наиболее ранние результаты, относящиеся к $\mu>2$, содержатся в работе Икэбэ, указанной в замечаниях к § XI.6. Они были успешно улучшены: до $\mu>3/2$ Егером (W. Jäger, Zur Theorie der Schwingungsgleichung mit variablen Koeffizienten in Aussengebieten.— *Math. Z.* **102** (1967), 62—88), до $\mu>4/3$ Рейто (P. Rejto, On partly gentle perturbations, III.— *J. Math. Anal. Appl.* **27** (1969), 21—67), до $\mu>5/4$ Като (T. Kato, Some results on potential scattering.— *Proc. Int. Conf. on Functional Analysis and Related Topics.*— Tokyo, 1969, pp. 206—215), до $\mu>6/5$ Рейто (P. Rejto, Some potential perturbations of the Laplacian.— *Helv. Phys. Acta* **44** (1971), 708—736) и Куродой (статья указана ниже). Как Рейто, так и Курода модифицировали свои методы в соответствии с процедурой бутстрапа Агмона и оказались в состоянии включить все $\mu>1$. Вскоре после Агмона и независимо от него случай $\mu>1$ был разобран Саито (Y. Saito, The principle of limiting absorption for second-order differential equations with operator-valued coefficients.— *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **7** (1972), 581—619).

Второе направление развития включило в себя идею доказательства, что $\sigma_{\text{sing}}=\varnothing$, при помощи теории возмущений для отображений из X в X^*, где X—банахово пространство, вложенное в $\mathscr{H}$. Мы обсуждаем такую идею в дополнении к § XI.6. Она была развита Хаулендом (J. S. Howland, Banach space techniques in the perturbation theory of self-adjoint operators with continuous spectra.— *J. Math. Anal. Appl.* **20** (1967), 22—47; A perturbation-theoretic approach to eigenfunction expansions.— *J. Funct. Anal.* **2** (1968), 1—23), а также Рейто (P. A. Rejto, On partly gentle perturbations, I—III.— *J. Math. Anal. Appl.* **17** (1967), 435—462; **20** (1967), 145—187; **27** (1969), 21—67). Применение пространств L^2 с весом впервые было обосновано (в несколько другом контексте) Куродой (S. Kuroda, On the Hölder continuity of an integral involving Bessel functions.— *Quart. J. Math. Oxford Ser.* **21** (1970), 71—81).

Третье направление развития содержит в себе абстрактную теорию Куроды разложений по собственным функциям (см. замечания к § XI.6) и теорию эллиптических операторов высшего порядка. Фактически теория Агмона применима для широкого класса операторов (см. задачу 70 и ниже). Теория с аналогичными результатами была развита (отчасти независимо от Агмона) Куродой (S. Kuroda, Scattering theory for differential operators, I, II.— *J. Math. Soc. Japan* **25** (1973), 75—104; 222—234). Пусть $H_0=\sum\limits_{|\alpha|\leqslant 2m} a_\alpha(-iD)^\alpha$, где a_α вещественны. Предположим далее, что H_0 **эллиптичен**, т. е. $\sum\limits_{|\alpha|=2m} a_\alpha k^\alpha\neq 0$ для всех $k\in\mathbb{R}^n$, $k\neq 0$. Пусть $P_1(k)=\sum\limits_{|\alpha|\leqslant 2m} a_\alpha k^\alpha$. Точка k, где $\operatorname{grad} P_1=0$, называется критической точкой, а значение P_1 в такой точке называется критическим значением. Можно показать, что H_0 имеет лишь конечное число критических значений λ_i. Пусть $V=\sum\limits_{|\alpha|\leqslant 2m} V_\alpha(x)\,(-iD)^\alpha$ таков, что (i) $|V_\alpha(x)|\leqslant C_\alpha(1+|x|^2)^{-1/2-\varepsilon}$; (ii) V формально самосопряжен, т. е. $(\varphi, V\varphi)$ вещественно для всех $\varphi\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$; (iii) для всех

$x \in \mathbb{R}^n$ и $k \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ сумма $\sum_{|\alpha|=2m} (a_\alpha + V_\alpha(x)) k^\alpha \neq 0$. При этих условиях Агмон и Курода доказали следующее обобщение теоремы XIII.33:

(a) Собственные значения H_0+V при некритических значениях H_0 обладают конечной кратностью и могут иметь в качестве предельных точек лишь критические значения H_0.

(b) Если отрезок $[a, b]$ не содержит ни критических значений H_0, ни собственных значений $H = H_0+V$ и если $\delta > 1/2$, то

$$\sup_{a \leqslant x \leqslant b,\ 0 < y < 1} \|(H - x - iy)^{-1}\|_{\delta, -\delta} < \infty.$$

(c) $\sigma_{\text{sing}}(H_0+V) = \varnothing$.

(d) Волновые операторы существуют и полны.

Обобщение работы Агмона — Куроды на несколько более широкий класс потенциалов можно найти в работе Агмона и Хёрмандера: S. Agmon, L. Hörmander, Asymptotic properties of solutions of differential equations with simple characteristics.— *J. Anal. Math.* **30** (1976), 1—38. Эти авторы пользуются слегка отличными пространствами, которые им представляются более естественными.

В своей исходной работе Агмон не доказывает и не использует существования предельных граничных значений для $(H_0-\lambda)^{-1}$ или $(H-\lambda)^{-1}$. Вместо лемм 6 и 7 он пользовался предельной процедурой, известной под названием «принципа предельного поглощения». Квадратичные оценки леммы 6 восходят к Лавину.

Теорема XIII.33 допускает обобщение еще в двух направлениях. Во-первых, достаточно, чтобы V был компактен в смысле форм (см. задачу 71). Во-вторых, можно рассматривать случай $V = V_1 + V_2$, где $\partial V_1/\partial r$ и V_2 суть $O(r^{1-\varepsilon})$ на ∞. Это сделано Лавином (R. Lavine, Absolute continuity of positive spectrum for Schrödinger operators with long range potentials.— *J. Funct. Anal.* **12** (1973), 30—54). См. также работу Икэбэ и Саито (T. Ikebe, Y. Saito, The limiting absorbtion method and absolute continuity for the Schrödinger operator.— *J. Math. Kyoto* **12** (1972), 513—542) и Саито (Y. Saito, The principle of limiting absorbtion for the non-self-adjoint Schrödinger operator in $\mathbb{R}^n$ $(N \neq 2)$).— *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **9** (1974), 397—428.

Дальнейшему развитию теории Агмона — Куроды посвящена серия работ Шехтера: M. Schechter, A unified approach to scattering.— *J. Math. Pures Appl.* **53** (1974), 373—396; Scattering theory for elliptic operators of arbitrary order.— *Comm. Math. Helv.* 49 (1974), 84—113; Scattering theory for second order elliptic operators.— *Ann. Mat. Pura et Appl.* **55** (1975), 313—331; Scattering Theory for Elliptic Systems.— *J. Math. Soc. Japan* **28** (1976), 71—79; Nonhomogeneous elliptic systems and scattering.— *Tohoku Math. J.* **27** (1975), 601—616.

Метод Агмона был расширен для исследования гамильтонианов вида $-\Delta + V + \mathbf{a}\cdot\mathbf{x}$ Хербстом (I. W. Herbst, Unitary equivalence of Stark Hamiltonians.—*Math. Z.* **155** (1977), 55—71). Хербст доказывает, что если $V = V_1 + V_2$, где $V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ и имеет компактный носитель, V_1 удовлетворяет неравенству $|V_1(x)| \leqslant C(1+(\mathbf{a}\cdot\mathbf{x})^2)^{-1/4-\varepsilon}$, а оператор $-\Delta + V + \mathbf{a}\cdot\mathbf{x}$ не имеет собственных значений, то волновые операторы $\Omega^\pm(-\Delta + V + \mathbf{a}\cdot\mathbf{x}, -\Delta + \mathbf{a}\cdot\mathbf{x})$ существуют и унитарны. Аврон и Хербст в своей статье, указанной в замечаниях к § 4, дают критерии, при выполнении которых оператор $-\Delta + V + \mathbf{a}\cdot\mathbf{x}$ не имеет собственных значений.

§ XIII.9. Теория коммутативных банаховых алгебр рассматривается в гл. XV. Элементарные сведения, использованные в этом разделе, можно найти также в книге И. М. Гельфанда, Д. А. Райкова, Г. Е. Шилова, Коммутативные

нормированные кольца.— М.: Физматгиз, 1960, или в книге У. Рудина, Функциональный анализ.— М.: Мир, 1975, а также во многих других местах.

Теорема XIII.34 была доказана Брауном и Пирси в работе: A. Brown, C. Pearcy, Spectra of tensor products of operators.— *Proc. Amer. Math. Soc.* 17 (1966), 162—166. Шехтер обобщил результат Брауна—Пирси (M. Schechter, On the spectra of operators on tensor products.— *J. Funct. Anal.* 4 (1969), 95—99), доказав, что

$$\sigma(P(A \otimes I,\ I \otimes B)) = P(\sigma(A),\ \sigma(B)),$$

где A и B—ограниченные операторы, а P—полином по двум переменным. В частности, Шехтер ввел в употребление вторые коммутанты алгебр. Впоследствии эта теорема об отображении спектров была обобщена на класс рациональных функций двух переменных, аналитических в окрестности $\sigma(A) \times \sigma(B)$, в работе: A. Dash, M. Schechter, Tensor products and joint spectra.— *Israel J. Math.* 8 (1970), 191—193.

Лемма Итиносэ и ее обобщения появились в работах: T. Ichinose, On the spectra of tensor products of linear operators on Banach spaces.— *J. Reine Angew. Math.* 244 (1970), 119—153; Operators on tensor products of Banach spaces.— *Trans. Amer. Math. Soc.* 170 (1972), 197—219; см. также Operational calculus for tensor products of linear operators on Banach spaces.— *Hokkaido Math. J.* 4 (1975), 306—334. Рид и Саймон доказали теорему об отображении спектров для широкого класса неограниченных функций неограниченных операторов $A \otimes I$, $I \otimes B$ в работе: M. Reed, B. Simon, Tensor products of closed operators on Banach spaces.— *J. Funct. Anal.* 13 (1973), 107—124. Теорема XIII.35—частный случай работы Итиносэ и работы Рида—Саймона. Доказательство, приведенное в § 9,— новое и гораздо более простое, чем доказательство в этих статьях, но, поскольку в нем используется специальное свойство, что $e^{-t(A+B)} = e^{-tA} \otimes e^{-tB}$, его нельзя применить к доказательству теоремы о спектральном отображении для более общих функций от A и B.

§ XIII.10. Существует связь между теорией потенциалов, аналитичных относительно растяжений, и методами, примененными в § XI.8 для обсуждения аналитичности амплитуды парциальной волны для обобщенных потенциалов Юкавы. Этот последний круг идей рассматривался в N-частичной постановке в работе: C. Lovelace, Three particle systems and unstable particles. In: Strong Interactions and High Energy Physics (R. C. Moorehouse, ed.).— London: Oliver and Boyd, 1964, за несколько лет до создания аналитических методов теории масштабных преобразований, однако связь между этими двумя подходами была оценена по достоинству существенно позже.

Идею применения растяжений и теории возмущений дискретного спектра, чтобы следить за сингулярным спектром, впервые осуществил Комб в неопубликованной работе: J. M. Combes, An algebraic approach to quantum scattering. Далее эта идея была развита Агиляром и Комбом в двухчастичном случае (J. Aguilar, J. M. Combes, A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians.— *Commun. Math. Phys.* 22 (1971), 269—279), а в N-частичном случае—Балслевом и Комбом (E. Balslev, J. M. Combes, Spectral properties of many-body Schrödinger operators with dilatation analytic interactions.— *Commun. Math. Phys.* 22 (1971), 280—294). В обеих этих статьях рассматривался класс C_α (см. задачу 73), а не $\mathcal{F}_\alpha$, но с точностью до этого обстоятельства теоремы XIII.36 и XIII.37 появились соответственно в первой и во второй статьях.

Несколько лет спустя, ничего не зная о работе Балслева—Комба, ван Винтер доказал аналогичные теоремы родственным методом в работе: C. Van Winter, Complex dynamical variables for multiparticle systems with analytic interactions, I, II.— *J. Math. Anal. Appl.* 47 (1974), 633—670; 48 (1974), 368—399. Из работы ван Винтера, в основе которой лежат некоторые пространства аналитических функций, особая роль группы масштабных преобразований не видна.

Поскольку Итиносэ сформулировал свою теорему в терминах оценок резольвент операторов, а не в терминах секториальных операторов или голоморфных полугрупп, то в и работе Балслева и Комба оценка N-частичных резольвент доказана посредством трудной индукции вместо прямого обращения к секториальности. Класс $\mathcal{F}_\alpha$ был введен Саймоном в работе: B. Simon, Quadratic form techniques and the Balslev—Combes theorem.— *Commun. Math. Phys.* **27** (1972), 1—9. После этой статьи стало ясно, что методы секториальных операторов позволяют сделать упрощения в доказательствах, а также устранить ограничение $|\operatorname{Im}\theta| < \pi/2$, которое было наложено Балслевом и Комбом, так как они опирались непосредственно на лемму Итиносэ в ее исходной форме.

Техника аналитичности по растяжениям и, вообще, техника продолжения по групповому параметру играет роль при изучении многих свойств N-частичных гамильтонианов, а отнюдь не только в выделении непрерывного спектра. В частности, она важна в теории резонансов (§ XII.6), в доказательстве экспоненциального убывания собственных функций (§ 11) и при исключении положительных собственных значений (§ 13).

§ XIII.11. Непрерывность по Гёльдеру векторов из $C^\infty(H)$ для подходящих N-частичных гамильтонианов впервые доказал Като в работе: T. Kato, On the eigenfunctions of many-particle systems in quantum mechanics.— *Comm. Pure Appl. Math.* **10** (1957), 151—171. Условия Като на потенциалы слегка отличаются от $M_\sigma^{(3)}$, а именно, он предполагает, что $V = V_1 + V_2$, где $V_2 \in L^\infty$ и $V_1 \in L^\sigma$, причем $\operatorname{supp} V_1$ компактен. Доказательство Като проводится в x-пространстве и более сложно, чем наше доказательство теоремы XIII.38, однако оно содержит основную идею построения: «бутстрап» по L^p. Идея применить технику p-пространства принадлежит Саймону: B. Simon, Pointwise bounds on eigenfunctions and wave packets in N-body quantum systems, I.— *Proc. Amer. Math. Soc.* **42** (1974), 395—401.

В указанной выше статье Като получил также результат об особенностях атомных волновых функций ψ, более тонкий, чем теорема XIII.38. Из этой теоремы следует лишь, что ψ равномерно непрерывна по Гёльдеру порядка θ для любого $\theta < 1$. Като показывает, что $\sup\limits_{x \notin C} |\operatorname{grad}\psi(x)| < \infty$, где C — множество точек, в которых определенная разность координат обращается в 0, и, в частности, ψ непрерывно по Липшицу. Более того, скачки $\operatorname{grad}\psi$ в соответствующих точках вычислены явно через значения ψ в этих точках.

Точные результаты теорем XIII.39—XIII.42 взяты из серии статей, появившихся в виде препринтов осенью 1972 г. Теоремы XIII.39 и XIII.40 появились в работе О'Коннора: A. O'Connor, Exponential decay of bound state wave functions.— *Commun. Math. Phys.* **32** (1973), 319—340. Доказательство О'Коннора основано на идеях Пэли—Винера и использует уравнения Вайнберга—ван Винтера; это доказательство идейно просто, но учет кинематики довольно сложен. Приводимое нами доказательство восходит к доказательству Комба и Томаса: J. Combes, L. Thomas, Asymptotic behaviour of eigenfunctions for multiparticle Schrödinger operators.— *Commun. Math. Phys.* 34 (1973), 251—270. Комб и Томас, которых стимулировала работа О'Коннора, заметили, что эти идеи можно применить к исследованию непороговых собственных значений систем, аналитичных относительно растяжений. Их результаты сформулированы в терминах группы, порождаемой растяжениями и трансляциями в p-пространстве.

Теорема XIII.42 появилась в работе Саймона, указанной в начале замечаний к этому разделу. Несколько ранее Альрихс (R. Ahlrichs, Asymptotic behavior of atomic bound state wave functions.— *J. Math. Phys.* 14 (1973), 1860—1863) заметил, что из равномерной непрерывности по Гёльдеру и экспоненциального убывания в смысле L^2 следует поточечное экспоненциальное убывание, но, возможно, с меньшей скоростью. Работа Саймона была мотивирована работой Альрихса и О'Коннора.

Теорема XIII.41 имеет более точную формулировку, аналогичную теореме XIII.40. Например, можно доказать следующее (см. статью Комба — Томаса). Если каждый потенциал V_{ij} принадлежит $\mathcal{F}_\alpha$ с $\alpha > \pi/4$ и если $\Sigma(i\pi/4)$ — множество порогов для $H(i\pi/4)$, то $\psi \in D(e^{ar})$, когда $H\psi = E\psi$ и

$$a^2 < 2M \inf_{E_\alpha \in \Sigma(i\pi/4)} \{|E - \operatorname{Re} E_\alpha| + |\operatorname{Im} E_\alpha|\}.$$

Морган (J. D. Morgan, III, The exponential decay of sub-continuum wave functions of two electron atoms.— *J. Phys. A*. **10** (1977), L 91) отметил, что оценки теорем XIII.39—42 не могут быть лучшими из возможных, поскольку ожидается, что асимптотически $\psi(r)$ должна удовлетворять $H_0\psi = E\psi$, когда все $r_i - r_j \to \infty$, так что следовало бы ожидать, что $\psi(r) \sim \exp\left(-\sum a_i |r_i|\right)$ для некоторых a_i, причем $\sum a_i^2/2m_i = -E$. Он уточнил оценки для некоторых трехчастичных систем. В работе Дейфта, Хунцикера, Саймона и Вока (P. Deift, W. Hunziker, B. Simon, E. Vock, Pointwise bounds on eigenfunctions and wave packets in N-body quantum systems, IV.—*Commun. Math. Phys.* **64** (1979), 7—34), рассмотрены, с учетом замечаний Моргана, широкие классы N-частичных систем.

До работ О'Коннора, Комба и Томаса была целая серия статей, доказывающих более слабые результаты в различных ситуациях. В одном направлении посредством применения операторных методов было доказано, что дискретные собственные функции ψ принадлежат $D(r^n)$ при подходящих n. Для $n = 1, 2$ и общего класса гамильтонианов это было доказано Хунцикером (W. Hunziker, Space-time behavior of Schrödinger wave functions.— *J. Math. Phys.* 7 (1966), 300—304). Этот результат был обобщен на все n Комбом (J. M. Combes, Time dependent approach to multi-channel scattering.— *Nuovo Cimento* **64A** (1969), 111—144). Применяя аналогичный метод, Альрихс в указанной выше статье доказал, что для собственных функций атомов $\psi \in D(e^{ar})$.

Второе направление исследований пользовалось методами теории дифференциальных уравнений в частных производных. Э. Э. Шноль в работе: О поведении собственных функций уравнения Шредингера.— *Матем. сб.* **42** (1957), 273—286 (см. также: И. М. Глазман, Прямые методы качественного анализа сингулярных дифференциальных операторов.— М.: Физматгиз, 1963) доказал, что $|\psi| \leqslant \exp(-ar)$, но он требовал, чтобы потенциалы были непрерывны и ограничены снизу.

Третье направление применяло методы интегральных уравнений. Саймон в своей книге: B. Simon, Quantum Mechanics for Hamiltonians Defined as Quadratic Forms.— Princeton Univ. Press, 1971, доказал, что $\psi \in D(e^{ar})$, если $a < \sqrt{|E|}$ и $(-\Delta + V)\psi = E\psi$, причем $E < 0$ и $V \in R$ (двухчастичный случай). Анализ Саймона основан на одной лемме теории интегральных уравнений и том факте, что ψ удовлетворяет уравнению

$$\psi(x) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp\left(-\sqrt{-E}\,|x-y|\right)}{|x-y|} V(y)\psi(y)\,dy.$$

Чтобы доказать экспоненциальное убывание собственных функций в случае центрально-симметричных потенциалов, можно воспользоваться интегральными уравнениями из § XI.8; см., например, книгу Редже и де Альфаро, указанную в замечаниях к § XI.8. Наконец, еще одна ссылка на приложение интегральных уравнений к доказательству экспоненциального убывания — это статья: E. L. Slaggie, E. H. Wichmann, Asymptotic properties of the wave function for a bound nonrelativistic system.— *J. Math. Phys.* 3 (1962), 946—968, в которой обсуждается трехчастичный случай. Анализ О'Коннора основан отчасти на идеях, почерпнутых в этой работе.

Последнее направление применяет вариационные методы. Оно описано в работе Базли и Фокса: N. W. Bazley, D. W. Fox, Bounds for eigenfunctions of one-electron molecular systems.— *Int. J. Quant. Chem.* **3** (1969), 581—586.

§ XIII.12. Наиболее ранние результаты, связывающие положительность и невырожденность собственного значения, восходят к фундаментальной теореме Перрона и Фробениуса: конечная матрица со строго положительными элементами имеет в качестве собственного значения единичной кратности свой спектральный радиус, причем соответствующий собственный вектор строго положителен. Заметим, что в теореме Перрона — Фробениуса матрица не обязана быть самосопряженной. Эта теорема впервые появилась в работах: O. Perron, Zur theorie der Matrizen.— *Math. Ann.* **64** (1907), 248—263; F. G. Frobenius, Über Matrizen mit positiven Elementen.— *Sitzungsber. Preus. Akad. Wiss. Berlin* (1908), 471—476. Идея обобщения этой теоремы на эргодические матрицы, сохраняющие положительность, появилась в статье: F. G. Frobenius, Über Matrizen aus nicht negativen Elementen.— *Sitzungsber. Preus. Akad. Wiss. Berlin* (1912), 456—477. Дальнейшее рассмотрение теорем о конечных матрицах можно найти в монографии Ф. Р. Гантмахера, Теория матриц.—М.: Наука, 1967.

Обобщение теоремы Перрона — Фробениуса на бесконечномерные пространства впервые сделано в работе: R. Jentzsch, Über Integralgleichungen mit positiven Kernen.— *J. Reine Angew. Math.* **141** (1912), 235—244. Со времени этой работы теория сильно развилась, что позволило включить в рассмотрение некоторый класс интегральных операторов. См., например: М. Г. Крейн, М. А. Рутман, Линейные операторы, оставляющие инвариантным конус в пространстве Банаха.— *УМН* **3** (1948), 3—95, и T. Ando, Positive linear operators in semi-ordered linear spaces.— *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math.* **13** (1957), 214—228.

Идея приложения теоремы типа Перрона — Фробениуса к квантовым системам восходит к работе Глимма и Джаффе: J. Glimm, A. Jaffe, The $\lambda(\varphi^4)_2$ quantum field theory without cutoffs: II. The field operators and the approximate vacuum.— *Ann. Math.* **91** (1970), 362—401. Они применили прямое доказательство эргодичности для $\exp(-tH)$, где H — пространственно обрезанный гамильтониан $P(\varphi)_2$-теории, а не доказательство, основанное на неприводимости действия множества операторов $e^{-tH} \cup L^\infty(Q)$. Идея воспользоваться неприводимостью, которая сильно все упрощает, принадлежит Сигалу (см. ниже). Приложение к нерелятивистским системам сделано Саймоном и Хег-Кроном: B. Simon, R. Hoegh-Krohn, Hypercontractive semi-groups and two-dimensional self-coupled Bose fields.—*J. Func. Anal.* 9 (1972), 121—180. Более ранние результаты по нерелятивистским квантовым системам, которые не основаны на теореме Перрона — Фробениуса, описаны в курсе Р. Куранта, Д. Гильберта, Методы математической физики. Т. 1.— М.—Л.: Гостехиздат, 1951.

Теорему XIII.48 можно найти в статье: W. Faris, B. Simon, Degenerate and non-degenerate ground states for Schrödinger operators.— *Duke Math. J.* **42** (1975), 559—567.

Мысль воспользоваться неприводимостью вместо эргодичности восходит к работе Андо (см. выше). Наше доказательство импликации (c) $\Rightarrow$ (a) теоремы XIII.43 взято из работы Саймона и Хег-Крона (см. выше). Тот факт, что резольвента усиливает положительность, если она эргодична,— теорема Фариса: W. Faris, Invariant cones and uniqueness of the ground state for Fermion systems.— *J. Math. Phys.* **13** (1972), 1285—1290. Эта работа содержит также теорему теории возмущений, сформулированную в задачах 91, 92. Утверждение, что эргодическая полугруппа усиливает положительность,— теорема Саймона (B. Simon, Ergodic semigroups of positivity preserving self-adjoint operators.— *J. Func. Anal.* **12** (1973), 335—339). Результат по теории возмущений — теорема XIII.45 — принадлежит Сигалу: I. Segal, Construction of nonlinear local quantum processes, II.— *Invent. Math.* **14** (1971), 211—241. Доказательство утверждения (a) теоремы XIII.49 принадлежит Гроссу (L. Gross, Existence and uniqueness of physical ground states.— *J. Func. Anal.* **10** (1972), 52—109). Пользуясь совершенно другими методами, Глимм и Джаффе ранее (в указанной выше статье) доказали существование собственного значения на ннжней границе спектра пространственно обрезанных $P(\varphi)_2$-гамильтонианов. Отметим, что теорема XIII.45 была обобщена на некоторые случаи, включающие фермионные полевые модели, в указанных выше статьях Гросса и Фариса.

Критерий Бёрлинга—Дени был сформулирован в работе: A. Beurling, J. Deny, Espaces de Dirichlet I. Le Cas Elementaire.— *Acta Math.* **99** (1958), 203—224. В этой статье явно содержится лишь случай, когда носитель $d\mu$ — дискретное конечное множество, причем каждая точка имеет едннннчный вес. Однако доказательства утверждений, которые мы назвали первым и вторым критериями Бёрлинга—Дени, очевидно, обобщаются на общий случай (по существу это именно те доказательства, которые мы применили), и, более того, авторы анонсировали результаты для общего случая, хотя статья с деталями доказательства так и не появилась! Дальнейшее обсуждение можно найти в работе Фукусимы: M. Fukushima, On the Generation of Markov Processes by Symmetric Forms. Proc. Second Japan—USSR Symposium on Probability Theory.— Lecture Notes in Mathematics, № 330. Berlin and New York: Springer-Verlag, 1973.

Еще до появления статьи Бёрлинга—Дени одно условие, тесно связанное с их первым критерием, появилось в работе Ароншайна и Смита: N. Aronszajn, K. T. Smith, Characterization of positive reproducing kernels, applications to Green's functions.— *Amer. J. Math.* **79** (1957), 611—622. Ароншайн и Смит обсуждали вопрос о том, когда строго положительно определенный дифференциальный оператор A обладает обратным с поточечно положительным ядром. Их утверждения и, до некоторой степени, их методы ограничены дифференциальными операторами. Их задача тоже несколько отличается от той, которая решается первым критерием Бёрлинга—Дени. Например, оператор $A=(-\Delta+1)^2$, очевидно, обладает сохраняющим положительность обратным (поскольку сохраняет положительность $A^{-1/2}$), но оператор e^{-tA} уже не сохраняет положительность для всех $t>0$ в силу формулы Леви—Хинчина. Однако их условие очевидным образом связано с первым критерием Бёрлинга—Дени.

Первый критерий Бёрлинга—Дени дает связующее звено между приводимым нами доказательством об отсутствии узлов в основном состоянии, которое опирается на положительность $e^{+t\Delta}$, и упомянутым выше доказательством Куранта и Гильберта. В этом последнем используется неравенство $\|\nabla|r|\|^2\leqslant\|\nabla u\|^2$, которое есть не что иное, как первый критерий Бёрлинга—Дени того, что $e^{+t\Delta}$ сохраняет положительность! Имеется также связь между положительностью $e^{+t\Delta}$ и неравенством Като (§ X.4), которую обеспечивает первый критерий Бёрлинга—Дени; см. B. Simon, An abstract Kato's inequality for generators of positivity preserving semigroups.—*Indiana Univ. Math. J.* **26** (1977), 1067—1073.

Что касается примера 1 из дополнения 1, то существует классическая теорема Стильтьеса (T. J. Stieltjes, Sur les Racines de l'Equation $X_n=0$.— *Acta. Math.* **9** (1887), 385—400) о том, что если A — положительно определенная матрица, причем $a_{ij}\leqslant 0$ при $i\neq j$, то $(A^{-1})_{ij}\geqslant 0$ для всех i, j. Пример 1 представляет собой что-то вроде обратного утверждения к этой теореме.

Понятия, фигурирующие во втором дополнении, впервые были введены в контексте теории вероятности в связи с бесконечно делимыми вероятностными мерами. Все бесконечно делимые вероятностные меры с конечным вторым моментом были найдены А. Н. Колмогоровым (A. Kolmogorov, Sulla forma generale di un processo stocastico omogeneo.— *Atti. Acad. Naz. Lincei Rend. Cl. Sci. Fis. Mat. Natur.* **15** (1932), 805—808, 866—869). Общий вид таких мер был найден Леви (P. Lévy, Sur les intégrales dont les éléments sont les variables aléatoires indépendantes.— *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci.* **3** (1934), 331—337; **4** (1935), 217—218. Дальнейшие улучшения принадлежат Феллеру (W. Feller, On the Kolmogorov—P. Lévy formula for infinitely divisible distribution functions.— *Proc. Yugo. Acad. Sci.* **82** (1937), 95—113) и А. Я. Хинчину

(Новый вывод одной формулы П. Леви.— *Бюллетень МГУ*, матем. и мех., секция А, 1, вып. 1 (1937), 1—15). Бесконечно делимые распределения возникают в следующем контексте: n функций $f_1, \ldots, f_n$ называются независимыми случайными величинами, если мера на $\mathbb{R}^n$, заданная как $\nu(A) = \mu(((f_1 \otimes \ldots \otimes f_n)^{-1}[A])$, есть мера-произведение. Если все множители одни и те же, то говорят, что $f_1, \ldots, f_n$ распределены тождественно. Если $\tilde{\mu}$ — распределение для $f_1 + \ldots + f_n$, а μ — распределение для f_i, то $\tilde{\mu} = \mu * \ldots * \mu$ (n раз). Если распределение вероятности есть предел при $n \to \infty$ суммы n тождественно распределенных случайных величин (индивидуальные распределения могут меняться с изменением n), то это распределение будет бесконечно делимым. Классический пример тот, когда предельное распределение гауссово (что отвечает чистому члену $x \cdot Ax$ в (76)). Дальнейшее обсуждение см. в книге: L. Breiman, Probability.— Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1968.

Условно положительно определенные функции и теорема вроде теоремы XIII.52 впервые появились в работе: I. J. Schoenberg, Metric spaces and positive definite functions.— *Trans. Amer. Math. Soc.* **44** (1938), 522—536. Связь между этими понятиями и бесконечно делимыми распределениями была развита в серии работ советских математиков: Б. В. Гнеденко, Об одном характеристическом свойстве безгранично делимых законов распределения.—*Бюллетень МГУ*, матем. и мех., секция А, **1**, вып. 5 (1937), 10—15; А. М. Яглом, М. С. Пинскер, Случайные процессы со стационарными приращениями n-го порядка.— *ДАН СССР* **90** (1953), 731—734; М. Г. Крейн, Об интегральном представлении непрерывной эрмитово индефинитной функции с конечным числом отрицательных квадратов.— *ДАН СССР*, **125** (1959), 31—34; И. М. Гельфанд, Н. Я. Виленкин, Обобщенные функции. Вып. 4.— М.: Физматгиз, 1961. Наше доказательство теоремы XIII. 52 отчасти следует этому последнему изложению; мы исправили только ошибку авторов (наша теорема XIII.52 — это их теорема III.4.4).

Связь между сохраняющими положительность полугруппами и формулой Леви — Хинчина для теории оператора Шредингера была установлена в работе: I. Herbst, A. Sloan, Perturbation of translation invariant positivity preserving semigroups on $L^2(\mathbb{R}^n)$.— *Trans. Amer. Math. Soc.* **236** (1978), 325—360, где развита некая часть теории операторов $F(-i\nabla) + G(x)$ с условно отрицательно определенной функцией F.

То, что оператор e^{-tp^4} не порождает сохраняющую положительность полугруппу, было использовано для построения примера, иллюстрирующего различие между разными системами аксиом для евклидовых квантовополевых теорий; см. B. Simon, Positivity of the Hamiltonian semigroup and the construction of Euclidean region fields.— *Helv. Phys. Acta* **46** (1973), 686—696.

§ XIII.13. Потенциал, построенный в примере 1, найден фон Нейманом и Вигнером: J. von Neumann, E. P. Wigner, Über merkwürdige diskrete Eigenwerte.— *Z. Phys.* **30** (1929), 465—467. В их работе имеется арифметическая ошибка, так что выписанный ими потенциал ведет себя на бесконечности как $O(r^{-2})$, нарушая теорему XIII.58. Мы исправили эту ошибку. Не зная об их работе, Вейдман (J. Weidmann, Zur Spektraltheorie von Sturm — Liouville Operatoren.— *Math. Z.* **98** (1967), 268—302) построил пример, применяя ступенчатые функции (в основном в духе примера Нельсона, рассмотренного в примере 1 дополнения к § X.1). Альбеверио (S. Albeverio, On bound states in the continuum of N-body systems and the Virial theorem.— *Ann. Phys.* **71** (1972), 167—276) описывает, как можно построить потенциалы, приводящие к любому конечному числу связанных состояний, имеющих заранее предписанные энергии. См. также статью Аткинсона, упомянутую в замечаниях к § XI.8.

Теоремы типа теоремы XIII.56 содержатся до некоторой степени неявно в работе по функциям и решениям Йоста, которая обсуждается в § XI.8. В частности, методы обратной задачи рассеяния, о которых говорится в замечаниях к § XI.8, играют важную роль в указанном выше построении Альбеверно. Явные теоремы, применяющие технику обыкновенных дифференциальных уравнений для полного анализа спектра операторов с центрально-симметричными потенциалами, а также более сильные, чем теорема XIII.56, результаты или случай центрально-симметричного потенциала теоремы XIII.58, появились в цитированной выше работе Вейдмана. Дополнительное обсуждение техники функций Йоста и связанных состояний с положительной энергией см. в дополнении и в замечаниях к § XI.8.

Моделью для теоремы XIII.58 служит статья Реллиха: F. Rellich, Über das asymptotische Verhalten der Lösungen von $\Delta u+\lambda u=0$ in unendlichen Gebieten.— *Über. Deutsch. Math. Verein* 53 (1943), 57—65. Реллих изучал решение уравнения $(\Delta+\lambda)u=0$ в неограниченных областях и, в частности, показал, что при $\lambda>0$ не существует квадратично интегрируемых решений уравнения $(\Delta+\lambda)u=0$ в области $\mathbb{R}^n\setminus\{x \mid |x|>R\}$. Отсюда вытекает, что если V имеет компактный носитель, то не существует положительных собственных значений оператора $-\Delta+V$. Эта идея была развита Като (T. Kato, Growth properties of solutions of the reduced wave equation with variable coefficients.— *Comm. Pure Appl. Math.* 12 (1959), 403—425), который доказал частный случай теоремы XIII.52 при $V_2=0$. Результаты, доказанные аналогичными методами для потенциалов, отталкивающих на бесконечности ($\partial V_2/\partial r<0$ для больших r), можно найти в работах: K. Kreith, Differential operators with a purely continuous spectrum.— *Proc. Amer. Math. Soc.* 14 (1963), 809—811; F. Odeh, Note on differential operators with a purely continuous spectrum.— *Proc. Amer. Math. Soc.* 16 (1965), 363—366. Теоремы вида теоремы XIII.58 (но с несколько более сильными условиями гладкости) были найдены независимо Саймоном (B. Simon, On positive eigenvalues of one-body Schrödinger operators.— *Comm. Pure Appl. Math.* 22 (1969), 531—538) и Агмоном (S. Agmon, Lower bounds for solutions of Schrödinger-type equations in unbounded domains.— Proc. of the Int. Conf. on Functional Analysis and Related Topics 1969, Univ. Tokyo Press, Tokyo; Lower bounds for solutions of Schrödinger equations.— *J. Analyse Math.* 23 (1970), 1—25). Еще раньше этих последних статей Вейдман (J. Weidmann, On the continuous spectrum of Schrödinger operators.— *Comm. Pure Appl. Math.* 19 (1966), 107—110) применил методы работы Като к доказательству того, что кулоновы гамильтонианы не имеют положительных собственных значений (это было первое доказательство данного результата, который был рассмотрен нами в примере 5 и его продолжении посредством других методов). Методы Вейдмана легко обобщаются на однородные потенциалы степени $-\alpha$, $0<\alpha<2$. Во второй работе Агмона исследуются суммы потенциалов типа тех, что рассмотрены в теореме XIII.58, и однородных потенциалов указанной степени. Техника теоремы XIII.58 обобщена на системы с магнитными полями в работе: T. Ikebe, J. Uchiyama, On the asymptotic behavior of eigenfunctions of second order elliptic operators.— *J. Math. Kyoto Univ.* 11 (1971), 425—448. Приложения этого метода для проверки того, что некоторые специальные классы n-частичных операторов не имеют собственных значений в интервале (E_0, ∞) при соответствующем $E_0>0$, можно найти в работе Саймона и в первой работе Агмона.

В физической литературе формулировка теоремы вириала из квантовой механики восходит к Финкельштейну: B. N. Finkelstein, Über den Virialsatz in der Wellenmechanik.— *Z. Phys.* 50 (1928), 293—294. Он воспользовался формальным коммутатором, описанным нами в тексте этого раздела. Хотя Вейдману (он первый дал строгое доказательство теоремы вириала; см. ниже) было ясно, что придание строгости доказательству Финкельштейна порождает некоторые проблемы, не он, а Альбеверио в указанной выше статье подчеркнул, что существуют обобщения примера Вигнера—фон Неймана с волновыми функциями, не лежащими в области определения генератора масштабных преобразований D. Тем не менее Калф (H. Kalf, The quantum mechanical virial theorem and the absence of positive energy bound states of Schrödinger operators.— *Israel J. Math.* 20 (1975), 57—69) нашел доказательство теоремы вириала по схеме Финкельштейна. По существу, в нем рассуждения, основанные на коммутаторе, заменены явным интегрированием по частям. Из-за плохих областей определения граничные члены при интегрировании по частям не обращаются в нуль автоматически, и их приходится рассматривать посредством аккуратной процедуры усреднения.

Связь теоремы вириала и группы масштабных преобразований — открытие В. А. Фока (V. Fock, Bemerkung zum Virialsatz.— *Z. Phys.* **63** (1930), 855—858). Первое строгое доказательство теоремы вириала, которому следуем мы, принадлежит Вейдману: J. Weidmann, The virial theorem and its application to the spectral theory of Schrödinger operators.— *Bull. Amer. Math. Soc.* **73** (1967), 452—456. Вейдман также открыл, что теорема вириала имеет отношение к задаче о положительных собственных значениях. Техника, основанная на теореме вириала, обсуждается дальше в статье Альбеверио, где рассмотрено обобщение на операторы с магнитными полями, и в статье Калфа, которая включает случай некоторых операторов, определенных как суммы квадратичных форм.

Применение техники, использующей масштабные преобразования, для сохранения теоремы Вейдмана о несуществовании положительных собственных значений в случае кулоновых гамильтонианов впервые было указано Саймоном в работе: B. Simon, Resonances in N-body quantum systems with dilation analytic potentials and the foundations of time dependent perturbation theory.— *Ann. Math.* **97** (1973), 247—274. Саймон также отметил, что сферически симметричные потенциалы, аналитические относительно растяжений, автоматически обладают поведением $r\,dV/dr \longrightarrow 0$ на бесконечности, так что на основе теоремы XIII.83 можно ожидать существования связей между потенциалами, аналитическими относительно растяжений, и отсутствием положительных собственных значений. Наше обсуждение в продолжении примера 5 следует работе Саймона, а неопубликованному замечанию Балслева. Другое рассуждение в продолжении примера 5 принадлежит Хунцикеру: W. Hunziker, The Schrödinger Eigenvalue problem for N-particle systems. In: The Schrödinger Equation (W. Thirring, P. Urban, eds.).— Springer, 1977, pp. 43—72.

Теорема Карлсона была доказана им в диссертации 1914 г. (F. Carlson, University of Upsala Thesis). Он также доказал замечательное следствие о продолжении аналитической функции со значений в положительных целых точках (см. задачу 109). Теорема XIII.61 была доказана независимо Саймоном (B. Simon, Absence of positive eigenvalues in a class of multiparticle quantum systems.— *Math. Ann.* **207** (1974), 133—138) и Балслевом (E. Balslev, Absence of Positive Eigenvalues of Schrödinger Operators.— *Arch. Rat. Mech. Anal.* **59**, 4 (1975), 343—357).

Теоремы об однозначном продолжении впервые были доказаны Карлеманом для операторов второго порядка на $\mathbb{R}^2$: T. Carleman, Sur un problème d'unicité pour les systèmes d'équations aux dérivées partielles à deux variables indépendantes.— *Ark. Math.* (17) **26B** (1939), 1—9. Карлеман ввел решающую для нашего доказательства идею априорных оценок с константами, не зависящими от параметра (α в нашем случае), таких, что, когда параметр становится сингулярным, интегралы, входящие в оценки, все более и более концентрируются в некоторой области, представляющей интерес. Однозначность продолжения для оператора Шредингера в n измерениях впервые была доказана Мюллером (C. Müller, On the behavior of the solutions of the differential equation $\Delta u = F(x, u)$ in the neighborhood of a point.— *Comm. Pure Appl. Math.* 7 (1954), 505—515). В дальнейшем эта проблема изучалась Хайнцем (E. Heinz, Über die Eindeutigkeit beim Cauchyschen Anfangswertproblem einer elliptischen Differentialgleichung zweiter Ordnung.— *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math. Phys. Kl.* II (1) (1955), 1—12), доказательству которого мы следуем в дополнении к этому разделу. Хайнц, в частности, доказал теорему об однозначном продолжении для операторов Шредингера с магнитными полями (см. задачу 113). Эти результаты были обобщены на эллиптические уравнения второго порядка с непостоянными коэффициентами при старшем члене независимо

Аронштайном (N. Aronszajn, A unique continuaiion theorem for solutions of elliptic partial differential equations or inequalities of second order.— *J. Math. Pures Appl.* **36** (1957), 235—249) и Кордесом (H. O. Cordes, Über die Bestimmtheit der Lösungen elliptischer Differentialgleichungen durch Anfangsvorgaben.— *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math.— Phys. Kl.* II (11) (1956), 239—258).

Для гиперболических уравнений типа волнового $\ddot{u}=\Delta u$ может, конечно, случиться, что решения обращаются в нуль на открытом множестве, не будучи равными нулю тождественно; однако и в этом случае имеет место теорема единственности: если $\ddot{u}=\Delta u$ и u обращается в нуль в некоторой окрестности плоскости $\{(t, x) \mid t=0\}$, то u — тождественный нуль. Для волнового и других подобных уравнений такие результаты восходят по крайней мере к Холмгрену: E. Holmgren, Über Systeme von linearen partiellen Differentialgleichungen.— *Öfversigt af Kongl. Vetenskaps-Akad. Förh.* **58** (1901), 91—105; см. также: L. Nirenberg, Uniqueness in Cauchy problems for differential equations with constant leading coefficients.—*Comm. Pure Appl. Math.* **10** (1957), 89—105; A. P. Calderón, Uniqueness in the Cauchy problem for partial differential equations.— *Amer. J. Math.* **80** (1958), 16—36. Эти результаты подробно рассматриваются в книге Л. Хёрмандера, Линейные дифференциальные операторы с частными производными.— М.: Мир, 1965. Примеры операторов, для которых теорема единственности не справедлива, построены Коэном (P. Cohen, The non-uniqueness of the Cauchy Problem.—O. N. R. Technical Report 93, Stanford, 1960) и Пливом (A. Pliv, A smooth linear elliptic differential equation without any solution in a sphere.—*Comm. Pure Appl. Math.* **14** (1961), 599—617).

Как подчеркнул Лавин [не опубликовано], во всех имеющихся теоремах об однозначном продолжении есть серьезный дефект: требуется, чтобы потенциал V был локально ограничен. Тип захвата, который встречается в примере 2, описывается потенциалом V, который даже локально не принадлежит L^1, а теорема Фариса — Саймона (теорема XIII.48) упорно наводит на мысль, что такие не принадлежащие L^1 особенности необходимы для захвата. Например, можно было бы высказать такую гипотезу: если потенциал $V\in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ положителен и $H=-\Delta+V$ определен как сумма форм, то любая собственная функция H, исчезающая на открытом множестве, есть тождественный нуль. Отметим, что доказательство Хайнца отбрасывает массу информации, содержащейся в оценках. Аккуратно пользуясь этой информацией, можно было бы доказать теорему об однозначном продолжении для некоторых классов неограниченных потенциалов.

Для наших приложений однозначной продолжимости нам нужен только специальный случай, в котором собственные функции с компактным носителем запрещены. Это было доказано Амрейном и Бертье в более общем случае с помощью теоремы XIII.100 (W. O. Amrein, A. Berthier, On support properties of L^p functions and their Fourier Transforms.— *J. Funct. Anal.* **24** (1977), 258—267).

§ XIII.14. Основной критерий, теорема XIII.64, и другие общие результаты этого раздела (теоремы XIII.77, 78) — широко известные факты. Роль теоремы XIII.78 в математической физике впервые была подчеркнута Глиммом и Джаффе в работе: J. Glimm, A. Jaffe, The $\lambda(\varphi^4)_2$ quantum field theory with cutoffs II. The field operators and the approximate vacuum.— *Ann. Math.* **91** (1970), 362—400, где она применялась к пространственно обрезанному гамильтониану $P(\varphi)_2$-модели. Применение к пространственно обрезанной Y_2-модели и доказательство, основанное на теореме XIII.77, появились в их статье The Yukawa$_2$ Quantum Field theory without cutoffs.— *J. Funct. Anal.* 7(1971), 323—357.

Мы решили назвать теорему XIII.65 критерием Реллиха ввиду того, что самый первый результат на эту тему появился в статье: F. Rellich, Ein Satz über mittlere Konvergenz.— *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math.-Phys. Kl.* II (1930), 30—35.

Простое доказательство, приведенное в тексте, авторы узнали от Р. Лавина.

Критерий Рисса появился в работе: M. Riesz, Sur les ensembles compacts de fonctions sommable.— *Acta Sci. Math. (Szeged)* **6** (1933), 136—142. Более ранние результаты принадлежат M. Фреше: M. Fréchet, Essai de geometrie analytique à une infinité de coordinates.— *Nouvelles Ann. Math.* 8 (1903), 97—116; 289—317, и А. Н. Колмогорову, Über Kompaktheit der Funktionmengen bei der Konvergenz im Mittel.— *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math.-Phys. Kl.* II (1931), 60—63.

Приведенное в тексте обсуждение скорости убывания собственных функций оператора $-\Delta+V$ при $V\to\infty$ взято из работы Б. Саймона: B. Simon, Pointwise bounds on eigenfunctions and wave packets in N-body quantum systems I, II, III.— *Proc. Amer. Math. Soc.* **42** (1974), 395—401; **45** (1974), 454—456; *Trans. Amer. Math. Soc.* **208** (1975), 317—329. В частности, доказательство теоремы XIII.72 можно найти в части III. Теорема XIII.70 при $V\geqslant 0$ появилась намного раньше у Э. Э. Шноля, О поведении собственных функций уравнения Шредингера.— *Матем. сб.* **42**, № 3 (1957), 273—286, (поправка) **46**, № 2 (1958), 259, где она была доказана совсем другим способом. Наше доказательство теоремы XIII.70 в случае $V\geqslant 0$ использует прием Девиса из его статьи: E. B. Davies, Properties of the Green's functions for some Schrödinger operators.— *J. London Math. Soc.* **7** (1973), 483—491. Обобщения теоремы XIII.72 (b), позволяющие сказать что-то о собственных функциях, отличных от основного состояния, даны в статье: C. Bardos, M. Merigot, Asymptotic decay of the solution of a second order elliptic equation in an unbounded domain. Applications to the spectral properties of a Hamiltonian.— *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A* **76** (1977), 323—344; C. Bardos, M. Merigot, Décroissance expontielle de la solution L^2 du problème de Direchlet dans le complementaire d'un fermé borné.— *Comp. Rend. Acad. Sci. Paris*, **281A** (1975), 561—563.

Первая теорема о компактном вложении типа обсуждаемой в тексте доказана Реллихом в уже упоминавшейся работе. Общие теоремы вложения в случае H_0^m принадлежат Гордингу: L. Gårding, Dirichlet's problem for linear elliptic partial differential equations.— *Math. Scand.* **1** (1953), 55—72. Набросок доказательства Гординга дан в задаче 123. Теорему XIII.75 доказал Реллих в случае ограниченной области с гладкой границей. Общий случай и теория областей, обладающих сегментным свойством, рассмотрены в лекциях Агмона: S. Agmon, Lectures on Elliptic Boundary Value Problems.— Princeton, N. J.: Van Nostrand, 1965. Он же доказал, что множество $\{f\mid f$ класса C^∞ в окрестности $\Omega\}$ плотно в H^m, если Ω обладает сегментным свойством.

Наше обсуждение квантовой статистической механики систем в ящике взято из приложения, написанного Саймоном к работе: J. Lebowitz, E. Lieb, The constitution of matter.— *Advances in Math.* **9** (1972), 316—398, но сама проблема широко известна. По поводу дальнейшего обсуждения квантовой статистической механики непрерывных систем см. J. Ginibre, Some applications of Functional Integration in Statistical Mechanics, In: Statistical Mechanics and Quantum Field Theory.— Les Houches, 1970 (C. DeWitt, R. Stora, eds.).— New York: Gordon and Breach, 1971; D. Robinson, The Thermodynamic Pressure in Quantum Statistical Mechanics.— Berlin and New York: Springer-Verlag, 1971, и Д. Рюэль, Статистическая механика. Строгие результаты.— М.: Мир, 1971.

§ XIII.15. Метод вилки Дирихле—Неймана относится к разряду древнейших; например, теорема XIII.78 доказана Р. Курантом и Д. Гильбертом в книге: Методы математической физики. Т. I.—М.—Л.: Гостехиздат, 1951, способом, тесно связанным с методом вилки Дирихле—Неймана. Первоначальное доказательство, принадлежащее Вейлю, основано на родственных идеях. К более новым работам, использующим этот метод, относятся статьи: E. H. Lieb, Quantum Mechanical Extensions of the Lebowitz—Penrose Theorem on the Van

Der Waals Theory.— *J. Math. Phys.* 7 (1966), 1016—1024; A. Martin, Bound states in the strong coupling limit.— *Helv. Phys. Acta* 45 (1972), 140—148, и книга Робинсона, упомянутая в замечаниях к предыдущему разделу.

В случае произвольных открытых областей $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ можно использовать определения $-\Delta_N$, отличающиеся от нашего. Например, некоторые авторы в качестве $Q(-\Delta_N)$ берут замыкание формы $(f, -\Delta f)$ на множестве функций из $H^1(\Omega)$, бесконечно дифференцируемых в окрестности Ω. Для областей, обладающих сегментным свойством, эти определения совпадают.

Интуитивная идея выделения в фазовом пространстве ячеек объемом h^3 возникла на самых ранних стадиях обобщения старой квантовой теории Бора на газы; см., например, O. Sackur, Die Anwendung der Kinetischen Theorie der Gase auf chemische Probleme.— *Ann. Phys.* **36** (1911), 958—980; Die universelle Bedeutung des sog. elementaren Wirkungsquantums.— *Ann. Phys.* **40** (1913), 67—86; H. Tetrode, Die chemische Konstante der Gase und das elementare Wirkungsquantum.— *Ann. Phys.* **38** (1912), 434—442. Эту же идею как мощный инструмент использовал Э. Ферми даже после создания новой квантовой теории, и построенный на ее основе метод ныне называют «теорией ферми-газа».

Отыскание числа точек решетки $\mathbb{Z}^m$, лежащих внутри шара радиуса r, — интересная теоретико-числовая задача. То что это число асимптотически равно $\tau_m r^m$ с погрешностью, в худшем случае имеющей порядок $O(r^{m-1})$, было известно уже по крайней мере Гауссу, который доказал это по существу тем же методом, которым доказано предложение 2. Удивительно, что в действительности эта погрешность меньше, чем $O(r^{m-1})$: при $m=2$ она меньше, чем $O(r^{2/3})$, и больше, чем $O(r^{1/2})$. Дальнейшее обсуждение см. в § 18.7 книги G. Hardy, E. Wright, The Theory of Numbers.— Oxford: Oxford Univ. Press, 1938, и стр. 183—308 книги E. Landau, Vorlesungen über Zahlentheorie, B. 2.—Leipzig: Hirzel, 1927. Обсуждение аналогичных задач в пространствах более высоких размерностей можно найти в книге: A. Walfisz, Weylische Exponentialsummen in der Neueren Zahlentheorie.— Berlin: Deutscher Ver. Wiss., 1963. Предостережение читателю: эти результаты не означают, что показатель степени $m-1$ в (116) и (117) можно исправить. Как раз наоборот, из них следует, что этого сделать нельзя! Действительно, множество M_{m-1} всегда дает вклад порядка r^{m-1}, который в силу сказанного выше никак нельзя изменить путем учета вклада поверхности шара.

Теорема XIII.78—прославленная теорема Г. Вейля: H. Weyl, Das asymptotische Verteilungsgesetz der Eigenwerte linearer partieller Differentialgleichungen.— *Math. Ann.* 71 (1911), 441—469; Über die Abhängigkeit der Eigenschwenkgungen einer Membran von deren Begrenzung.— *J. Math.* **141** (1912), 1—11. История вопроса освещена в статье: H. Weyl, Ramifications, old and new, of the eigenvalue problem.— *Bull. Amer. Math. Soc.* **56** (1950), 115—139. Эта теорема владела умами математиков двух поколений. Работа Вейля основывалась на гипотезах Лоренца и Джинса, которые столкнулись с этой проблемой при изучении электромагнитного излучения. В ней было показано, что спектр оператора $-\Delta_\Omega$ на Ω определяет объем Ω. Это немедленно поставило вопрос о том, какие другие геометрические свойства Ω определяются спектром оператора $-\Delta_\Omega$, или, более общо, оператором Лапласа—Бельтрами $-\Delta_M$ на компактном римановом многообразии. Результаты, полученные в этой области вплоть до середины 60 годов, и важные новые направления описаны в красивой работе М. Каца: M. Kac, Can you hear the shape of a drum?— *Amer. Math. Monthly* (Slaught Memorial Papers, № 11) (4) **73** (1966), 1—23. Более новые результаты обсуждаются в докладе Зингера: I. M. Singer, Distribution of eigenfrequencies for the Laplacian.— Proceed. of the 1974 Intern. Congress of Mathematicians; см. также R. Balian, C. Bloch, Eigenvalues of wave equation in a finite domain, I, II, III.— *Ann. Phys.* **60** (1970), 401; **64** (1971), 271; **69** (1972), 75. В число величин, определяемых собственными значениями, входят площадь граничной поверхности, характеристика

Эйлера—Пуанкаре, длина любой замкнутой геодезической на M. К негативным фактам относится пример двух неизометрических 16-мерных торов, операторы Лапласа—Бельтрами которых имеют одинаковый спектр; его построил Милнор: J. Milnor, Eigenvalues of the Laplacian operator on certain manifolds.— *Proc. Nat. Acad. Sci.* **51** (1964), 542. Анализ подобных свойств $-\Delta_\Omega$ основывается не на методе вилки Дирихле—Неймана, а на изучении интегрального ядра $\exp(t\Delta_\Omega)$, поскольку метод вилки слишком груб и позволяет узнать лишь старший член в разложении $N(\lambda)$. Современное обсуждение методов, основанных на использовании таких функций Грина, можно найти в работе: L. Hörmander, The spectral function of an elliptic operator.— *Acta Math.* **121** (1968), 193—218 (перевод в сб. *Математика* **13**:6 (1969), 114—137).

Для некоторых областей погрешность в формуле Вейля имеет порядок $O(\lambda^{(n-1)/2})$; см. упомянутую статью Хёрмандера и V. Avakumovic, Über die Eigenfunktionen auf geschlossen Riemannschen Mannigfaltigkeiten.— *Math. Z.* **65** (1956), 327—344.

Пример, где метод фазового пространства позволяет получить оценку в квантовомеханической задаче, дает теорема XIII.12 и задачи 31, 32, 33. Отметим, что, хотя метод фазового пространства в большинстве задач дает удивительную точность, в «пограничных» случаях он перестает работать. Например, оператор $-\Delta-c(1+|r|)^{-\alpha}$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$ обладает бесконечным числом связанных состояний, если $\alpha<2$, $c>0$ или $\alpha=2$, $c>1/4$. Объем фазового пространства, отвечающий отрицательной энергии, бесконечен при $\alpha\leqslant 2$, $c>0$. Таким образом, при $\alpha=2$, $0<c\leqslant 1/4$ предсказания, получаемые с помощью фазового метода, ошибочны.

Понятие жорданова объема было важным предшественником меры Лебега. Основная работа была выполнена в 1880-е гг. Кантором, Штольцем, Харнаком, Пеано и Жорданом. Обсуждение истории развития понятия объема можно найти в книге: И. Н. Песин, Развитие понятия интеграла.—М.: Наука, 1966. Современное изложение теории жорданова объема дано в книгах: L. Loomis, S. Sternberg, Advanced Calculus.— Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1968; T. Apostol, Mathematical Analysis.— Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1960.

Теорема XIII.79 (в несколько иной форме) доказана М. Ш. Бирманом и В. В. Борзовым в статье: Об асимптотике дискретного спектра некоторых сингулярных дифференциальных операторов. В сб. Проблемы математической физики. Вып. 5.— Л.: Издательство ЛГУ, 1971, с. 24—38, А. Мартеном (в упомянутой выше статье) и Тамурой (H. Tamura, The asymptotic eigenvalue distribution for non-smooth elliptic operators.— *Proc. Japan Acad.* **50** (1974), 19—22). Ранее Чадам (K. Chadam, The asymptotic behavior of the number of bound states of a given potential in the limit of large coupling, II.— *Nuovo Cimento* **58A** (1968), 191—204) получил аналогичный результат для одномерных систем, а Саймон (B. Simon, On the growth of the number of bound states with increase of potential strength.—*J. Math. Phys.* **10** (1969), 1123—1126) доказал, что $c\lambda^{3/2}<N(\lambda)<d\lambda^{3/2}$ при больших λ и c, $d>0$; $n=3$. Мартен использовал метод вилки Дирихле—Неймана, Чадам применял функции Йоста (см. § XI.8), а Тамура использовал функции Грина. Обобщения и дальнейшее развитие теории можно найти в серии статей Бирмана и его сотрудников: М. Ш. Бирман, М. З. Соломяк, Кусочно-полиномиальные приближения функций классов W_p^α.— *Матем. сб.* **73**, Вып. 3 (1967), 331—355; О главном члене спектральной асимптотики для «негладких» эллиптических задач.— *Функц. анализ и прилож.* 4, № 4 (1970), 1—13; Об асимптотике спектра «негладких» эллиптических уравнений.— *Функц. анализ и прилож.* **5**, № 1 (1971), 69—70; В. В. Борзов, О некоторых применениях кусочно-полиномиальных приближений функций анизотропных классов W_p^r.— *ДАН СССР* **198** (1971), 499—501; Г. В. Розенблюм, О распределении собственных чисел первой краевой задачи в неограниченных областях.— *ДАН СССР* **200** (1971), 1034—1036.

Метод доказательства теоремы XIII.80 независимо был найден Бирманом (см. упомянутые выше работы) и Саймоном в статье о слабых Tr-идеалах, упомянутой в замечаниях к § 3.

Можно доказать предельные теоремы о величинах $S_\gamma(V)$ из задачи 32 и с помощью оценок Либа—Тирринга обобщить их на произвольные потенциалы из $L^{m/2+\gamma}$ (см. задачи 129 и 130).

Варианты теоремы XIII.81 появились в книгах Э. Ч. Титчмарша, Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. Т. I.—М.: ИЛ, 1960; Т. II—М.: ИЛ. 1961.

Варианты теоремы XIII.82 появились в работах: F. H. Brownell, C. W. Clark, Asymptotic distribution of the eigenvalues of the lower part of the Schrödinger operator spectrum.— *J. Math. Mech.* **10** (1961), 31—70; J. B. McLeod, The distribution of eigenvalues for the hydrogen atom and similar cases.— *Proc. London Math. Soc.* **11** (1961), 139—158. Обобщения на другие операторы проделаны в статье H. Tamura, The asymptotic distribution of the lower part eigenvalues for elliptic operators. —*Proc. Japan Acad.* **50** (1974), 184—187.

Распространение утверждений теоремы XIII.82 на различные многочастичные системы можно найти в «Геометрических методах» Саймона, упомянутых в замечаниях к § 3.

Приложения метода вилки Дирихле—Неймана к квантовым статистическим системам даны в уже упоминавшейся книге Д. Робинсона; к проблеме вычисления плотности энергии в квантовой теории поля в рамках фокова пространства—в статье F. Guerra, L. Rosen, B. Simon, Boundary conditions for the $P(\varphi)_2$ euclidean quantum field theory.— *Ann. Inst. H. Poincaré* **25A** (1976), 231—334, и, наконец, к модели Томаса—Ферми—в работе E. Lieb, B. Simon, The Thomas—Fermi model of atoms, molecules and solids.— *Advances in Math.* **23** (1977), 22—116.

Теоремы типа теоремы XIII.82 $^1/_2$ восходят по крайней мере к книгам Титчмарша, упоминавшимся выше, и могут быть распространены на потенциалы более общего вида. Результаты, получаемые здесь, иногда представляют в виде

$$\sqrt{E_n(V)} = n\pi + \frac{1}{2\pi} n^{-1} \int_0^1 V(x)\,dx + o(n^{-1}).$$

В силу замечаний, сделанных после теоремы, если V—достаточно гладкая функция (хотя бы класса C^1), погрешность будет иметь порядок $o(n^{-2})$.

§ *XIII.16*. Можно построить теорию прямых интегралов, более общую, чем та, что мы описали (теория с неодинаковыми слоями). В случае когда все слои сепарабельны, каждый прямой интеграл над M унитарно эквивалентен прямому интегралу следующего вида:

$$\mathcal{H} = \int_{M_\infty}^{\oplus} l_2 \oplus \left(\bigoplus_{n=1}^{\infty} \int_{M_n}^{\oplus} \mathbb{C}^n \right),$$

где $M = M_\infty \cup \left(\bigcup_{n=1}^{\infty} M_n \right)$, причем M_∞, M_1, ...—непересекающиеся измеримые множества, а каждый из входящих в $\mathcal{H}$ прямых интегралов имеет постоянные слои. Прямые интегралы были введены и изучены фон Нейманом: J. von Neumann, On rings of operators: Reduction theory.— *Ann. Math.* **50** (1949), 401—485. Фон Нейман применил свою теорию для разложения слабо замкнутых алгебр операторов в прямые интегралы факторов (см. гл. XVIII). Дальнейшее обсуждение и ссылки можно найти у Диксмье: J. Dixmier, Les

Algèbres d'opérateurs dans l'espace Hilbertien. Ch. II.— Paris: Gauthier-Villars 1969.

В то время как до недавней поры при анализе дифференциальных операторов с периодическими коэффициентами не использовали теорию прямых интегралов, основная идея о том, что их можно изучать, отыскивая решения на $\mathbb{R}$ (или $\mathbb{R}^n$), которые не периодичны, а подчинены условию $\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x)$, довольно стара. В математической литературе ее реализовал Флоке, а в литературе по физике твердого тела — Блох: F. Bloch, Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern.— *Z. Phys.* **52** (1928), 555—600.

Существует огромная математическая литература по поводу обыкновенных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами, особенно уравнения Хилла $(P(x)y'(x))' + Q(x)y(x) = \lambda y(x)$ с имеющими общий период коэффициентами P и Q. В список литературы на эту тему входят следующие книги: W. Magnus, S. Winkler, Hill's Equation.— Wiley (Interscience), 1966; M.S.P. Eastham, The Spectral Theory of Periodic Differential Equations.— Scottish Academic Press, 1973; Э. Коддингтон и Н. Левинсон, Теория обыкновенных дифференциальных уравнений.— М.: ИЛ, 1957, и Э. Ч. Титчмарш, Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. Т. 1, 2. —М.: ИЛ, 1960, 1961.

Анализ дискриминантов обычно основывается не на теории аналитических возмущений, а на прямых методах теории обыкновенных дифференциальных уравнений; см., например, указанную выше книгу Истхама. Получаемые здесь результаты восходят к работам Ляпунова: A. M. Liapunov, Problème generale de la stabilité du movement.— *Ann. Fac. Sci. Toulouse* (2) **9** (1907), 203—474; Хамеля: G. Hamel, Über die lineare Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit periodischen Koeffizienten.— *Math. Ann.* **73** (1913), 371—412; Хаупта: O. Haupt, Über lineare homogene Differentialgleichungen 2. Ordnung mit periodischen Koeffizienten.— *Math. Ann.* **79** (1919), 278—285, и Крамерса: H. A. Kramers, Das Eigenwertprobleme in eindimensionalen periodischen Kraftfeldern.— *Physica* **2** (1935), 483—490.

Тот факт, что в уравнении Матье реализуются все допустимые щели, установлен Инсом: E. L. Ince, A proof of the impossibility of the coexistence of two Mathieu functions.— *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **21** (1922), 117—120. Пример в задаче 139 изучали Крёниг и Пенни (R. K. Krönig, W. G. Penny, Quantum mechanics in crystal lattices.— *Proc. Roy. Soc.* **130** (1931), 499—513), и с тех пор он служит общепринятой учебной моделью в физике твердого тела. Пункты (a) и (c) теоремы XIII.91 принадлежат Боргу: G. Borg, Eine Umkehrung der Sturm—Liouvilleschen eigenwertaufgabe Bestimmung der Differentialgleichung durch die Eigenwerte.— *Acta Math.* **78** (1946), 1—96. Другое доказательство (a) можно найти у Хохштадта: (H. Hochstadt, On the determination of a Hill's equation from its spectrum, I.— *Arch. Rational Mech. Anal.* **19** (1965), 353—362; Function theoretic properties of the discriminant of Hill's equation.— *Math. Z.* **82** (1963), 237) и Унгара (P. Ungar, Stable Hill Equations.— *Comm. Pure Appl. Math.* **14** (1961), 707—710). В первой из цитированных статей Хохштадта содержится доказательство (b) и утверждения (d′), получаемого из (d) заменой вещественно аналитических функций на C^∞-функции. Другое доказательство (c) можно найти у того же Хохштадта в работе: H. Hochstadt, On the determination of a Hill's equation from its spectrum, II.— *Arch. Rational Mech. Anal.* **23** (1966), 237—238. Пункт (d) доказан Голдбергом (W. Goldberg, On the determination of a Hill's equation from its spectrum.— *Bull. Amer. Math. Soc.* **80** (1974), 1111—1112) и Мак-Кином и Трубовицем (H. P. McKean, E. Trubowitz, Hill's equation and hyperelliptic function theory in the presence of infinitely many branch points.— *Comm. Pure Appl. Math.* **29** (1976), 143—226).

Последняя статья содержит также пункт (e), теорему XIII.92 и случай $n = \infty$ теоремы XIII.94. Доказательство (e) независимо дано Саймоном: B. Simon, On the genericity of non-vanishing instability intervals in Hill's equation.— *Ann. Inst. H. Poincaré* **24A** (1976), 91—93. Случай $n<\infty$ теоремы XIII.94 разобран в работе: H. P. McKean, P. van Moerbeke, The spectrum of Hill's equation.— *Invent. Math.* **30** (1975), 217—274. Теорема XIII.93 принадлежит Гарднеру, Грину, Крускалу и Миуре: C. Gardner, J. Greene, M. Kruskal, R. Miura, A method for solving the Korteweg de Vries equation.— *Phys. Rev. Lett.* **19** (1967), 1095—1097. В связи с пунктом (d) теоремы XIII.91 Истхам в своей книге замечает, что периодические операторы Шредингера на $\mathbb{R}^m$ при $m\geqslant 2$ с подходящими потенциалами обладают конечным числом щелей в спектре, даже когда потенциалы разрывны.

Теорему Адамара о факторизации читатель может найти в книге Э. Титчмарша, Теория функций.— М.: Гостехтеориздат, 1951. Теорему XIII.95 доказал Кон: W. Kohn, Analytic properties of Bloch waves and Wannier functions.— *Phys. Rev.* **115** (1959), 809—821. Дополнительное обсуждение этой теоремы и аналитичности зонных функций можно найти у Аврона и Саймона: J. Avron, B. Simon, Analytic properties of band functions.— *Ann. Phys.* **110** (1977), 85—101.

Теорема XIII.96 принадлежит Стрихартцу: R. Strichartz, Multipliers on fractional Sobolev Spaces.— *J. Math. Mech.* **16** (1967), 1031—1060.

Основные работы, посвященные спектральному анализу N-мерных периодических операторов Шредингера: F. Odeh, J. B. Keller, Partial differential equations with periodic coefficients and Bloch waves in crystals.— *J. Math. Phys.* **5** (1964), 1499—1504; G. Scherf, Das Blochsche Theorem für unendliche Systeme.— *Helv. Phys. Acta* **39** (1966), 556—560; J. Avron, A. Grossman, R. Rodrijuez, Hamiltonians in the one-electron theory of solids.— *Rep. Math. Phys.* **5** (1974), 113—120; L. E. Thomas, Time dependent approach to scattering from impurities in a crystal.— *Commun. Math. Phys.* **33** (1973), 335—343; G. M. Troiunielloq, Scattering theory for Schrödinger operators with L^∞ potentials and distorted Bloch waves.— *J. Math. Phys.* **15** (1974), 2048—2052; F. Bentosela, Scattering from impurities in a crystal.— *Commun. Math. Phys.* **46** (1976), 153—166. Работа Томаса, в частности, содержит то замечательное рассуждение (пункт (с) леммы перед теоремой XIII.100), которое доказывает что ни одна из функций $E_n(z)$ не постоянна, а также теорему XIII.102. В своей статье Томас рассматривал случай $\beta=2$ при $n=3$.

Разложение по собственным функциям теоремы XIII.98 ввел И. М. Гельфанд, Разложение по собственным функциям уравнения с периодическими коэффициентами.— *ДАН СССР* **73** (1950), 1117—1120.

Спектральные свойства периодических гамильтонианов в электрическом и магнитном полях довольно тонки; см., например: A. Grossman, Momentum-like constants of motion. In: Statistical Mechanics and Field Theory (R. N. Sen, C. Weil, eds.).— Washington, D. C.: Halsted Press, 1972.

Модель примесей, которую мы обсуждали в конце этого раздела, довольно нереалистична в том смысле, что одного примесного атома на деле никогда не бывает; обычно существует некоторое количество примесных атомов, распределенных случайным образом с малой плотностью. Существует интересная модель такой ситуации. Пусть V и W — два потенциала на $[0, 1)$. Пусть z обозначает двустороннюю последовательность $\{z_n\}$, $n=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, нулей и единиц. Для заданного z пусть $V^{(z)}$ — функция на $\mathbb{R}$, равная $V(x-n)$ на $[n, n+1)$, если $z_n=0$, и $W(x-n)$, если $z_n=1$. Пусть $H^{(z)}=-d^2/dx^2+V^{(z)}(x)$ действует в $L^2(\mathbb{R})$. Пусть p — плотность примесей. Зададим на $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}}$ меру-произведение, полагая $\mu(\{0\})=1-p$, $\mu(\{1\})=p$ на каждом множителе в $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}}$. Теперь $H^{(z)}$ можно представить себе как «случайный гамильтониан» и интересоваться свойствами, присущими почти каждому $H^{(z)}$. Можно доказать, что почти каждый $H^{(z)}$ обладает полным набором собственных векторов! См. статью: И. Я. Гольшад, С. А. Молчанов, О проблеме Мотта.— *ДАН СССР* **230** (1976), 761—764.

Хорошими источниками сведений по элементарной теории твердого тела могут служить книги: Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел.—М.: Мир, 1967; Дж. Займан, Принципы теории твердого тела.—М.: Мир, 1974.

§ XIII.17. Мы обсудили лишь один аспект спектральной теории несамосопряженных операторов. Среди работ, где читатель может найти дополнительный материал, укажем книги: И. Ц. Гохберг и М. Г. Крейн, Введение в теорию линейных несамосопряженных операторов.— М.: Наука, 1965, и Теория вольтерровых операторов в гильбертовом пространстве и ее приложения.— М.: Наука, 1966; И. Ц. Гохберг, И. А. Фельдман, Проекционные методы решения уравнений Винера — Хопфа.— Кишинев, 1967; R. Douglas, Banach Algebra Techniques in Operator Theory.— New York: Academic Press, 1972; Н. Данфорд, Дж. Шварц, Линейные операторы. т. II, § XI.6, 9, 10.— М.: Мир, 1966; Б. Секефальви-Надь и Ч. Фояш, Гармонический анализ операторов в гильбертовом пространстве.— М.: Мир, 1970; Proceedings of a Conference on Operator Theory. Lecture Notes in Math, № 345.— Berlin, New York: Springer-Verlag, 1973; C. Pearcy (ed.), Topics in Operator Theory.— Providence R. I.: *Amer. Math. Soc.*, 1974. В книгах Гохберга—Крейна и Данфорда—Шварца читатель может найти дополнительный материал по вопросам, затронутым в этом разделе. Наше обсуждение определителей следует статье Саймона: B. Simon, Notes on infinite determinants of Hilbert space operators.— *Adv. Math.* **24** (1977), 244—273. Некоторые элементы нашего обсуждения совпадают с подходом Рингроуза: J. R. Ringrose, Compact Non-self-adjoint Operators.— Princeton, Van Nostrand-Reinhold, 1971.

Если у оператора есть собственный вектор, то он обладает и нетривиальным инвариантным подпространством. Существование компактных операторов без собственных значений (пример 1) ставит вопрос о существовании у каждого компактного оператора инвариантного подпространства. Эта задача была решена (положительным образом) фон Нейманом [не опубликовано] для гильбертовых пространств и Ароншайном и Смитом: N. Aronszajn, K. T. Smith, Invariant subspaces of completely continuous operators.— *Ann. Math.* **60** (1954), 345—350. Существует и более общая задача: есть ли нетривиальное инвариантное подпространство у любого ограниченного оператора на гильбертовом пространстве? Она обсуждается в работах: H. Helson, Lectures on Invariant Subspaces.— New York: Academic Press, 1964; W. B. Arveson, J. Feldman, A note on invariant subspaces.— *Michigan Math. J.* **15** (1968), 61—64; C. Pearcy, N. Salinas, An invariant subspace theorem.— *Michigan Math. J.* **20** (1973), 21—31; см. также статьи в указанном выше сборнике под редакцией Перси.

Утверждение, которое мы назвали теоремой Шура—Лалеско—Вейля (теорема XIII.103), имеет сложную историю, отчасти по той причине, что определение класса операторов со следом и класса $\mathcal{I}_p$ было дано совсем недавно. Критерий того, когда бесконечная матрица задает оператор Гильберта — Шмидта, довольно прост $\left(\text{именно, должна быть конечной сумма } \sum\limits_{n,\, m} |a_{mn}|^2\right)$, и поэтому этот класс операторов был выделен очень давно. Шур (I. Schur, Über die charakteristischen Wurzeln einer linearen Substitution mit einer Anwendung auf die Theorie der Integralgleichung.—*Match. Ann.* **66** (1909), 488—510) доказал, что $\sum\limits_{n=1}^{N(A)} |\lambda_n(A)|^2 < \infty$, если A—оператор Гильберта—Шмидта. Лалеско (T. Lalesco, Une théorème sur les noyaux composés.—*Bull. Soc. Sci. Acad. Roumania* 3 (1914—1915), 271—272) доказал, что $\sum\limits_{n=1}^{N(A)} |\lambda_n(A)| < \infty$ для обширного семейства операторов, которые мы называем теперь операторами со следом. На весь класс операторов со следом (представленных как произвольное произведение двух операторов Гильберта — Шмидта!) этот результат был распространен Георгиу (S. A. Gheorghiu, Sur l'équation de Fredholm. Thèse.—Paris, 1928), и Хилле и Тамаркином (E. Hille, J. D. Tamarkin, On the characteristic values of linear integral equations.—*Acta Math.* **57** (1931), 1—76). Г. Вейль (H. Weyl, Inequalities between the two kinds of eigenvalues of a linear transformation.—*Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **35** (1949), 408—411) доказал общее соотношение:

$$\sum_{n=1}^{N(A)} \varphi(|\lambda_n(A)|) \leqslant \sum_{n=1}^{\infty} \varphi(\mu_n(A)),$$

где φ — любая положительная функция с $\varphi(0)=0$, такая, что $\varphi(e^t)$ выпукла на $(-\infty, \infty)$. Вейль основывал свое доказательство на общих свойствах выпуклых функций и неравенстве (задача 154)

$$|\lambda_1(A)\ldots\lambda_n(A)| \leqslant \mu_1(A)\ldots\mu_n(A).$$

Наше доказательство взято из статьи Саймона, упомянутой выше. Обобщение результата Вейля получил Островский: A. Ostrowski, Sur quelques applications des fonctions convexes et concaves au sens de I. Schur.—*J. Math. Pure Appl.* **9** (1952), 253—292; см. также первую из книг Гохберга и Крейна.

С помощью приведенного выше неравенства можно доказать, что

$$\operatorname{Tr}(\varphi(e^{A+B})) \leqslant \operatorname{Tr}(\varphi(e^{A/2}e^{B}e^{A/2}))$$

для любой φ, такой, что отображение $t \longmapsto \varphi(e^t)$ выпукло. Это результат Томпсона (C. Thompson, Inequalities and partial order on matrix spaces. — *Indiana Math. J.* **21** (1971), 469—480). Приведенное нами доказательство следствия теоремы XIII.103, похожее на одно из доказательств Томпсона, подсказано нам Дейфтом (P. Deift). Основную оценку $\|C^{1/2}DC^{1/2}\|_r \leqslant \|CD\|_r$ можно также доказать при помощи комплексной интерполяции (задача 168). Обсуждение истории неравенства Голдена — Томпсона содержится в замечаниях к § X.9.

Определители некоторых операторов в бесконечномерных пространствах были введены Фредгольмом (I. Fredholm, Sur une classe d'équations fonctionelles.—*Acta Math.* **27** (1903), 365—390). Он же ввел функцию $D_\mu(A)$ для этих случаев, но в терминах разложения, о котором говорится в задаче 153. Фредгольм рассматривал операторы A вида $(Af)(x) = \int_a^b K(x, y) f(y)\,dy$ и нашел явные формулы для $\operatorname{Tr}(\wedge^k(A))$, не пытаясь применять абстрактную полилинейную алгебру. Вот пример такого выражения:

$$\operatorname{Tr}(\wedge^k(A)) = \frac{1}{n!}\int_a^b \ldots \int_a^b K\begin{pmatrix} x_1 \ldots x_n \\ x_1 \ldots x_n \end{pmatrix} dx_1 \ldots dx_n,$$

где $K\begin{pmatrix} x_1 \ldots x_n \\ y_1 \ldots y_n \end{pmatrix} = \det(K(x_i, y_j))_{1 \leqslant i,\, j \leqslant n}$.

Работа Фредгольма оказала глубокое влияние на развитие функционального анализа; она привела к выделению абстрактного понятия гильбертова пространства и дала толчок построению теории компактных операторов. «Классическая» теория Фредгольма описана, например, в двух следующих книгах: F. Smithies, Integral Equations.— London, New York: Cambridge Univ. Press, 1965; W. Lovitt, Linear Integral Equations.— New York: Dover, 1924.

Теорема Лидского появилась в его статье: В. Р. Лидский, Несамосопряженные операторы со следом.— *ДАН СССР* **125** (1959), 485—487. Мы в нашем доказательстве следуем работе Саймона.

Формула Племеля—Смитиса получена Племелем (J. Plemelj, Zur Theorie der Fredholmschen Funktionalgleichung.— *Monat. Math. Phys.* **15** (1909), 93—128) и Смитисом (F. Smithies, The Fredholm theory of integral equations.— *Duke Math. J.* 8 (1941), 107—130).

В теорию регуляризованных определителей (задача 155) операторов из $\mathcal{J}_p$ внесли вклад Гильберт (D. Hilbert, Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen, Erste Miteilung.— *Nachr. Acad. Wiss. Göttingen Math. Phys. Kl.* **II** (1904), 49—91), Пуанкаре (H. Poincaré, Rémarques diverse sur l'équation de Fredholm.— *Acta Math.* **33** (1910), 57—86), Племель и Смитис (статьи, упомянутые выше), Карлеман (F. Carleman, Zur Theorie der linearen Integralgleichung.— *Math. Zeit.* **9** (1921), 196—217), Хилле и Тамаркин (статья, упомянутая в связи с теоремой Шура—Лалеско—Вейля); см. также первую книгу Гохберга и Крейна, книгу Данфорда и Шварца и статью: H. J. Brascamp, The Fredholm theory of integral equations for special types of compact operators on a separable Hilbert space.— *Compositio Math.* **21** (1969), 59—80. Эта теория оказалась полезной при изучении перенормировок в полевой теории Юкавы в двумерном пространстве-времени: см. E. Seiler, Schwinger functions for the Yukawa models in two dimensions with space-time cutoffs.— *Commun. Math. Phys.* 42 (1975), 163—182. Наш подход к $\det_n$ в задаче 155 использует некоторые идеи Зайлера. Теорема XIII.104, появившаяся в статье Саймона, есть абстрактная версия рассуждений из статьи: E. Seiler, B. Simon, On finite mass renormalization in the two-dimensional Yukawa model.— *J. Math. Phys.* **16** (1975), 2289—2293.

Распространенне теории Фредгольма на банаховы пространства было проведено в работах: A. F. Ruston, On the Fredholm theory of integral operators belonging to the trace class of a general Banach space.— *Proc. London. Math. Soc.* **53** (1951), 109—124; Direct products of Banach spaces and linear functional equations.— *Proc. London Math. Soc.* **1** (1953), 327—384; T. Lezinski, The Fredholm theory of linear equations in Banach spaces.— *Studia Math.* **13** (1953), 244—276; A. Grothendieck, La Théorie de Fredholm.— *Bull. Soc. Math. France* **84** (1956), 319—384. Теория операторов на произвольном банаховом пространстве (называемых ядерными), аналогичных операторам со следом, была развита Гротендиком (A. Grothendieck, Produits tensoriel topologique et espaces nucleaires.— *Mem. Amer. Math. Soc.* **16** (1955)). Гротендик построил пример ядерного оператора на $L^\infty(0, 1)$, для которого $\sum|\lambda_n(A)|^p=\infty$ при любом $p<2$, откуда следует, что теорема Шура — Лалеско — Вейля: $\sum|\lambda_n(A)|\leqslant\|A\|_1$ — в случае произвольного банахова пространства неверна. Более того, Джонсон, Маури, Кониг и Резерфорд (W. Johnson, B. Maury, H. Konig, J. R. Retherford, Eigenvalues of p-Summing and l_p-Type Operators in Banach Spaces.— *J. Funct. Anal.* **32** (1979), 353—380) показали, что если $\sum|\lambda_n(A)|<\infty$ для каждого ядерного оператора на банаховом пространстве X, то X топологически изоморфно гильбертову пространству! Ослабленные варианты неравенства Шура—Лалеско—Вейля и теоремы Лидского в случае общих банаховых пространств обсуждаются в мемуаре Гротендика, статье Джонсона и др. и в работе А. С. Маркуса и В. Н. Мацаева, Аналоги неравенств Вейля и теоремы о следах в банаховом пространстве.— *Матем. сб.* **86** (1971), 299—313.

Теоремы полноты для обобщенных собственных функций аккретивных операторов восходят к работе М. В. Келдыша, О собственных значениях и собственных функциях некоторых классов несамосопряженных уравнений.— *ДАН СССР* 77 (1951), 11—14. Дальнейшие результаты Келдыша, Келдыша—Лидского и Крейна—Гохберга подробно обсуждаются в гл. V первой из упоминавшихся книг Гохберга и Крейна. Наше обсуждение частично следует Данфорду и Шварцу.

Обсужденне примера 5 следует работе: B. Simon, The bound state of weakly coupled Schrödinger operators in one and two dimensions.— *Ann. Phys.*

97 (1976), 279—288. В ней утверждение, что $-d^2/dx^2+\lambda V$ обладает связанным состоянием при всех малых λ тогда и только тогда, когда $\int V(x)\,dx \leqslant 0$, доказано для всех V, таких, что $\int (|x|^2+1)|V(x)|\,dx < \infty$. Аналитическая часть теоремы XIII.110 не требует, чтобы носитель V был компактным; достаточно, что $\int e^{a|x|}|V(x)|\,dx < \infty$ для некоторого $a > 0$. В двумерном пространстве наличие у $-\Delta+\lambda V$ связанного состояния при всех малых λ эквивалентно условию $\int V(x)\,dx \leqslant 0$ только до тех пор, пока

$$\int |V(x)|^{1+\varepsilon}\,dx < \infty \quad \text{при некотором } \varepsilon > 0$$

и

$$\int |V(x)|(1+|x|^2)^{\varepsilon}\,dx < \infty \quad \text{при некотором } \varepsilon > 0.$$

Но в двумерном случае собственное значение $E(\lambda)$ *не аналитично* по λ в нуле. На самом деле $|E(\lambda)| \leqslant \exp(-1/a\lambda)$ с подходящим $a > 0$. Все эти результаты основаны на применении модифицированных определителей $\det_2$ для $\mathcal{J}_2$ (см. задачу 155). Дальнейшее обсуждение этих вопросов см. в работах: R. Blankenbecker, M. L. Goldberger, B. Simon, The bound states of weakly coupled long-range one-dimensional quantum Hamiltonians.—*Ann. Phys.* **108** (1977), 69—78; K. Klaus.—*Ann. Phys.* (to appear).

Наконец, заметим, что функция Йоста, обсуждавшаяся в § XI.8, есть определитель Фредгольма. Уравнение Липмана—Швингера для s-волны имеет вид

$$\varphi(\cdot, k) = \psi_0(\cdot, k) - (A_k\psi)(\cdot, k), \tag{207}$$

где A_k—интегральный оператор с ядром

$$k^{-1}\exp[ik(\max\{x, y\})]\sin[k(\min\{x, y\})]\,V(y).$$

Можно показать, что $\eta(k) = \det(1+A_{-k})$, а факторизация $S(k) = \eta(k)/\eta(-k)$ связана с мероморфным решением (207).

ЗАДАЧИ

†*1*. Докажите, что $\mu_n(A) \leqslant \mu_n(B)$ для любого n, если $A \leqslant B$ (в смысле определения § XIII.2).

2. Докажите с помощью принципа минимакса, что

$$|\mu_k(A) - \mu_k(B)| \leqslant \|A - B\|$$

для ограниченных самосопряженных операторов с μ_k, заданными теоремой XIII.1.

†*3*. Докажите теорему XIII.4.

†*4*. (a) Пусть $p = id/dx$ действует в $L^2(\mathbb{R})$. Докажите, что

$$p^2+x^2+\beta x^4 \leqslant C_1(p^2+x^2)^2 \leqslant C_2(p^2+x^2+\beta x^4)^2$$

для любого фиксированного $\beta > 0$.

(b) Выведите отсюда, что если $H=p^2+x^2+\beta x^4$, то

$$\lim_{N\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{N} a_i^{(n)}\varphi_i,\ H\left(\sum_{i=1}^{N} a_i^{(n)}\varphi_i\right)\right)=\mu_n(H),$$

где $\{\varphi_i\}_{i=1}^{N}$ — собственные функции оператора p^2+x^2, $\sum a_i^{(n)}\varphi_i$ — разложение n-й собственной функции H по φ_i.

5. Пусть $H=p^2+x^2+\beta x^{2m}$. Докажите применимость теоремы XIII.4, используя в качестве пробных функций собственные функции оператора p^2+x^2.

6. Найдите верхнюю границу энергии основного состояния гамильтониана $p^2+x^2+0{,}2x^4$, используя φ_1 и φ_3. С помощью неравенства Темпля найдите нижнюю границу. Сравните их с «точным» результатом и вычислениями по теории возмущений § XII.3.

7. Используя пробную функцию вида $\psi(\mathbf{r})=c\exp(-\alpha r^2)$ и изменяя α, вычислите оценку сверху для основного состояния оператора $-\Delta-r^{-1}$ и сравните ее с точным ответом.

8. Напишите программу для вычисления на ЭВМ нижнего собственного значения оператора $p^2+x^2+x^4$ с точностью до шестого знака.

9. Пусть $\lambda_n(c)$ есть n-е собственное значение оператора $-d^2/dx^2+x^2+cx^4$ при $c\geqslant 0$. Найдите постоянную $c_0>0$, такую, чтобы $\lambda_2(c)-\lambda_1(c)\geqslant c_0$ для всех c. [*Указание.* Сравните $\lambda_n(c)$ с собственными значениями операторов $-d^2/dx^2+x^2$ и $-d^2/dx^2+cx^4$ и воспользуйтесь принципом минимакса.]

10. Найдите и докажите аналог теоремы XIII.4 для возбужденных состояний.

11. (Теорема Релея.) Пусть $\mu_1, \ldots, \mu_n$ — собственные значения эрмитовой $n\times n$-матрицы и $\lambda_1, \ldots, \lambda_{n-1}$ — собственные значения ее сужения на $(n-1)$-мерное подпространство. Докажите, что $\mu_1\leqslant\lambda_1\leqslant\mu_2\leqslant\lambda_2\leqslant\ldots\leqslant\mu_{n-1}\leqslant\lambda_{n-1}\leqslant\mu_n$.

12. Предположим, что V — регулярное возмущение H_0 и что H_0 имеет дискретное невырожденное основное состояние. Пусть $E(\lambda)$ — энергия основного состояния оператора $H_0+\lambda V$, а $\psi(\lambda)$ — нормированный собственный вектор основного состояния. Пусть задан вектор $\varphi(\lambda)$, такой, что $\|\varphi(\lambda)\|^{-1}\varphi(\lambda)-\psi(\lambda)=O(\lambda^{n+1})$ в смысле H_0-граф-нормы и $\|\varphi(\lambda)\|=1+O(\lambda)$ (например, $\varphi(\lambda)$ может быть суммой n первых членов ненормированного ряда Релея — Шредингера).

(a) Докажите, что $(H(\lambda)-E(\lambda))\varphi(\lambda)=O(\lambda^{n+1})$.

(b) Докажите, что

$$(\varphi(\lambda),\ H(\lambda)^2\varphi(\lambda))\,\|\varphi(\lambda)\|^2-(\varphi(\lambda),\ H(\lambda)\varphi(\lambda))^2=O(\lambda^{2n+2}).$$

(c) Докажите, что $E(\lambda)-\|\varphi(\lambda)\|^{-2}(\varphi(\lambda),\ H(\lambda)\varphi(\lambda))=O(\lambda^{2n+2})$, используя неравенства Темпля.

Литература: E. Harrel, II. Princeton Univ. Thesis.— Princeton, N. J., 1976.

13. (a) Предположим, что P — проектор, $V>0$ — положительный, а H_0 — самосопряженный операторы. Докажите, что в смысле квадратичных форм $H_0+V\geqslant H_0+V^{1/2}PV^{1/2}$.

(b) Пусть A — самосопряженный оператор, $\operatorname{Ker} A=0$, и Q — конечномерный проектор, для которого $\operatorname{Ran} Q\subset D(V^{-1/2}A)$. Пусть $(QAV^{-1}AQ)^{-1}$ —

оператор, обратный к $QAV^{-1}AQ$ на $\operatorname{Ran} Q$. Докажите, что

$$P = V^{-1/2} AQ\,(QAV^{-1}AQ)^{-1}\,QAV^{-1/2}$$

— проектор, и выведите отсюда, что

$$H_0 + V \geqslant H_0 + AQ\,(QAV^{-1}AQ)^{-1}QA.$$

(c) Докажите, что для собственного вектора ψ_0 оператора H_0

$$H_0 + (\psi_0,\ V^{-1}\psi_0)^{-1}\,(\psi_0,\ \cdot)\,\psi_0 \leqslant H_0 + V.$$

[*Указание:* используйте $A = 1$, $Q = (\psi_0,\ \cdot)\,\psi_0$.]
Литература к (c): W. Thirring, Vorlesungen über Mathematische Physik, T.7: Quantenmechanik.— Universität Wien Lecture Notes, Section 2.9.

14. (a) Предположим, что $\sigma(H) \cap (a,\ b) = \varnothing$ для некоторого самосопряженного оператора H. Пусть φ лежит в $D(H)$ и $\|\varphi\| = 1$. Докажите, что

$$\left(\varphi,\ \left(H - \frac{a+b}{2}\right)^2 \varphi\right) \geqslant \left(\frac{a-b}{2}\right)^2.$$

(b) Выразите (a) через $\gamma = (\varphi,\ H\varphi)$ и $\eta = (\varphi,\ H^2\varphi) - (\varphi,\ H\varphi)^2$, так чтобы получить неравенство $\eta \geqslant (\gamma - a)(b - \gamma)$.

(c) Выведите отсюда, что для $\varphi \in D(H)$, таких, что $\eta < (\gamma - a)(b - \gamma)$, $\sigma(H) \cap (a,\ b) \neq \varnothing$.

15. (Обобщенное неравенство Темпля.) Предположим, что $\sigma(H) \cap (a,\ b)$ состоит из единственной точки λ. Пусть φ — такой пробный вектор, что $\varphi \in D(H)$ и

$$\eta < (\gamma - a)(b - \gamma), \tag{208}$$

где $\gamma = (\varphi,\ H\varphi)$, $\eta = (\varphi,\ H^2\varphi) - \gamma^2$.

(a) Докажите, что $\gamma \in (a,\ b)$.

(b) Пусть $a' = \gamma - (b - \gamma)^{-1}\eta$ и $b' = \gamma + (\gamma - a)^{-1}\eta$.
Докажите, что $a < a' < b' < b$.

(c) Пусть $a < a'' < a'$. Докажите, что $\eta < (\gamma - a'')(b - \gamma)$, и выведите отсюда, что $\sigma(H) \cap (a'',\ b) \neq \varnothing$ (воспользуйтесь задачей 14).

(d) Докажите обобщенное неравенство Темпля, т. е. выведите из (208) неравенство

$$\gamma - (b - \gamma)^{-1}\eta < \lambda < \gamma + (\gamma - a)^{-1}\eta.$$

Примечание. По поводу ссылок, касающихся этой задачи, см. замечания к § XIII.2.

†*16.* (a) Докажите, что

$$H_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)$$

в существенном самосопряжен на $\{u \mid u \in C_0^\infty(0,\ \infty)\}$, если $l \neq 0$ и $V \in C_0^\infty(0,\ \infty)$.

(b) Докажите, что $H_0 = -d^2/dr^2 + V(r)$ в существенном самосопряжен на $\{u \mid u \in C_0^\infty[0,\ \infty),\ u(0) = 0\}$.

†*17.* Пусть функция $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ имеет в своем носителе изолированные нули. Пусть $H_0 = -d^2/dx^2$ действует на естественной области определения. Докажите, что $|\varphi| \in Q(H_0)$.

18. (Оценка Калоджеро.) Пусть $V \in C_0^\infty[0,\ \infty)$ отрицателен. Пусть u — решение краевой задачи $u'' = Vu$, $u(0) = 0$, $u'(0) = 1$. Определим $\nu(r)$ равенством $\operatorname{tg}\nu(r) = |V(r)|^{1/2}\,u(r)/u'(r)$.

(a) Докажите, что ν удовлетворяет задаче

$$\nu'(r)=|V(r)|^{1/2}-{}^1/_2\,(V'(r)/|V(r)|)\cos^2\nu\,\mathrm{tg}\,\nu,$$
$$\nu(0)=0.$$

(b) Выведите отсюда, что для монотонных V справедлива оценка

$$N(V)\leqslant\frac{2}{\pi}\int_0^\infty|V(r)|^{1/2}\,dr.$$

19. (Оценка Баргмана.) Пусть u — решение уравнения $u''=[l(l+1)r^{-2}+V(r)]u$, $u(0)=0$.

(a) Определим $a_l(r)$ соотношением

$$u'(r)[r^{l+1}+a_l(r)r^{-1}]=u(r)[(l+1)r^l-la_l(r)r^{-l-1}].$$

Докажите, что

$$a_l'(r)=-(2l+1)^{-1}V(r)r^{-2l}[r^{2l+1}+a_l(r)]^2.$$

(b) Пусть $b_l(r)=a_l(r)/r^{2l+1}$. Докажите, что $b_l(0)=0$ и что в области, где $b>0$,

$$b_l'(r)\leqslant(2l+1)^{-1}r|V(r)|[b_l(r)+1]^2.$$

(c) Получите оценку Баргмана (теорема XIII.9(a)) для произвольных l.

20. (a) Используя вилку Неймана (§ 15), докажите, что для ограниченных V, имеющих компактный носитель, $-\Delta+\lambda V$ имеет не более одного отрицательного собственного значения при малых λ.

(b) Используя вилку Неймана, докажите, что для ограниченных V на $\mathbb{R}^n$, имеющих компактный носитель, $-\Delta+V$ имеет лишь конечное число отрицательных собственных значений.

21. Найдите потенциал V в $L^2(\mathbb{R})$, имеющий компактный носитель, отрицательный на некотором открытом множестве и такой, что $-d^2/dx^2+V$ не имеет отрицательных собственных значений.

***22.** Пусть V — функция на $\mathbb{R}$, такая, что $\int_{-\infty}^{\infty}r|V(r)|\,dr<\infty$. Докажите, что $-d^2/dx^2+V$ имеет не более $1+\int_{-\infty}^{\infty}r|V(r)|\,dr$ связанных состояний.

[*Указание.* Воспользуйтесь оценкой Баргмана и граничными условиями Дирихле.]

23. (a) Фиксируем l. Пусть V — центрально-симметричный потенциал с $n_l(V)=n$. Покажите, что $V=V_1+\ldots+V_n$, где носители V_i не пересекаются и $n_l(V_i)\geqslant1$. [*Указание:* учтите нули $u_l(r;\,E=0)$.]

(b) Предположим, что известно, что $n_l(V)=0$, если

$$\int_0^\infty f(x)\,g(V(x))\,dx<1$$

для фиксированных вещественных положительных f, g. Докажите, что для произвольных вещественных положительных f, g

$$n_l(V)\leqslant\int_0^\infty f(x)\,g(V(x))\,dx.$$

Литература: статья Глазера, Мартина, Грёссе и Тирринга, упомянутая в замечаниях к § 3.

24. (a) Пусть $n \geqslant 3$ и $V \leqslant 0$ почти всюду. Докажите, что $N(V)=0$ тогда и только тогда, когда норма $|V|^{1/2}(-\Delta)^{-1}|V|^{1/2}$ меньше 1.
(b) Пусть $n \geqslant 3$ и $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$. Покажите, что существует постоянная $C_{\alpha,n}$, такая, что $N(V)=0$, если $\| r^\alpha |V|^{1/2} \|_{n/(1-\alpha)} \leqslant C_{\alpha,n}$. [*Указание:* всмотритесь в доказательство теоремы Стрихартца и теоремы X.21.]
(c) Пусть $n_0(V)$ — число связанных состояний при нулевом моменте количества движения в $\mathbb{R}^3$. Докажите, что при $1/2 \leqslant \alpha < \infty$ существует постоянная $\tilde{C}_{\alpha,1}$, такая, что $n_0(V)=0$, если

$$\int r^{\alpha/(1-\alpha)} |V(r)|^{1/(2-2\alpha)}\, dr \leqslant \tilde{C}_{\alpha,1}.$$

(d) Получите оценку ГМГТ с точностью до постоянной.
Литература к (a) — (c): статья Глазера и др. и обзорная статья Саймона, упомянутые в замечаниях к § 3.

†*25.* (a) Пусть A — положительный самосопряженный оператор, а B — ограниченное в смысле форм возмущение A с нулевой относительной гранью. Предположим, что $[0,\infty) \subset \sigma(A+\lambda B)$ для всех $\lambda \in \mathbb{R}$. Докажите, воспользовавшись принципом минимакса, что $\mu_n(A+\lambda B)$ — монотонно убывающая непрерывная функция $\lambda \in (0,\infty)$.
(b) Предположим, что $\sigma_{\text{ess}}(A+\lambda B)=[0,\infty)$ для всех $\lambda \in (0,\infty)$. Докажите утверждение (a) с помощью теории возмущений гл. XII.

†*26.* Восполните детали доказательства теоремы XIII.10.
27. Получите оценку Жирарди — Римини:

$$N(V) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int \frac{V(x)\,V(y)}{|x-y|^2}\, d^3x\, d^3y.$$

28. (a) Пусть $V \in R$ и $\{P^\lambda_\Omega\}$ — спектральные проекторы оператора $-\Delta+\lambda V$. Пусть $\lambda > 1$. Докажите, что

$$\dim(\operatorname{Ran} P^\lambda_{(-\infty,0)}) \geqslant \dim(\operatorname{Ran} P^1_{(-\infty,0)}).$$

(b) Выведите неравенство

$$\dim(\operatorname{Ran} P^1_{(-\infty,0)}) \leqslant (4\pi)^{-2} \int |x-y|^{-2}\, |V(x)|\, |V(y)|\, d^3x\, d^3y.$$

†**29.* Докажите, что для $V, W \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ функция

$$\int d\mu_{x,y;\,t}\, V(\omega(s)) \exp\left(-\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right),$$

где $d\mu_{x,y;\,t}$ — условная мера Винера, непрерывна по x, y, t для всех $t>0$ и $x, y \in \mathbb{R}^n$. [*Указание.* Полезно провести все интегрирования по одному и тому же множеству путей, отображая пути ω, выходящие из 0 и возвращающиеся в 0 через время 1, в пути $\tilde{\omega}$, идущие из x в y за время t, полагая

$$\tilde{\omega}(s) = \omega(st^{-1}) + x + (y-x)\, st^{-1}.]$$

†*30.* (a) Предположим, что A — оператор со следом на $L^2(\mathbb{R}^n)$, ядро которого $K(x, y)$ поточечно положительно и непрерывно. Докажите, что

$\operatorname{Tr}(\dot{A}) = \int K(x, x)\,dx$. [*Указание*. Пусть $\{P_n\}$ — последовательность проекторов на конечномерные пространства кусочно постоянных функций на $\mathbb{R}^n$, такая, что $P_n \to I$ сильно. Представьте $\operatorname{Tr}(A)$ как $\lim\limits_{n\to\infty} \operatorname{Tr}(P_n A P_n)$ и вычислите его в явном виде.]

(b) Докажите, что при $W \in L^1(\mathbb{R}^n)$ оператор $W^{1/2}e^{-tH_0}$ есть оператор Гильберта—Шмидта. То же самое докажите для $W^{1/2}e^{-t(H_0+V)}$ при $W \in L^1(\mathbb{R}^n)$ и $V \geqslant 0$.

(c) Докажите (14).

31. (a) Пусть $N_\alpha(V)$ — число собственных значений оператора $-\Delta + V$, действующего в $L^2(\mathbb{R}^3)$, меньших $-\alpha$. С помощью оценки Бирмана—Швингера и неравенства Юнга докажите, что

$$N_\alpha(V) \leqslant (4\pi)^{-1}\left(\sqrt{2\alpha}\right)^{-1} \int |\min\{V(x) + \alpha/2, 0\}|^2\,dx.$$

(b) Пусть $E_1(V), \ldots, E_n(V)$ — отрицательные собственные значения $-\Delta + V$. Докажите, что

$$\sum_i |E_i(V)| = \int\limits_0^\infty N_\alpha(V)\,d\alpha.$$

(c) Получите оценку Либа—Тирринга

$$\sum_i |E_i(V)| \leqslant \frac{4}{15\pi} \int |V_-(x)|^{5/2}\,dx.$$

32. Пусть $S_\gamma(V)$ — сумма чисел $|E|^\gamma$, взятая по всем отрицательным собственным значениям $-\Delta + V$.

(a) Докажите, что $S_\gamma(V) = \gamma \int\limits_0^\infty E^{\gamma-1} N_E(V)\,dE$, если $\gamma > 0$, а $N_E(V)$ — число собственных значений, меньших $-E$.

(b) Докажите, что для $V \in C_0^\infty$, $W = -V_-$ и любого m

$$S_\gamma(V) \leqslant \gamma\Gamma(\gamma)(m+1) \int\limits_0^\infty t^{-\gamma} \operatorname{Tr}\left[\sum_{j=0}^m \binom{m}{j} (-1)^j e^{-t(H_0 + jW)}\right] dt,$$

где $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция Эйлера $\Gamma(\alpha) = \int\limits_0^\infty u^{\alpha-1} e^{-u}\,du$.

(c) Докажите, что если V — некоторая функция на $\mathbb{R}^n$ и γ — любое неотрицательное число, такое, что $\gamma + n/2 > 1$, то

$$S_\gamma(V) \leqslant C_{n,\gamma} \int |V_-(x)|^{n/2+\gamma}\,d^n x.$$

33. (a) С помощью оценки Цвикеля—Либа—Розенблюма докажите, что для $n \geqslant 3$

$$N_E(V) \leqslant C_n \int |(E+V)_-(x)|^{n/2}\,d^n x.$$

(b) Докажите, что для $V \in C_0^\infty$

$$\gamma \int_0^\infty dE \int |(E+V)_-(x)|^{n/2} E^{\gamma-1} d^n x = d_\gamma \int |V_-(x)|^{n/2+\gamma} d^n x,$$

где $d_\gamma = \gamma \int_0^1 (1-E)^{n/2} E^{\gamma-1} dE$.

(c) Дайте другое доказательство оценки в задаче 32(c).

Примечание. Оценки в задачах 31, 32(c), 33(c) при $\gamma > 0$ принадлежат Либу и Тиррингу: E. Lieb and W. Thirring, Inequalities for the moments of the eigenvalues of the Schrödinger equation and their relation to Sobolev inequalities. In: Studies in Mathematical Physics: Essays in Honor of Valentine Bargmann (E. Lieb, B. Simon and A. S. Wightman, eds.).— Princeton Univ. Press, 1976. Их метод доказательства проиллюстрирован в задаче 31.

34. (a) Пусть C — компактный оператор и $A(z) = z^{-1}C$. Покажите, что $(1 - A(z))^{-1}$ существует тогда и только тогда, когда z не является собственным значением C. Докажите, что утверждение теоремы XIII.13 может нарушаться, если вычет $A(z)$ является не оператором конечного ранга, а компактным оператором.

(b) Пусть $A(z) = \sum_{n=1}^\infty z^{-n} n P_n$, где $\{P_n\}$ — семейство проекторов ранга 1, причем $P_n P_m = 0$ при $n \neq m$. Докажите, что утверждение теоремы XIII.13 может нарушаться, если $A(z)$ имеет существенные особенности.

$^+$*35.* Докажите, что для любого замкнутого оператора $\sigma_{\text{ess}}(A)$ — замкнутое подмножество $\mathbb{C}$.

$^+$*36.* Докажите пункт (b) теоремы о сильном спектральном отображении (лемма 2, § 4).

37. Пусть A и B — положительные самосопряженные операторы, такие, что оператор $(A+1)^{-n} - (B+1)^{-n}$ компактен при некотором целом $n > 0$. Докажите, что $\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ess}}(B)$.

38. (a) Пусть A и C — замкнутые операторы с $D(C) \supset D(A)$. Докажите, что оператор $C(A-z)^{-1}$ компактен при некотором $z \in \rho(A)$ тогда и только тогда, когда он компактен при всех $z \in \rho(A)$.

(b) Докажите, что $C(A-z)^{-1}$ компактен тогда и только тогда, когда C — компактное отображение из $\langle D(A), \|\cdot\|_A\rangle$ в $\langle \mathcal{H}, \|\ \|\rangle$, где $\|\psi\|_A^2 = \|\psi\|^2 + \|A\psi\|^2$.

39. Пусть A самосопряжен и положителен. Ограниченное в смысле форм возмущение C оператора A называется относительно компактным в смысле форм тогда и только тогда, когда C — компактный оператор из $\mathcal{H}_{+1}$ в $\mathcal{H}_{-1}$. Докажите, что если C относительно компактен в смысле форм, то C имеет нулевую относительную грань в смысле форм и $\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ess}}(A+C)$.

40. Найдите симметрический оператор H с самосопряженными расширениями A и B, такими, что $\sigma_{\text{ess}}(A) \neq \sigma_{\text{ess}}(B)$. [*Указание.* Пусть h — симметрический оператор с индексами дефекта (1, 1), и пусть a и b — подходящие самосопряженные расширения. Возьмите $H = h \otimes I$, $A = a \otimes I$ и $B = b \otimes I$, где I — единичный оператор на l_2.]

41. Пусть $V\in L^q(\mathbb{R}^n)+L^\infty_\varepsilon(\mathbb{R}^n)$ с $q\geqslant\max\{n/2,\ 2\}$, если $n\neq 4$, и $q>2$, если $n=4$. Докажите, что V — относительно компактное возмущение $-\Delta$, так что $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0,\ \infty)$.

†*42.* С помощью теоремы XIII.17 докажите, что

$$\inf\{\Sigma_D\mid \#(D)=m+1\}\geqslant\inf\{\Sigma_D\mid\#(D)=m\},$$

и выведите отсюда, что

$$\inf\{\Sigma_D\mid\#(D)=2\}=\inf\{\Sigma_D\mid\#(D)\geqslant 2\}.$$

43. (a) Предположим, что $U(t)$ — однопараметрическая унитарная группа с инфинитезимальным генератором, имеющим лишь абсолютно непрерывный спектр. Пусть A — компактный оператор, такой, что $AU(t)=U(t)A$. Докажите, что $A=0$. [*Указание:* докажите, что $\operatorname*{w-lim}_{t\to\infty} U(t)=0$.]

†(b) Докажите, что операторы, отвечающие несвязным диаграммам (по любому правилу § 5), некомпактны. Подчеркнем, что движение центра масс отделено.

†*44.* (a) Пусть $V\in R$; покажите, что существуют $V^{(n)}\in C_0^\infty$, такие, что $\|V^{(n)}-V\|_R\longrightarrow 0$ при $n\longrightarrow\infty$.

(b) Пусть $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$; покажите, что существуют $V^{(n)}\in C_0^\infty$, такие, что $\|(H_0+1)^{-1/2}(V^{(n)}-V)(H_0+1)^{-1/2}\|\longrightarrow 0$ при $n\longrightarrow\infty$.

(c) Пусть $V_{ij}\in R+(L^\infty)_\varepsilon$, $1\leqslant i<j<N$; покажите, что существуют $V_{ij}^{(n)}\in C_0^\infty$, такие, что $H^{(n)}=H_0+\sum\limits_{i<j}V_{ij}^{(n)}$ сходится в смысле резольвентной нормы к $H=H_0+\sum\limits_{i<j}V_{ij}$.

45. (a) Пусть $V\in L^2(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)_\varepsilon$ и $\psi\in D(\Delta)$. Для любого $a\in\mathbb{R}^3$ положим $\psi_a(x)=\psi(x-a)$. Докажите, что $\lim\limits_{a\to\infty}\|V\psi_a\|=0$.

(b) Докажите, что $\lim\limits_{a\to\infty}\|(-\Delta+V-\lambda)\psi_a\|=\|(-\Delta-\lambda)\psi\|$, и выведите отсюда, что $[0,\ \infty)\subset\sigma(-\Delta+V)$.

(c) Пусть H — гамильтониан вида $H_0+\sum\limits_{i<j}V_{ij}$ с $V_{ij}\in L^2+(L^\infty)_\varepsilon$. Без помощи волновых операторов докажите, что $[\Sigma,\ \infty)\subset\sigma(H)$.

Примечание. Такой метод использовал Хунцикер в статье, упомянутой в замечаниях к § 5.

46. Пусть $\tilde H_0^{(N)}=\sum\limits_{i=1}^{N}(2m)^{-1}\Delta_i$ и $H^{(N)}=H_0^{(N)}+\sum\limits_{i<j}V(r_i-r_j)$ (все V_{ij} одинаковые). Предположим, что $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$. Пусть $\mathscr{H}^{(N)}_{\text{Fermi}}$ — подпространство $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$ функций, нечетных относительно замен координат, вызванных перестановкой любых двух частиц. Пусть $H_{\text{F}}^{(N)}=H^{(N)}\restriction\mathscr{H}^{(N)}_{\text{Fermi}}$. Докажите, что $\sigma_{\text{ess}}\left(H_{\text{F}}^{(N)}\right)=[\Sigma,\ \infty)$, где $\Sigma=\inf\sigma\left(H_{\text{F}}^{(N-1)}\right)$.

Примечание 1. При доказательстве аналога леммы 1 в нашем доказательстве теоремы ХВЖ легче применять метод Хунцикера (задача 45), чем волновые операторы.

Примечание 2. По поводу распространения результатов на другие симметрии относительно перестановок и другие группы симметрий см. статьи

Саймона, Балслева и Жислина и Сигалова, упомянутые в замечаниях к § 5.

47. (a) Предположим, что основная оценка (31) выполнена для плотного множества векторов φ. Докажите, что тогда $R(\lambda \pm i\varepsilon)\varphi \in D(A)$ для почти всех λ при всех φ ($\varepsilon \neq 0$ фиксировано) и (31) справедлива при всех φ.

(b) Предположим, что $\int_{-\infty}^{\infty} \| AR(\lambda \pm i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda < \infty$ для любого $\varphi \in \mathscr{H}$ при любом фиксированном $\varepsilon > 0$. Докажите, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \| AR(\lambda \pm i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda \leqslant C \|\varphi\|^2$$

с некоторой постоянной C для всех φ. [*Указание:* примените теорему о замкнутом графике к отображению $\varphi \longmapsto AR(\lambda + i\varepsilon)\varphi$ пространства $\mathscr{H}$ в $L^2(\mathbb{R}, d\lambda; \mathscr{H})$.]

(c) Предположим, что $\sup\limits_{\varepsilon>0} \int_{-\infty}^{\infty} \| AR(\lambda \pm i\varepsilon)\varphi\|^2 d\lambda < \infty$ для каждого φ.

Докажите, что A H-гладкий. [*Указание:* используйте (b) и принцип равномерной ограниченности.]

48. Пусть f — ограниченная борелева функция на $\mathbb{R}$; предположим, что $f(H)$ есть H-гладкий оператор для некоторого самосопряженного оператора H. Докажите, что $f(H) = 0$.

49. (a) Пусть оператор H самосопряженный, а A H-гладкий. Докажите, что A $|H|^{\alpha}$-ограничен для любого $\alpha > 1/2$. [*Указание:* используйте пункт (3) теоремы XIII.25 для доказательства ограниченности $(H^2+1)^{-\alpha/2}A^*$.]

(b) Пусть $H = -id/dx$ в $L^2(\mathbb{R})$. Докажите, что существуют неограниченные $\varphi \in Q(H)$.

(c) Найдите H-гладкий оператор A, который не ограничен относительно $|H|^{1/2}$. [*Указание:* используйте пример 1.]

50. Пусть H — оператор умножения на x в $L^2([\alpha, \beta], dx)$ с $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Предположим, что A ограничен и K — интегральное ядро A^*A. Докажите, что $\|A\|_H^2 = \|K\|_\infty$.

*51. Пусть H — оператор умножения на x в $L^2([\alpha, \beta], dx)$ с $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Предположим, что A ограничен и H-гладок. Докажите, что A^*A представим в виде (37). [*Указание.* Сначала покажите, что A^*x лежит в L^∞ для любого x, для которого $\|A^*x\|_\infty \leqslant C\|x\|_2$, а затем воспользуйтесь теоремой Данфорда — Петтиса (задача 33 к гл. V) и найдите ограниченную измеримую функцию F из $[\alpha, \beta]$ в $\mathscr{H}$, такую, что $(A^*x)(\lambda) = (F(\lambda), x)$.] *Литература:* статья Като в *Studia Math.* (см. замечания к § 7).

52. Пусть A и B — самосопряженные операторы в гильбертовых пространствах $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$ соответственно. Предположим, что C A-гладкий, а D — ограниченный оператор в $\mathscr{H}_2$. Докажите, что $C \otimes D$ является $(A \otimes I + I \otimes B)$-гладким.

53. В условиях теоремы XIII.26 докажите, что для любого $\lambda \in \mathbb{C}$, $|\lambda| \leqslant 1$,

$H_0+\lambda\sum_{i=1}^{n} C_i$ — строго m-аккретивная форма на $Q(H_0)$ и для спектра соответствующего оператора H выполнено включение $\sigma(H)\subset\sigma(H_0)$, причем $\sup\||C_i|^{1/2}(H-z)^{-1}|C_j|^{1/2}\|<\infty$ для всех i, j (продолжение в следующей задаче).

*54. (Продолжение задачи 53.) Пусть $R(\mu)$ — резольвента H_0, $R(\mu;\lambda)$ — резольвента $H(\lambda)=H_0+\lambda\sum_{j=1}^{n} C_j$. Введем $W^{\pm}(\lambda)$ равенством

$$(\varphi, W^{\pm}(\lambda)\psi)=(\varphi,\psi)\mp$$
$$\mp\frac{\lambda}{2\pi i}\sum_{j=1}^{n}\int_{-\infty}^{\infty}\left(C_j^{1/2}R(\mu\pm i0)\varphi,\ |C_j|^{1/2}R(\mu\mp i0;\lambda)\psi\right)d\mu.$$

Докажите, что

(a) $W^{\pm}(\lambda)$ аналитичны в области $|\lambda|<1$;
(b) $W^{\pm}(\lambda)$ обратимы и $H(\lambda)=W^{\pm}(\lambda)H_0W^{\pm}(\lambda)^{-1}$;
(c) если λ вещественно, то $W^{\pm}(\lambda)=\Omega^{\pm}(\lambda)$.

55. Пусть A и H_0 — самосопряженные операторы и $\operatorname{Ker} A=\{0\}$. Докажите, что для любых положительных $n\neq m$ по крайней мере один из операторов A^n и A^{-m} H_0-гладкий.

56. Пусть $V\in R$ и $\|V\|_R<4\pi$. Докажите, что волновые операторы осуществляют унитарную эквивалентность между $-\Delta$ и $-\Delta+V$ и, в частности, что множество состояний рассеяния полно.

57. (a) Пусть $H_n=H_0+A_n^*B_n$, где B_n H_0-гладкий, а A_n H_n-гладкий. Предположим, что $\sup_n\|A_n\|_{H_n}<\infty$ и $\lim_{n\to\infty}\|B_n\|_{H_0}=0$. Докажите, что $\Omega_n^{\pm}=\operatorname{s-lim}_{t\to\mp\infty}e^{itH_n}e^{-itH_0}$ *равномерно* сходится к I. В частности, проверьте равномерную непрерывность $\Omega^{\pm}(\lambda)=\operatorname{s-lim}_{t\to\mp\infty}e^{it(H_0+\lambda C)}\times$ $\times e^{-itH_0}$ для $\lambda\in(-1, 1)$ в контексте теоремы XIII.26.

(b) Пусть $V_n\longrightarrow V$ в норме Рольника. Докажите, что соответствующие S-матрицы сходятся сильно. [*Указание.* Представьте V_n в виде W_n+Y_n, а V — в виде $W+Y$, так чтобы $Y_n\longrightarrow Y$ в $L^1\cap R$, $W_n\longrightarrow W$ в R и $\sup_n\|W_n\|_R<4\pi$.]

58. (a) Пусть H_0 — оператор в $L^2[0,\infty)$, который представляет собой замыкание $-d^2/dx^2$, определенного на $\{u\in C_0^{\infty}[0,\infty)\mid u(0)=0\}$. Пусть $E\notin\sigma(H_0)$ и

$$K_E(x, y)=E^{-1/2}\sin\left[\sqrt{E}\min\{x, y\}\right]e^{i\sqrt{E}\max\{x, y\}},$$

где $\sqrt{E}$ — квадратный корень с $\operatorname{Im}\sqrt{E}>0$. Докажите, что

$$[(H_0-E)^{-1}\varphi](y)=\int_0^{\infty}K_E(x, y)\varphi(y)\,dy.$$

(b) $|K_E(x, y)|\leqslant\sqrt{xy}$.

(c) Пусть V — измеримая функция на $[0, \infty)$ с $\int_0^\infty x\,|V(x)|\,dx < \infty$. Тогда

$$\sup_{E \in \mathbf{R}} \| |V|^{1/2} (H_0 - E)^{-1} |V|^{1/2} \| < \infty.$$

(d) Если $\int_0^\infty x\,|V(x)|\,dx < 1$, то H_0 и $H_0 + V$ унитарно эквивалентны, а волновые операторы осуществляют эту эквивалентность.

59. Пусть A и H — ограниченные самосопряженные операторы и $R(\mu) = (H - \mu)^{-1}$. Докажите, что

$$|\varepsilon|\,|(R(\lambda + i\varepsilon)\varphi,\ [H, A]\, R(\lambda + i\varepsilon)\varphi)| \leqslant \|A\| \|\varphi\|^2,$$

и с помощью этого неравенства докажите, что $(i[H, A])^{1/2}$ H-гладкий, если $i[H, A] \geqslant 0$.

60. Пусть A и B — ограниченные самосопряженные операторы и $c > 0$ — число. Докажите двумя способами, что $i[A, B] \geqslant cI$ не верно:

(a) применяя теорию гладких возмущений;

(b) проделывая прямые вычисления (рассмотрите $e^{itA} B e^{-itA}$).

61. Распространите теорему Като — Путнама на неограниченные H, понимая в этом случае $i[H, A] > 0$ как неравенство $i(A\varphi, H\varphi) - i(H\varphi, A\varphi) > 0$ для всех $\varphi \in D(H)$, $\varphi \neq 0$.

†*62*. Предположим, что $f(t)$ — равномерно непрерывная функция на $\mathbf{R}$ со значениями в банаховом пространстве. Предположим также, что $\int_{-\infty}^{\infty} \|f(t)\|^p dt < \infty$ для некоторого $p < \infty$ и f сильно дифференцируема с равномерно ограниченной производной. Выведите отсюда, что $\lim_{t \to \infty} f(t) = 0$.

†*63*. Проведите вычисления в доказательстве теоремы XIII.29.

†*64*. Восполните детали доказательства теоремы XIII.32.

65. Повторяя доказательство пункта (a) теоремы XIII.33, докажите, что если $H_0\varphi = \lambda\varphi - V\varphi$ с $\lambda > 0$, то $\varphi \in L^2_\delta$ для всех δ.

†*66*. (a) Докажите, что $(-\Delta - \mu)^{-1}$ — ограниченный оператор из L^2_δ в L^2_δ при любом δ и любом $\mu \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R}$. [*Указание:* докажите нужный факт для $\delta > 0$ последовательно в $[0, 1]$, $(1, 2]$, ...]

(b) Завершите доказательство леммы 1 § 8.

(c) Докажите ограниченность $(-\Delta + 1)^{-1} \partial/\partial x_i$ как отображения из L^2_δ в L^2_δ для любого δ.

†*67*. Проверьте оценку (62).

68. Пусть $\delta > n + 1/2$. Докажите, что для любых $b > a > 0$ существует постоянная C, такая, что для всех $\varphi \in \mathscr{S}(\mathbf{R}^m)$ и всех $\lambda \in [a, b]$

$$\|(-\Delta - \lambda - i0)^{-n} \varphi\|_{-\delta} \leqslant C \|\varphi\|_\delta.$$

69. Пусть $\|A\|_{\delta,\,-\delta}$ — норма A как отображения L^2_δ в $L^2_{-\delta}$. Пусть $\delta > 1/2$. Докажите, что для любого $\alpha < \min\{1,\ \delta - 1/2\}$ функция $(H_0 - \mu - i0)^{-1}$ удовлетворяет условию Гёльдера порядка α как функция μ со значениями в $\mathcal{L}(L^2_\delta,\ L^2_{-\delta})$, т. е. для любого $\mu > 0$ существуют такие C и ε, что при $|\mu - \mu'| < \varepsilon$

$$\|(H_0 - \mu' - i0)^{-1} - (H_0 - \mu - i0)^{-1}\|_{\delta,\,-\delta} \leqslant C\,|\mu - \mu'|^{\alpha}.$$

*70. Пусть V — потенциал Агмона. Пусть $a_1, \ldots, a_n$ таковы, что $\sum\limits_{j=1}^{n} \partial_j a_j = 0$ (в смысле обобщенных функций) и $|a_j(x)| \leqslant C_j (1 + |x|^2)^{-1/2-\varepsilon}$. Пусть

$$H = -\Delta + 2i \sum_{j=1}^{n} a_j \partial_j + \sum_{j=1}^{n} a_j^2 + V.$$

Докажите, что $\sigma_{\rm sing}(H) = \varnothing$ и что $\Omega^{\pm}(H,\ H_0)$ существуют и полны. [*Указание:* постройте теорию, аналогичную теореме XIII.33.]

*71. Пусть $V(x) = (1 + |x|^2)^{-1/2-\varepsilon}\, W(x)$, где W — относительно компактное в смысле форм возмущение $-\Delta$. Докажите, что теорема XIII.33 остается справедливой.

72. Пусть $A \geqslant 0$ — положительный самосопряженный оператор и $\mathcal{H}_{+1} \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{H}_{-1}$ — соответствующая шкала пространств. Пусть $\{U(s)\}$ — унитарная группа на $\mathcal{H}$, в которой каждый оператор $U(s)$ лежит в $\mathcal{L}(\mathcal{H}_{+1},\ \mathcal{H}_{+1})$. Пусть $V \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_{+1},\ \mathcal{H}_{-1})$. Положим $V(s) = U(s)\,V\,U(s)^{-1}$ для $s \in \mathbb{R}$. Докажите, что если $V(s)$ можно продолжить до $\mathcal{L}(\mathcal{H}_{+1},\ \mathcal{H}_{-1})$-значной аналитической функции в окрестности $s = 0$, то ее можно продолжить и в полосу $\{s \mid |\operatorname{Im} s| < \alpha\}$.

73. (a) Пусть H_0 — положительный самосопряженный оператор и V — симметрический оператор с $D(V) \supset D(H_0)$. Предположим, что $V(H_0 + 1)^{-1}$ — компактный оператор. Докажите, что $(H_0 + 1)^{-1/2}\, V\, (H_0 + 1)^{-1/2}$ компактен. [*Указание:* воспользуйтесь интерполяцией.]

(b) Будем говорить, что оператор V в $L^2(\mathbb{R}^3)$ принадлежит классу C_α, тогда и только тогда, когда

(1) V — симметрический оператор с $D(V) \supset D(H_0)$, где $H_0 = -\Delta$;

(2) $V(H_0 + 1)^{-1}$ компактен;

(3) семейство операторов $\tilde{F}(\theta) = u(\theta)\, V u(\theta)^{-1} (H_0 + 1)^{-1}$, определенных для $\theta \in \mathbb{R}$, допускает продолжение до аналитической операторно-значной функции в полосе $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \alpha\}$.

Докажите, что $C_\alpha \subset \mathcal{F}_\alpha$.

†74. Восполните детали в примере 1 § 10.

75. Пусть A — самосопряженный оператор и $\{U(s) = e^{isA}\}$ — соответствующая унитарная группа. Пусть $\psi \in C^\infty(A)$ и $\sum\limits_{n=0}^{\infty} t^n \|A^n \psi\|/n! < \infty$ при $|t| < \alpha$. Докажите, что $f(s) = e^{isA}\psi$ имеет аналитическое продолжение в полосу $\{s \mid |\operatorname{Im} s| < \alpha\}$. Обратно, если $f(s)$ имеет такое продолжение, докажите, что $\sum\limits_{n=0}^{\infty} t^n \|A^n \psi\|/n! < \infty$, когда $|t| < \alpha$.

†76. Проведите рассуждения, основанные на связности, которые необходимы в доказательстве теоремы XIII.36 для доказательства следующего факта: пусть γ — кривая в B_α и $\lambda \notin \sigma_{ess}(H(\gamma(t)))$ при любом t; тогда либо λ лежит как в $\sigma_d(\gamma(0))$, так и в $\sigma_d(\gamma(1))$, либо не лежит ни в одном из этих множеств.

†77. Восполните детали доказательства предложения 2 § 10.

†78. Докажите, что в предложениях теоремы XIII.37

$$\{\mu+e^{-2\theta}\lambda \mid \mu\in\Sigma(\theta),\ \lambda\in[0,\ \infty)\}\subset\sigma_{ess}(\theta),$$

действуя следующим образом:

(a) сначала предположите, что каждый $V_{ij}\in C_\alpha$ (см. задачу 73). [*Указание:* см. задачу 45.]

(b) В случае $V_{ij}\in\mathcal{F}_\alpha$ воспользуйтесь предельным переходом.

†79. Восполните детали доказательства теоремы XIII.37.

†80. Докажите лемму 1 (b) § 11.

†81. Пусть $V\in M_\sigma^{(n)}$ с $\sigma > n/2$, $\sigma\geqslant 1$. Докажите, что $V \lll -\Delta$.

†82. Докажите, что в предложениях теоремы XIII.38 вложения $C^\infty(\tilde{H})\subset C_\theta$ (или C_θ^1) непрерывны.

83. Пусть $(-\Delta+V)\psi=E\psi$ в смысле обобщенных функций, и пусть V принадлежит классу C^∞ на открытом множестве Ω в R^n. Используя идеи теоремы об эллиптической регулярности, докажите, что тогда и ψ принадлежит классу C^∞ на Ω.

84. Найдите пример, показывающий, что лемму О'Коннора нельзя распространить на бесконечномерные проекторы $P(0)$.

85. Докажите, что в предположениях леммы О'Коннора $P(\alpha)$ всегда допускает аналитическое продолжение в область $\tilde{D}=\{\alpha \mid \operatorname{Im}\alpha=\operatorname{Im}\alpha_0$ для некоторого $\alpha_0\in D\}$.

†86. (a) Пусть $0<a<b$. Докажите, что существуют *единичные* векторы $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_k$ в R^n, такие, что для всех $\mathbf{x}\in R^n$

$$\exp(a\,|\mathbf{x}|)\leqslant\sum_{j=1}^{k}\exp(b\mathbf{e}_j\cdot\mathbf{x}).$$

(b) Проверьте вычисления существенного спектра $H(\alpha)$ в доказательстве теоремы XIII.40.

(c) Покажите, что $\sigma_{ess}(H(\alpha))\subset\{\lambda \mid \operatorname{Re}\lambda\geqslant\Sigma-(2M)^{-1}\,|\operatorname{Im}\alpha\,|^2\}$.

(d) Завершите доказательство теоремы XIII.40.

87. Докажите, что в предположениях теоремы XIII.42

$$|\psi(\zeta)-\psi(\zeta')|\leqslant C_\varepsilon\exp[-(a-\varepsilon)\min\{r,\ r'\}]\,|\zeta-\zeta'|^\theta,$$

если $\theta<\min\{1,\ 2-3/\sigma\}$. Здесь r (соответственно r') — радиус инерции конфигурации ζ (соответственно ζ').

†88. Восстановите пропущенный шаг доказательства теоремы XIII.42.

89. (a) Пусть A и B — полуограниченные операторы в гильбертовом пространстве с $Q(A) \subset Q(B)$. Предположим, что $B - A$ строго положителен в том смысле, что $(\psi, (B-A)\psi) > 0$ для всех $\psi \neq 0$, лежащих в $Q(A) \cap Q(B)$. Предположим, что $\mu_1(A)$ — изолированное собственное значение конечной кратности. Докажите, что $\mu_1(A) < \mu_1(B)$. Приведите пример ситуации, когда $\mu_1(A)$ лежит в существенном спектре и $\mu_1(A) = \mu_1(B)$.

(b) Дайте прямое доказательство того, что для центрально-симметричного потенциала V основное состояние оператора $-\Delta + V$, если оно существует, есть s-состояние и не имеет нулей.

†90. Восполните детали примера 2 § XIII.12.

91. Пусть H_0 — оператор, порождающий усиливающую положительность полугруппу, а $-V$ — сохраняющий положительность ограниченный оператор. Докажите, что

(i) $(H_0 + V + \mu)^{-1}$ усиливает положительность для всех достаточно больших μ;

(ii) $\exp(-t(H_0+V))$ усиливает положительность для всех $t > 0$.

92. Пусть $H_0 = -\Delta$, V есть H_0-ограниченный оператор умножения с относительной гранью < 1 и W — оператор Гильберта—Шмидта с отрицательным ядром. Докажите, что $H_0 + V + W$ обладает невырожденным строго положительным основным состоянием, если на дне спектра лежит собственное значение этого оператора.

*93. Найдите положительный, сохраняющий положительность и эргодический оператор, который не усиливает положительности. [*Указание:* ищите среди 3×3-матриц.]

94. Найдите положительный оператор H_0, для которого $(H_0 + \mu)^{-1}$ сохраняет положительность лишь для некоторых μ. [*Указание:* ищите среди 3×3-матриц.]

95. Пусть $H(\lambda) = -d^2/dx^2 + x^2 + \lambda/x^4$ с $\lambda > 0$ и областью определения $C_{00}^{\infty}(\mathbb{R})$, состоящей из C_0^{∞}-функций с носителем, отделенным от нуля.

(a) Докажите, что $H(\lambda)$ в существенном самосопряжен.

(b) Докажите, что спектр $H(\lambda)$ чисто дискретен.

(c) Докажите, что наинизшее собственное значение $H(\lambda)$ вырожденно.

(d) Почему это не противоречит теореме XIII.46?

(e) Почему $H(\lambda)$ не может сходиться к $-d^2/dx^2 + x^2$ в сильном резольвентном смысле при $\lambda \downarrow 0$? К чему он сходится?

†96. Восполните детали доказательства первого критерия Бёрлинга—Дени.

97. (a) Пусть A — конечная матрица, не обязательно симметричная, но такая, что $a_{ij} \leq 0$ при $i \neq j$. Докажите, что $\exp(-tA)$ — матрица с положительными элементами для всех $t > 0$. [*Указание.* Представьте A в виде $B + D$ с диагональной матрицей D и такой B, что $b_{ij} \leq 0$ для всех i, j, и воспользуйтесь формулой Троттера.]

(b) Пусть A — конечная матрица, не обязательно симметричная, но такая, что e^{-tA} есть матрица с положительными элементами для всех $t > 0$. Докажите, что $a_{ij} \leq 0$ при всех $i \neq j$. [*Указание:* воспользуйтесь равенством $A = \lim_{t \downarrow 0} (1 - e^{-tA})/t$.]

98. Предположим, что $H \geqslant 0$. Пусть $\{F_n\}$ — семейство функций на $\mathbb{C}$ (соответственно $\mathbb{R}$), таких, что $|F_n(z)| \leqslant |z|$ и что для всех $f \in Q(H)$ (соответственно вещественнозначных) $F_n(f) \in Q(H)$ и $(F_n(f), HF_n(f)) \leqslant (f, Hf)$. Пусть $F_n \longrightarrow F$ поточечно. Докажите, что для всех $f \in Q(H)$ всегда $F(f) \in Q(H)$ и $(F(f), HF(f)) \leqslant (f, Hf)$.

99. Пусть H — лапласиан с граничными условиями Дирихле или Неймана. Покажите, что H удовлетворяет первому и второму критериям Бёрлинга — Дени. [*Указание:* воспользуйтесь задачей 98 и приблизьте $|z|$ и $z \wedge 1$ гладкими F_n.]

†*100.* Представьте (77) в форме (76).

†*101.* Покажите, что правая часть (79) определяет непрерывный линейный функционал на $\{\varphi \in \mathscr{S} \mid \varphi(0) = 0 = \partial_i \varphi(0)\}$, если

$$\int\limits_{0<|\lambda|<1} |\lambda|^2 d\sigma + \int\limits_{|\lambda| \geqslant 1} d\sigma < \infty.$$

†*102.* (a) Пусть $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ и $\int f(x)\,dx = \int x f(x)\,dx = 0$. Докажите, что существует $g \in C_0^\infty$, такая, что $f = g''$.

(b) Пусть $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Представим точку из $\mathbb{R}^n$ в виде $\langle x, y \rangle$, где $x \in \mathbb{R}^{n-1}$, $y \in \mathbb{R}$. Предположим, что

$$\int f(x, y)\, d^{n-1}x\, dy = 0 = \int y f(x, y)\, d^{n-1}x\, dy = \int x_i f(x, y)\, d^{n-1}x\, dy.$$

Найдите функции $a_1, a_2 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{n-1})$, $\eta_1, \eta_2 \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, такие, что

$$\int a_i(x)\, d^{n-1}x = \int x_j a_i(x)\, d^{n-1}x = 0, \quad i = 1, 2,\ j = 1, \ldots, n-1,$$

и что функция

$$g(x, y) = f(x, y) - \sum_{i=1}^{2} a_i(x)\, \eta_i(y)$$

при любом x удовлетворяет равенству

$$\int g(x, y)\, dy = \int y g(x, y)\, dy = 0.$$

(c) Докажите по индукции, что любую такую f можно представить в виде суммы $\sum\limits_{i=1}^{n} \partial^2/\partial x_i^2 f_i$ с $f_i \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

(d) Докажите, что любая $\varphi \in \mathscr{S}$ с $\varphi(0) = 0 = \partial_i \varphi(0)$ (для всех i) есть сумма функций вида $\lambda_j \lambda_i \psi$, $\psi \in \mathscr{S}$.

†*103.* Покажите, что определенная в доказательстве теоремы XIII.53 мера $d\sigma$ обладает свойством $\int\limits_{|\lambda| \geqslant 1} d\sigma(\lambda) < \infty$.

†*104.* Рассмотрите пример 2 § XIII.13 во всех подробностях.

†*105.* Докажите, что любое решение в классе обобщенных функций радиального уравнения Шредингера (88) на $(0, \infty)$ с $E > 0$ есть линейная комбинация двух решений Йоста.

†*106.* Проведите подробное доказательство теоремы XIII.58, сделав строгими формальные операции над $G(m, r)$.

107. Постройте явно потенциал V, гладкий вне $r=0$, и собственную функцию ψ, не лежащую в области определения D инфинитезимального генератора группы масштабных преобразований. [*Указание:* модифицируйте пример Вигнера—фон Неймана.]

108. Пусть V—сумма потенциала отталкивания и однородного потенциала степени $-\alpha$, $0<\alpha<2$. Докажите, что у $-\Delta+V$ нет положительных собственных значений.

109. Пусть заданы комплексные числа $a_1, a_2, \ldots$. Докажите, что существует не более чем одна аналитическая в $\{z \mid \operatorname{Re} z>0\}$ функция f, такая, что $f(n)=a_n$, $n=1, 2, \ldots$, и $|f(z)| \leqslant C_1 \exp(C_2|z|)$ для некоторой постоянной $C_2<\pi$. [*Указание:* если f_1 и f_2—две такие функции, примените теорему Карлсона к $(f_2-f_1)/\sin \pi z$.]

110. Докажите, что правая часть (91) конечна, если $\psi \in D(-\Delta)$.

111. (a) Пусть $c>-1/4$ и $A_c f=-f''+cx^{-2}f$. Покажите, что для подходящей постоянной d и всех $\alpha \in \mathbb{R}$, $f \in C_0^\infty(0, 1)$

$$\int_0^1 x^\alpha |f(x)|^2\, dx \leqslant d \int_0^1 x^\alpha |(A_c f)(x)|^2\, dx,$$

(b) Пусть $n \geqslant 3$ и носитель $h \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ лежит в $\{x \mid 0<|x|<1\}$. Докажите, что существует постоянная D, не зависящая от h и такая, что при всех α

$$\int |x|^\alpha |h(x)|^2\, d^n x \leqslant D \int |x|^\alpha\, |\Delta h(x)|^2\, d^n x.$$

(c) Докажите теоремы XIII.63 и XIII.64 для всех $n \geqslant 3$.

112. (a) Докажите теорему XIII.57 для $n=2$, используя результаты для $n=3$. [*Указание:* берите функции, постоянные в одном направлении.]

(b) Докажите теоремы XIII.63 и XIII.57 для $n=2$, показав, что для любой $h \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})$ и $\alpha>0$

$$\int |x|^{-\alpha-2}\, |h(x)|^2\, d^2x \leqslant \alpha^{-1} \operatorname{Re}\left[\int |x|^\alpha\, \overline{h(x)}\, (-\Delta h)(x)\, d^2x\right].$$

[*Указание:* воспользуйтесь тем, что $\int (|x|^{\alpha/2} h(x))\, [-\Delta (|x|^{\alpha/2} h(x))] \times$ $\times d^2x \geqslant 0$.]

113. (a) Пусть $f \in C_0^\infty(0, 1)$ и $g=-f''+cx^{-2}f$ для некоторой $c>-1/4$. Докажите, что для любого α

$$\int_0^1 r^\alpha |f'(r)|^2\, dr \leqslant \int_0^1 r^\alpha |g(r)|^2\, dr.$$

•(b) Докажите, что для $n \geqslant 3$ и любой h класса C^∞ с носителем в $\{x \mid 0<|x|<1\}$

$$\int |x|^\alpha\, |\nabla h|^2\, dx \leqslant 2 \int |x|^\alpha\, |\Delta h|^2\, dx.$$

(c) Докажите теорему о единственности продолжения операторов Шредингера с магнитным полем.

Литература: статья Хейнца, упомянутая в Замечаниях.

(d) Восполните детали доказательства теоремы XIII.62.

114. Докажите, что замкнутое подпространство метрического пространства компактно тогда и только тогда, когда для любого ε его можно покрыть конечным числом ε-шаров.

115. Пусть A — самосопряженное расширение с периодическими граничными условиями сужения $id/dx \upharpoonright C_0^\infty(-\pi, \pi)$ на $L^2(-\pi, \pi)$. Дайте прямое доказательство компактности множества

$$S = \{\psi \in L^2(-\pi, \pi) \mid \|\psi\| \leqslant 1, \ \|A\psi\| \leqslant 1\}.$$

**116.* Дайте другое доказательство теоремы XIII.65, действуя следующим образом.

(a) Пусть $H(p) = \min\left\{|p|, \operatorname*{ess\,min}_{|q| \geqslant p/2} \sqrt{G(q)}\right\}$. Докажите, что для $\psi \in S$ (S — множество, описанное в теореме XIII.65) и $\eta \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$

$$\int H(p)^2 |\widehat{(\eta\psi)}(p)|^2 d^n p \leqslant (2\pi)^n 4 \left(\int (1 + 2|p|) |\hat{\eta}(p)| d^n p\right)^2.$$

[*Указание:* докажите, что $H(a+b) \leqslant 2|a| + \sqrt{G(b)}$.]

(b) Выберите R и η с носителем в ящике с ребром R так, чтобы если $\psi \in S$ и $\psi_1 = \eta\psi$, то $\|\psi - \psi_1\|_2 \leqslant \varepsilon/4$.

(c) Выберите $R_0 > R$ таким, чтобы для $|k_l| \leqslant \pi/R_0$ и $\varphi_k(x) = \exp(-ik \cdot x)\psi_1(x)$ было $\|\varphi_k - \psi_1\| \leqslant \varepsilon/4$.

(d) Пусть $a_m(k)$ — коэффициенты ряда Фурье φ_k как функции в ящике с ребром R_0. Докажите, что для некоторой постоянной C_1, не зависящей от $\psi \in S$,

$$\sum_m \int_{|k_l| \leqslant \pi/R_0} H\left(k + \frac{2\pi m}{R_0}\right)^2 |a_m(k)|^2 dk \leqslant C_1.$$

(e) Найдите C_2, не зависящую от $\psi \in S$, и некоторое k так, чтобы $\|\varphi_k - \psi\| \leqslant \varepsilon/2$ и

$$\sum_m H\left(\frac{2\pi}{R_0}(|m| - 1)\right)^2 |a_m(k)|^2 \leqslant C_2.$$

Пусть $\psi_2 = \varphi_k$ для этого специального выбора k.

(f) Найдите не зависящее от ψ число N, такое, чтобы обрезанный ряд Фурье ψ_3 для ψ_2 удовлетворял неравенству $\|\psi_2 - \psi_3\| \leqslant \varepsilon/4$.

(g) Закончите доказательство теоремы.

117. Получите критерий Реллиха как следствие критерия Рисса.

118. Пусть $S \subset l_p$, $1 \leqslant p < \infty$. Докажите, что S компактно тогда и только тогда, когда (1) $\sup_{f \in S} \|f\|_p < \infty$ и (2) для любого ε существует такое N, что $\sum_{|n| \geqslant N} |f_n|^p \leqslant \varepsilon$ для всех $f \in S$.

119. (Теорема Стрихартца для форм.) Пусть $s \geqslant 3$. Докажите следующие утверждения об операторе умножения V в $L^2(\mathbb{R}^3)$.

(a) Если $V \in L^{s}_{w}$, то

$$\| V (I - \Delta)^{-1/2} \varphi \|_2 \leqslant C \| V \|_{s/2,\ w} \| \varphi \|_2.$$

(b) Если $V \in L^{s/2}_{w}$, то V есть ограниченное в смысле форм возмущение оператора $-\Delta$.

(c) Если $V \in L^{s/2}$, то относительная грань равна нулю.

120. Докажите теорему XIII.68, показав, что каждый член ряда Неймана для возмущенной резольвенты компактен.

†*121.* Восполните детали доказательства теоремы XIII.70.

122. Докажите, что если A и B — положительные самосопряженные операторы в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$ и $B \leqslant A$, то для любого замкнутого подпространства $\mathscr{H}_0$ в $\mathscr{H}$ с $\mathscr{H}_0 \cap D(A)$ плотным в $\mathscr{H}_0$, $B_0 \leqslant A_0$, где A_0 и B_0 — фридрихсовы расширения $A \restriction \mathscr{H}_0$, $B \restriction \mathscr{H}_0$.

123. Цель этой задачи — дать другое доказательство теоремы XIII.73.

(a) Покажите, что достаточно доказать, что из $f_n \in C_0^\infty(\Omega)$ и $\| f_n \|_m \leqslant 1$ вытекает существование сходящейся по $\|\cdot\|_j$-норме подпоследовательности последовательности $\{f_n\}$.

(b) Пусть $f_n \in C_0^\infty(\Omega)$, $\| f_n \|_m \leqslant 1$. Покажите, что $\sup_k | \hat{f}_n(k) | \leqslant c_0$ и что $\{f_n\}$ имеет слабо сходящуюся в $L^2(\Omega)$ подпоследовательность $\{f_{n_i}\}$.

(c) Докажите, что $\hat{f}_{n_i}$ сходится поточечно.

(d) Покажите, что существуют постоянные c_1 и c_2, такие, что для любого $r > 0$

$$\| f_{n_i} - f_{n_l} \|_j^2 \leqslant c_1 \int_{|k| \leqslant r} | k |^{2j} | \hat{f}_{n_i}(k) - \hat{f}_{n_l}(k) |^2 \, dk + \\ + c_2 r^{2j-2m} \int_{|k| \geqslant r} | k |^{2m} | \hat{f}_{n_i}(k) - \hat{f}_{n_l}(k) |^2 \, dk.$$

(e) С помощью неравенства из (d) закончите доказательство теоремы XIII.73.

124. (a) Докажите первую часть следствия 2 теоремы XIII.74, установив неравенство

$$(\eta u,\ (-\Delta_D)(\eta u)) \leqslant C\, [(u,\ (-\Delta_D)\, u) + (u,\ u)]$$

для фиксированной функции $\eta \in C_0^\infty$, тождественно равной единице в окрестности K.

(b) Докажите вторую часть следствия 2 теоремы XIII.74, используя неравенство $x^{-2} \leqslant C(-\Delta)$ для оценки $\| \eta u_n \|$.

(c) Докажите следствие 2 теоремы XIII.75, показав, что ограниченность $(\eta,\ (-\Delta_N)\, \eta)$ и $(\eta,\ \eta)$ (соответственно $\| \Delta_N u_n \|$ и $(\eta,\ (-\Delta_N)\, \eta))$ влечет за собой ограниченность H^1-нормы η (соответственно $\nabla \eta$).

Примечание. Доказательство второй части (c) потребует оценки $\| \partial_i \partial_j \varphi \|$ величиной $\| -\Delta_N \varphi \|$. Такие оценки обсуждаются в книге Агмона, упоминавшейся в замечаниях к § 14.

125. (a) Пусть ∂_i — замыкание оператора i-й частной производной, определенного на $C_0^\infty(\Omega)$, рассматриваемое как оператор в $L^2(\Omega)$. Пусть

∂_i^* — его сопряженный. Докажите, что для любого открытого множества $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ мы имеем $-\Delta_D^\Omega = \sum_{i=1}^n \partial_i^* \partial_i$.

(b) Для любого открытого множества $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ докажите, что $-\Delta_N^\Omega = \sum_{i=1}^n \partial_i \partial_i^*$.

126. Докажите предложение 1 § 15, рассмотрев одномерный случай, а затем применив теорию тензорных произведений.

127. Пусть C — оператор $-d^2/dx^2$ в $L^2[a, b]$ с граничными условиями

$$\frac{df}{dx}(a) + \alpha f(a) = 0, \qquad -\frac{df}{dx}(b) + \beta f(b) = 0.$$

(a) Докажите, что $Q(C) = H^1(a, b)$.

(b) Докажите, что для $f \in C^\infty(a, b)$

$$(f, Cf) = \int_a^b \left| \frac{df}{dx} \right|^2 dx + \alpha |f(a)|^2 + \beta |f(b)|^2.$$

128. (a) Пусть Ω имеет жорданов объем. Докажите, что Ω измеримо по Лебегу в том смысле, что существуют два борелевых множества D_1, D_2, таких, что $D_1 \subset \Omega \subset D_2$ и $\mu(D_2 \triangle D_1) = 0$. [*Указание:* возьмите в качестве D_1 (соответственно D_2) объединение (соответственно пересечение) кубов, приближающих Ω изнутри (снаружи).]

(b) Найдите открытое измеримое по Лебегу множество, не имеющее жорданова объема.

129. Пусть A и B — полуограниченные самосопряженные операторы и $\tilde{N}_E(A)$ — число собственных значений A, меньших $-E$.

(a) Докажите, что для $0 \leqslant \theta \leqslant 1$

$$\tilde{N}_E(A+B) \leqslant \tilde{N}_{\theta E}(A) + \tilde{N}_{(1-\theta)E}(B).$$

(b) Пусть $\tilde{S}_\gamma(A)$ — сумма γ-х степеней отрицательных собственных значений A. Докажите, что для $\gamma > 0$ и $0 < \theta < 1$

$$\tilde{S}_\gamma(A+B) \leqslant \theta^{-\gamma} \tilde{S}_\gamma(A) + (1-\theta)^{-\gamma} \tilde{S}_\gamma(B).$$

$$\left[\textit{Указание: } \text{докажите и затем примените формулу } \tilde{S}_\gamma(A) = \gamma \int_0^\infty E^{\gamma-1} \tilde{N}_E(A)\, dE. \right]$$

130. Рассмотрим формулу

$$\lim_{\lambda \to \infty} S_\gamma(\lambda V)/\lambda^{m/2+\gamma} = \tau_m (2\pi)^{-m/2} \int |V_-(x)|^{m/2+\gamma} d^m x, \tag{209}$$

где $S_\gamma(W)$ — сумма γ-х степеней отрицательных собственных значений оператора $-\Delta + W$.

(a) Докажите (209) для любого $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, используя вилку Дирихле — Неймана.

(b) Распространите (209) при $n \geqslant 3$ на любые $V \in L^{m/2+\lambda}(\mathbb{R}^n)$.

(c) Распространите (209) при $n=1$, 2 на любые $V\in L^{m/2+\gamma}(\mathbb{R}^n)$ с условием $m/2+\gamma>1$.
[*Указание:* в (b) и (c) воспользуйтесь задачей 129 и оценками Либа—Тирринга (задачи 31—33).]

†*131.* Докажите теорему XIII.82.

132. Пусть W таково, что $\dim E_{(-\infty,\,0]}(-\Delta+\lambda W)<\infty$ для всех λ. Предположим, что функция

$$f(\lambda)=\lim_{a\uparrow 0}\left[\dim E_{(-\infty,\,\lambda a]}(-\Delta+\lambda V)/\dim E_{(-\infty,\,a]}(-\Delta+V)\right]$$

существует при всех λ и конечна, что $\lim\limits_{a\uparrow 0} E_{(-\infty,\,a]}(-\Delta+V)=\infty$ и что $f(\lambda)$ непрерывна при $\lambda=1$. Докажите, что

$$\lim_{a\uparrow 0}\left[\dim E_{(-\infty,\,a]}(-\Delta+V+W)/\dim E_{(-\infty,\,a]}(-\Delta+V)\right]=1.$$

[*Указание.* Сначала докажите, что если $\dim E_{(-\infty,\,0]}(B)=N<\infty$, то $\dim E_{(-\infty,\,a]}(A+B)\leqslant\dim E_{(-\infty,\,a]}(A)+N$.]

133. Проверьте свойства $A_1\oplus A_2$, перечисленные перед предложением 3 § 15.

134. Пусть $f_n\in L^2(M,\,d\mu;\ \mathscr{H}')=\mathscr{H}$, где $\mathscr{H}'$ — сепарабельное пространство, а M σ-конечно. Предположим, что $\{f_n(m)\}_{n=1}^{\infty}$ — ортонормированный базис в $\mathscr{H}'$ для почти всех $m\in M$. Докажите, что

$$\sum_{n=1}^{N}(f_n(\cdot),\ f(\cdot))_{\mathscr{H}'}\,f_n(\cdot)\longrightarrow f$$

в $\mathscr{H}$ для каждого $f\in\mathscr{H}$. [*Указание:* воспользуйтесь теоремой о монотонной сходимости.]
Примечание. Это есть обобщение задачи 12 гл. II.

135. Предположим, что A — самосопряженный оператор. Пусть $\{U(t)\}$ — унитарная однопараметрическая группа. Предположим, что $\mathscr{D}$ — существенная область определения A и что $U(t)\,\mathscr{D}\subset\mathscr{D}$ и $AU(t)\psi=U(t)A\psi$ для всех t и всех $\psi\in\mathscr{D}$. Докажите, что $U(t)D(A)=D(A)$ и что $U(t)\,e^{isA}=e^{isA}\,U(t)$.

†*136.* (a) Докажите пункт (b) теоремы XIII.85.
(b) Восполните детали доказательства пункта (c) теоремы XIII.85.

137. Докажите, что фурье-образом $(2\pi)^{-1/2}(p^2+1)^{-1}$ служит $^1/_2 e^{-|x|}$. [*Указание:* воспользуйтесь интегрированием по контуру в комплексной плоскости.]

138. Пусть $f\in\mathscr{S}(\mathbb{R})$. Определим $V(x)=\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty} f(x+2\pi n)$.

(a) Используя теорию преобразований Фурье периодических обобщенных функций, формулы (144) и (145), докажите, что

$$\hat{V}(k)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\hat{f}(n)\,\delta(k-n).$$

(b) Применяя формулу обращения Фурье к $V(0)$, докажите формулу суммирования Пуассона

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(2\pi m) = (2\pi)^{-1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}(n).$$

(c) Предположим, что f и $\hat{f}$ — непрерывные функции, причем $|f(x)| \leqslant C(1+|x|)^{-1-\delta}$ и $|\hat{f}(k)| \leqslant C(1+|k|)^{-1-\delta}$ с некоторыми C, $\delta > 0$. Докажите формулу суммирования Пуассона для f, применяя предельный переход.

(d) Зная фурье-образ функции $e^{-|x|}$, вычислите $\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty} (1+n^2)^{-1}$.

(e) Зная фурье-образ функции $e^{-\alpha|x|}$, вычислите $\sum\limits_{n=1}^{\infty} n^{-2}$.

Примечание. Как видно из сказанного выше, формула суммирования Пуассона является полезным инструментом теории чисел; см., например, К. Чандрасекхаран, Введение в аналитическую теорию чисел.— М.: Мир, 1974.

139. (Модель Крёнига—Пенни.) Пусть V есть 2π-периодический потенциал, равный 0 на $[0, y)$ и c на $[y, 2\pi)$. Вычислите дискриминант явно и докажите, что при $n \to \infty$ для размера n-й щели справедлива формула

$$l_n \sim \left| \frac{4c}{n} \sin\left(\frac{ny}{2}\right) \right|.$$

В частности, докажите, что число щелей бесконечно.

†*140*. Пусть A — разложимый самосопряженный оператор на $\mathcal{H} = \int_M^{\oplus} \mathcal{H}' \, d\mu$.

Предположим, что каждый $A(m)$ ограничен снизу и обладает компактной резольвентой.

(a) Докажите, что n-е собственное значение $E_n(m)$ оператора $A(m)$ — измеримая функция. [*Указание:* воспользуйтесь принципом минимакса.]

(b) Покажите, что можно найти такие $\mathcal{H}'$-значные функции $\psi_n(m)$, удовлетворяющие уравнению $A(m)\psi_n(m) = E_n(m)\psi_n(m)$ и образующие ортонормированный базис в $\mathcal{H}'$, что $\psi_n(\cdot)$ измеримы. [*Указание:* для заданного n положите $M_{k;\,n} = \{m \mid E_n(m)$ k-кратно вырождено$\}$ и выберите $\psi_n(m)$ на каждом $M_{k;\,n}$.]

(c) Предположим, что M — топологическое пространство, что каждый $A(m) > 0$ и что $(A(m)+1)^{-1}$ равномерно непрерывна. Докажите, что $E_n(\cdot)$ непрерывна.

(d) Дайте пример, в котором $(A(m)+1)^{-1}$ была бы слабо непрерывна, а $E_n(\cdot)$ не была бы непрерывной.

(e) Объясните, почему $\psi_n(\cdot)$ может не быть непрерывной даже при условиях пункта (c).

†*141*. (a) Проверьте (173 b).

(b) Пусть $\alpha > n/2$. Проверьте, что

$$\sum_{|m| \geqslant c_2(1+|y|)} |E_m(x+iy)+1|^{-\alpha} \leqslant c_3(1+|y|)^{-\alpha+n/2}.$$

(c) Пусть $\alpha > 1$. Проверьте, что

$$\sum_{|m| \leqslant c_2(1+|y|)} |E_m(x+iy)+1|^{-\alpha} \leqslant c_4(1+|y|)^{-\alpha+n-1}.$$

(d). Завершите доказательство леммы 1 к теореме XIII.100.

142. Докажите, что любая решетка в R^ν имеет базис.

143. Докажите, что ячейка Вигнера—Зейтца любой решетки есть многогранник, т. е. пересечение конечного числа полупространств. [*Указание.* Пусть $a_1, \ldots, a_n$—базис и V—множество 3^n точек $\sum_{i=1}^{n} t_i a_i$ с $t_i = 0, +1$ или -1. Пусть $R = \max\{|x| \mid x \in V\}$. Докажите, что любая точка из ячейки Вигнера—Зейтца C лежит в шаре радиуса R. Докажите, что точка границы ∂C находится на одинаковом расстоянии от 0 и некоторой точки в $\mathcal{L} \cap \{x \mid |x| \leqslant 2R\}$.]

144. Предположим, что $\{A_\alpha\}$—семейство самосопряженных ограниченных снизу операторов, таких, что $A_\alpha \geqslant A$ и A имеет компактную резольвенту. Пусть $E_n(\alpha)$ есть n-е собственное значение A_α. Докажите, что $E_n(\alpha) \to \infty$ равномерно по α при $n \to \infty$.

145. Докажите, что мера плотности состояний, заданная формулой (176), абсолютно непрерывна относительно меры Лебега. [*Указание*: докажите, что эта мера равна сумме спектральных мер оператора H.]

146. Докажите, что в одномерном случае плотность состояний в точке E, такой, что $E_n(k) = E$, задается формулой

$$\frac{d\rho}{dE} = \frac{2}{|\bar{Q}|}\left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1}.$$

†*147.* Восполните детали доказательства теоремы XIII.101.

†*148.* Докажите аналог теоремы XIII.101 в случае, когда периодические граничные условия заменены на граничные условия Дирихле или Неймана.

149. С помощью (185) докажите (186).

150. Пусть $\sum_{i=1}^{\infty} |a_i| < \infty$. Положим $f_N(z) = \prod_{j=1}^{N} (1 + a_j z)$. Докажите, что f_N равномерно сходится на компактных множествах при $N \to \infty$, придерживаясь следующей схемы.

(a) Найдите равномерную оценку $f_N(z)$, используя неравенство $|1 + x| \leqslant e^{|x|}$.

(b) Докажите, что коэффициенты ряда Тейлора функций f_N сходятся при $N \to \infty$.

(c) Докажите нужную сходимость.

151. (a) Пусть $A_n \to A$ по норме в классе операторов со следом и $\mu \notin \sigma(A)$. Докажите непосредственно (не пользуясь теоремой XIII.107), что

$$\det(1 + \mu A_n)(1 + \mu A_n)^{-1} \to \det(1 + \mu A)(1 + \mu A)^{-1}$$

по норме.

(b) Докажите (196), зная, что это справедливо для операторов A конечного ранга и $\mu \notin \sigma(A)$.

152. Пусть $d(\mu) = \det(1 + \mu A)$ и $D(\mu) = d(\mu)(1 + \mu A)^{-1} A$. Рассмотрим разложения $d(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \mu^n$, $D(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \mu^n$.

(a) Докажите, что $|a_n| \leqslant (e/n)^n \| A \|_1^n$.
(b) Докажите, что $\| B_n \|_1 \leqslant (e/n)^n \| A \|_1^{n+1}$.

153. Определим частичный след Tr_{n-1} из $\mathfrak{I}_1(\otimes^n \mathscr{H})$ в $\mathfrak{I}_1(\mathscr{H})$, полагая $\operatorname{Tr}(C \operatorname{Tr}_{n-1}(A)) = \operatorname{Tr}[(C \otimes I \otimes \ldots \otimes I) A]$ для любого $C \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$.
(a) Покажите, что Tr_{n-1} — корректно определенное сужение.
*(b) Рассмотрим $\wedge^k(A)$ как отображение, заданное на $\otimes^k \mathscr{H}$, полагая его равным нулю на $(\wedge^k(\mathscr{H}))^{\perp}$. Докажите, что $D(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \mu^n$, где

$$B_n = (n+1) \operatorname{Tr}_n (\wedge^{n+1}(A)).$$

154. Докажите, что $|\lambda_1(A) \ldots \lambda_n(A)| \leqslant \mu_1(A) \ldots \mu_n(A)$ для любого компактного оператора A. [*Указание*: рассмотрите собственные значения и норму $\wedge^n(A)$.]

155. Пусть $A \in \mathfrak{I}_p$ и $p \leqslant n$. Введем

$$R_n(A) = (1 + A) \exp\left(\sum_{k=1}^{n-1} (-A)^k/k\right) - 1.$$

(a) Докажите, что $R_n(A) \in \mathfrak{I}_1$.
Введем $\det_n(1 + A) = \det(1 + R_n(A))$.
(b) Докажите, что $1 + A$ обратим тогда и только тогда, когда $\det_n(1 + A) \neq 0$.
(c) Докажите, что

$$\det_n(1 + A) = \prod_{j=1}^{N(A)} \left[(1 + \lambda_j(A)) \exp\left(\sum_{k=1}^{n-1} (-\lambda_j(A))^k/k\right)\right].$$

Пусть $D_n(\mu A) = A(1 + \mu A)^{-1} \det_n(1 + \mu A)$.
*(d) Докажите, что

$$|\det_n(1 + A)| \leqslant \exp(\gamma_n \| A \|_n^n), \qquad \| D_n(\mu A) \|_n \leqslant C_n \exp(\gamma_n \| A \|_n^n \mu^n)$$

при подходящих постоянных C_n и γ_n.
(e) Найдите формулы Племеля—Смитиса для $\det_n$ и D_n.
(f) Найдите критерий полноты для собственных векторов операторов из $\mathfrak{I}_n$.

156. Докажите, что следующие свойства операторов $A \in \mathfrak{I}_1$ эквивалентны:
(a) A квазинильпотентен, т. е. $\sigma(A) = \{0\}$;
(b) $\det(1 + \mu A) = 1$;
(c) $\operatorname{Tr}(A^k) = 0$ для всех $k > 0$;
(d) $\operatorname{Tr}(A^k) = 0$ для всех $k > k_0$ при некотором k_0.

157. Докажите, что следующие утверждения эквивалентны для всех $A \in \mathfrak{I}_1$:
(a) при всех $\mu \in \mathbb{C}$ алгебраическая кратность μ и $-\mu$ одинакова;
(b) $\det(1 + \mu A) = \det(1 - \mu A)$ для всех $\mu \in \mathbb{C}$;
(c) $\operatorname{Tr}(A^k) = 0$ для всех нечетных k.

†*158.* (a) Докажите принцип минимакса для сингулярных чисел

$$\mu_n(A) = \inf_{\psi_1, \ldots, \psi_{n-1}} \left(\sup_{\varphi \in [\psi_1, \ldots, \psi_{n-1}]^{\perp};\ \|\varphi\| = 1} \| A\varphi \| \right).$$

(b) Докажите, что $\mu_n(1 + A) \leqslant 1 + \mu_n(A)$.
(c) Докажите неравенство Фана

$$\mu_{n+m+1}(A + B) \leqslant \mu_{n+1}(A) + \mu_{m+1}(B).$$

†*159.* Пусть A — замкнутый оператор, $\mu \notin \sigma(A)$ и P — спектральный проектор, отвечающий некоторой изолированной точке λ в $\sigma(A)$. Докажите, что P в то же время есть спектральный проектор оператора $(A-\mu)^{-1}$, отвечающий точке $(\lambda-\mu)^{-1}$.

160. Пусть D — ограниченное открытое множество в $\mathbb{R}^{n+1}$ с гладкой границей ∂D. Пусть $\mathscr{H}=L^2(\partial D, dS)$ и $K(x, y)$ — ядро интегрального оператора A на $\mathscr{H}$. Предположим, что $|K(x, y)| \leqslant C|x-y|^{-\alpha}$ с $\alpha < n$. Пусть L — ядро интегрального оператора B, такое, что

$$|L(x, y)| \leqslant D|x-y|^{-\beta}.$$

(a) Докажите, что ядро AB ограничено, если $\alpha+\beta < n$.

(b) Докажите, что AB имеет ядро M, удовлетворяющее неравенству $|M(x, y)| \leqslant E|x-y|^{-\gamma}$ с $\gamma=\alpha+\beta-n$, если $\alpha+\beta > n$.

(c) Пусть $\alpha < n[1-(2k)^{-1}]$, где k — целое положительное число. Докажите, что $A \in \mathfrak{I}_{2k}$.

*(d) Пусть $2 \leqslant p < \infty$, $\alpha < n(1-p^{-1})$. Докажите, что $A \in \mathfrak{I}_p$. [*Указание*: используйте комплексную интерполяцию.]

161. (a) Пусть $f \in L^2(\mathbb{R})$ имеет L^2-производиую. Докажите, что существуют g, $h \in L^2$, такие, что $f=g*h$.

(b) Пусть $f \in L^2(\mathbb{R})$ имеет L^2-производиую; V, $W \in L^2(\mathbb{R})$. Докажите, что $V(x) f(x-y) W(y)$ — ядро оператора со следом в $L^2(\mathbb{R})$.

(c) Пусть V, $W \in L^2(\mathbb{R})$ имеют *компактные носители*. Пусть f и ее производная *локально* лежат в L^2. Докажите, что $V(x) f(x-y) W(y)$ есть ядро оператора со следом.

162. Пусть B — оператор единичного ранга. Докажите, что $\det(1+B) = 1+\operatorname{Tr}(B)$. [*Указание*: замените B на λB и докажите утверждение для малых λ.]

163. (a) Докажите, что фурье-образ обобщенной функции $|x|$ на $\mathbb{R}$ есть обобщенная фуикция, равная вне точки $k=0$ функции $-(2/\pi)^{1/2}k^{-2}$.

(b) Докажите, что $-|x|$ условно строго положительно определена, т. е. если $(1+|x|)V \neq 0$ лежит в L^1 и $\int V(x)\,dx=0$, то $-\int V(x) \times |x-y| V(y)\,dx\,dy > 0$.

164. Предположим, что A и B — операторы со следом и $A \geqslant 0$.

(a) Докажите, что $|B|^{1/2}(1+\mu A)^{-1/2}$ сходится к нулю по норме Гильберта — Шмидта при $\mu \to \infty$. [*Указание*: в базисе из собственных векторов оператора A вычислите $\operatorname{Tr}((1+\mu A)^{-1/2}|B|(1+\mu A)^{-1/2})$.]

(b) Докажите, что $B(1+\mu A)^{-1}$ сходится к нулю по норме в классе операторов со следом при $\mu \to \infty$.

(c) Докажите, что $\lim\limits_{\mu\to\infty}[\det(1+B+\mu A)/\det(1+\mu A)]=1$, где $\det$ есть определитель Фредгольма.

165. Рассмотрим одиомерный оператор Шредингера $-d^2/dx^2+V(x)$ с положительным 1-периодическим V. Пусть $D(E)$ — дискриминант соответствующего уравнения, а $D_0(E)=2\cos\sqrt{E}$ — дискриминант того же уравнения, ио при $V=0$. Пусть G_0 — оператор, обратный к $(h_0+1)^{-1}$, где h_0 — оператор $-d^2/dx^2$ с периодическими граничными условиями в $L^2(0, 1)$. Докажите, что

$$D(E)=2+C[\det(1+G_0V-(E+1)G_0)],$$

где det — определитель Фредгольма, а $C = D_0(-1) - 2$. [*Указание*. Сначала докажите, что $D(E) - 2 = C_V[\det(1 + G_0V - (E+1)G_0)]$, показав, что обе части равенства суть целые функции, задаваемые бесконечными произведениями и имеющие одинаковые нули. Затем докажите с помощью задачи 164, что $C_V = C_0$, показав, что $(D(E) - 2)/(D_0(E) - 2)$ и $\det(1 + G_0V - (E+1)G_0)/\det(1 - (E+1)G_0)$ стремятся к 1 при $E \to -\infty$. Наконец, найдите C_0, взяв $E = -1$.]

166. Пусть E и F — два ограниченных оператора.

(a) Предположим, что $0 \neq \lambda \notin \sigma(EF)$. Докажите, что $-(\lambda)^{-1}[1 - F(EF-\lambda)^{-1}E]$ есть двусторонний обратный к $FE - \lambda$, и выведите отсюда, что $\lambda \notin \sigma(FE)$.

(b) Пусть $\lambda \neq 0$ и $\mathcal{M} = \{\varphi \mid EF\varphi = \lambda\varphi\}$, $\mathcal{N} = \{\varphi \mid FE\varphi = \lambda\varphi\}$. Докажите, что F есть биекция из $\mathcal{M}$ на $\mathcal{N}$, и выведите отсюда, что $\dim \mathcal{M} = \dim \mathcal{N}$.

167. Пусть $p \neq \infty$. Предположим, что $A_n \in \mathcal{I}_p$, $\sup_n \|A_n\|_p < \infty$ и $A_n \to A$ в слабом смысле к ограниченному оператору A. Докажите, что $A \in \mathcal{I}_p$ и $\|A\|_p \leqslant \varliminf \|A_n\|_p$. [*Указание*. Пусть q сопряжено p. Докажите, что $|\operatorname{Tr}(FA)| \leqslant \|F\|_q \varliminf \|A_n\|_p$ для любого оператора F конечного ранга.]

168. Используя комплексную интерполяцию, докажите оценку $\|C^{1/2}DC^{1/2}\|_r \leqslant \|CD\|_r$, использованную при доказательстве неравенства Голдена — Томпсона.

169. В этой задаче надо получить неравенство Гёльдера для матриц (предложение 5 дополнения к § IX.4) из неравенства Гёльдера для сумм без использования комплексной интерполяции.

(a) Пусть $\{a_{ij}\}_{1 \leqslant i,\, j \leqslant n}$ — матрица с $\sum_i |a_{ij}| \leqslant 1$ для всех j и $\sum_j |a_{ij}| \leqslant 1$ для всех i. Докажите, что

$$\left|\sum a_{ij}\mu_i\nu_j\right| \leqslant \left(\sum_i |\mu_i|^p\right)^{1/p} \left(\sum_j |\nu_j|^q\right)^{1/q}$$

для $p^{-1} + q^{-1} = 1$. [*Указание*: вникните в доказательство теоремы XIII.103.]

(b) Пусть $A = \sum \mu_i(\varphi_i, \cdot)\psi_i$ и $B = \sum \nu_j(\eta_j, \cdot)\gamma_j$ — канонические представления A и B. Докажите, что $|\operatorname{Tr}(AB)| \leqslant \sum |a_{ij}|\mu_i\nu_j$, где $\sum_i |a_{ij}| \leqslant 1$, $\sum_j |a_{ij}| \leqslant 1$.

(c) Выведите неравенство $|\operatorname{Tr}(AB)| \leqslant \operatorname{Tr}(|A|^p)^{1/p} \operatorname{Tr}(|B|^q)^{1/q}$.

170. Пусть $F_A(\mu)$ — функция из теоремы XIII.107. Цель этой задачи — показать, что при фиксированных A, $B \in \mathcal{I}_1$ отображение $\lambda \mapsto F_{A+\lambda B}$ (1) есть целая функция λ. Это нужно для доказательства (197).

(a) Фиксируем такое μ, что $-\mu^{-1} \notin \sigma(A)$. Покажите, что $F_{A+\lambda B}(\mu) = F_C(\lambda)F_A(\mu)$, где $C = \mu(1 + \mu A)^{-1}B$, и выведите отсюда, что $\lambda \mapsto F_{A+\lambda B}(\mu)$ — целая функция λ при таких μ.

(b) Пусть $\mu_n \to \mu_\infty$ и $f_n(\lambda) = F_{A+\lambda B}(\mu_n)$. Используя первую часть доказательства теоремы XIII.107, покажите, что $\sup_n \sup_{\lambda \in R} |f_n(\lambda)| < \infty$ для любой ограниченной области R и что $f_n(\lambda) \to f_\infty(\lambda)$ для любого λ. Выведите отсюда, что $F_{A+\lambda B}(\mu)$ — целая функция λ при фиксированном μ.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ[1])

Педантическая последовательность — этот злобный дух скудных умов.

РАЛФ УОЛДО ЭМЕРСОН

[1]) Индексы 1 и 2 означают, что это страницы т. 1 и 2 соответственно.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ[1])

1) Индексы 1 и 2 означают, что это страницы т. 1 и т. 2 соответственно.