тогда, когда $n \geqslant 4$. При $n=4$ это довольно тонкий факт, но при $n \geqslant 5$ он доказывается не очень сложно (задача 9). Первая часть теоремы X.11 обобщается на нецентральные потенциалы (см. § X.4).

X.2. Возмущения самосопряженных операторов

В этом разделе доказывается несколько теорем, утверждающих самосопряженность $A+B$ при условии, что A самосопряжен, а B не слишком велик по сравнению с A. Эти теоремы находят важные применения в квантовой механике. Сначала определим, что подразумевается под «малым» возмущением.

Определение. Пусть A и B — плотно определенные линейные операторы в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$. Предположим, что

(i) $D(B) \supset D(A)$;

(ii) для некоторых a и b из $\mathbb{R}$ и всех $\varphi \in D(A)$

$$\|B\varphi\| \leqslant a\|A\varphi\| + b\|\varphi\|. \tag{X.19a}$$

В таком случае говорят, что оператор B **ограничен относительно** A или просто A-**ограничен**. Точная нижняя грань всех таких a называется **относительной гранью оператора** B **по отношению к** A или просто A-**гранью**. Если относительная грань равна нулю, то говорят, что B **бесконечно мал** по отношению к A, и пишут $B \ll A$. Отметим, что обычно константу b нужно выбирать побольше, а константу a поменьше.

Иногда удобно заменить требование (ii) другим требованием:
(iii) для некоторых $\tilde{a}, \tilde{b} \in \mathbb{R}$ и для всех $\varphi \in D(A)$

$$\|B\varphi\|^2 \leqslant \tilde{a}^2\|A\varphi\|^2 + \tilde{b}^2\|\varphi\|^2. \tag{X.19b}$$

Если выполняется (iii), то (ii) выполняется тоже, причем $a=\tilde{a}$, $b=\tilde{b}$. Если же справедливо (ii), то можно установить справедливость (iii) с $\tilde{a}^2=(1+\varepsilon)a^2$, $\tilde{b}^2=(1+\varepsilon^{-1})b^2$ при каждом $\varepsilon > 0$. Таким образом, точная нижняя грань всех a в (ii) равна точной нижней грани всех $\tilde{a}$ в (iii). Отметим, что для проверки неравенства (ii) или (iii) его достаточно доказать на существенной области оператора A.

Основной результат о возмущениях дает следующая

Теорема X.12 (Като — Реллих). Предположим, что оператор A самосопряжен, B симметричен и A-ограничен с A-гранью $a < 1$. Тогда $A+B$ самосопряжен на $D(A)$ и самосопряжен в существенном на любой существенной области оператора A. Более того, если A ограничен снизу числом M, то $A+B$ ограничен снизу числом $M-\max\{b/(1-a),\ a|M|+b\}$, где a, b — константы из (X.19a).

Доказательство. Покажем, что $\operatorname{Ran}(A+B\pm i\mu_0)=\mathscr{H}$ при некотором $\mu_0>0$. Для $\varphi\in D(A)$ имеем

$$\|(A+i\mu)\varphi\|^2=\|A\varphi\|^2+\mu^2\|\varphi\|^2.$$

Отсюда, полагая $\varphi=(A+i\mu)^{-1}\psi$, заключаем, что $\|A(A+i\mu)^{-1}\|\leqslant 1$ и $\|(A+i\mu)^{-1}\|\leqslant\mu^{-1}$. Поэтому, применяя (X.19a) с $\varphi=(A+i\mu)^{-1}\psi$, находим

$$\|B(A+i\mu)^{-1}\psi\|\leqslant a\|A(A+i\mu)^{-1}\psi\|+b\|(A+i\mu)^{-1}\psi\|\leqslant$$
$$\leqslant\left(a+\frac{b}{\mu}\right)\|\psi\|.$$

Таким образом, при большом μ_0 норма оператора $C=B(A+i\mu_0)^{-1}$ меньше единицы, так как $a<1$. Отсюда вытекает, что $-1\notin\sigma(C)$, т. е. что $\operatorname{Ran}(I+C)=\mathscr{H}$. Поскольку A самосопряжен, $\operatorname{Ran}(A+i\mu_0)$ также совпадает с $\mathscr{H}$. Таким образом, из уравнения

$$(I+C)(A+i\mu_0)\varphi=(A+B+i\mu_0)\varphi \text{ для } \varphi\in D(A)$$

следует, что $\operatorname{Ran}(A+B+i\mu_0)=\mathscr{H}$. Доказательство равенства $\operatorname{Ran}(A+B-i\mu_0)=\mathscr{H}$ аналогично. В итоге в силу основного критерия (теорема VIII.3) $A+B$ самосопряжен на $D(A)$.

Прямым следствием (X.19) является включение $D(\overline{A\upharpoonright D_0})\subset D(\overline{(A+B)\upharpoonright D_0})$, так что $A+B$ самосопряжен в существенном на любой существенной области A.

Наконец, докажем утверждение о полуограниченности. Предположим, что $t\in\mathbb{R}$ и $-t<M$. Тогда $\operatorname{Ran}(A+t)=\mathscr{H}$ и оценка, аналогичная проведенной выше, показывает, что $\|B(A+t)^{-1}\|<1$, если

$$-t<M-\max\left\{\frac{b}{1-a},\ a|M|+b\right\}.$$

Таким образом, $\operatorname{Ran}(A+B+t)=\mathscr{H}$ для таких t и $(A+B+t)^{-1}=(A+t)^{-1}(I+C)^{-1}$, откуда вытекает, что $-t\in\rho(A+B)$. ∎

Часто оказывается полезной следующая симметричная форма теоремы Като—Реллиха. Ее применение см. в примере 3 дополнения к § X.1.

Теорема X.13. Пусть A и C — симметрические операторы. Предположим, что D — линейное подмножество, такое, что $D\subseteq D(A)$, $D\subseteq D(C)$ и

$$\|(A-C)\varphi\|\leqslant a(\|A\varphi\|+\|C\varphi\|)+b\|\varphi\|$$

для всех $\varphi\in D$, где $a<1$. Тогда

(a) Оператор A самосопряжен в существенном на D тогда и только тогда, когда C самосопряжен в существенном на D.

(b) $D(\overline{A \restriction D}) = D(\overline{C \restriction D})$.

Доказательство. Пусть $B = A - C$ и $D(B) = D$. Положим $F(\alpha) = C + \alpha B$ для $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$. Тогда $F(0) = C$, $F(1) = A$ и $C\varphi = F(\alpha)\varphi - \alpha B\varphi$, $A\varphi = F(\alpha)\varphi + (1-\alpha)B\varphi$ для всех $\varphi \in D$. Таким образом, неравенство из условия теоремы дает

$$\|B\varphi\| \leqslant a(\|A\varphi\| + \|C\varphi\|) + b\|\varphi\| \leqslant$$
$$\leqslant 2a\|F(\alpha)\varphi\| + a\|B\varphi\| + b\|\varphi\|,$$

или

$$\|B\varphi\| \leqslant \frac{2a}{1-a}\|F(a)\varphi\| + \frac{b}{1-a}\|\varphi\|. \tag{X.20}$$

Пусть $0 \leqslant \alpha' \leqslant 1$. Если $2a\alpha'/(1-a) < 1$, то из неравенства (X.20) и теоремы X.12 следует, что $F(\alpha + \alpha') = F(\alpha) + \alpha' B$ самосопряжен в существенном на D тогда и только тогда, когда таков оператор $F(\alpha)$. В итоге, начав с $\alpha = 0$ и применяя полученное утверждение конечное число раз, доказываем (a). В задаче 13 читателю предлагается с помощью похожих рассуждений доказать (b). ∎

Следующая теорема распространяет теорему X.12 на случай относительной грани, равной 1; правда, утверждение при этом несколько ослабляется.

Теорема X.14 (теорема Вюста). Пусть A самосопряжен, а B симметричен, причем $D(B) \supset D(A)$. Предположим, что для некоторого b и всех $\varphi \in D(A)$

$$\|B\varphi\| \leqslant \|A\varphi\| + b\|\varphi\|. \tag{X.21a}$$

Тогда $A + B$ самосопряжен *в существенном* на $D(A)$ или на любой существенной области оператора A.

Доказательство. Простые соображения убеждают в том, что достаточно доказать самосопряженность в существенном оператора $A + B$ на $D(A)$. Предположим, что $(A + B + i)^* h = 0$. Для каждого $t < 1$ оператор $A + tB$ самосопряжен на $D(A)$ в силу теоремы X.12. Таким образом, существует такое $\varphi_t \in D(A)$ с нормой $\|\varphi_t\| \leqslant \|h\|$, что $(A + tB + i)\varphi_t = h$. Положим $\psi_t = h - (t-1)B\varphi_t$. Тогда простое вычисление дает $(\psi_t, h) = 0$. В силу (X.21a)

$$\|A\varphi_t\| \leqslant \|(A + tB)\varphi_t\| + \|tB\varphi_t\| \leqslant$$
$$\leqslant \|(A + tB)\varphi_t\| + t\|A\varphi_t\| + tb\|\varphi_t\|,$$

и потому

$$(1-t)\|A\varphi_t\| \leqslant \|(A + tB)\varphi_t\| + tb\|\varphi_t\|.$$

Поскольку $\|(A + tB)\varphi_t\|^2 = \|h\|^2 - \|\varphi_t\|^2$, функция $(1-t)\|A\varphi_t\|$ ограничена при $t \uparrow 1$. Далее, в силу опять-таки (X.21a), при

$t\uparrow 1$ ограничены функция $(1-t)\|B\varphi_t\|$ и, следовательно, $\|\psi_t\|$. Пусть теперь $\eta\in D(A)$. Тогда

$$\lim_{t\uparrow 1}(\psi_t-h,\ \eta)=\lim_{t\uparrow 1}(t-1)(\varphi_t,\ B\eta)=0.$$

Поскольку совокупность $\|\psi_t\|$ равномерно ограничена, мы заключаем, что $h=\text{w-}\lim\limits_{t\uparrow 1}\psi_t$. Но тогда $(h,\ h)=\lim(h,\ \psi_t)=0$, т. е. $h=0$. Отсюда $\operatorname{Ker}(A+B+i)^*=\{0\}$. Доказательство тривиальности $\operatorname{Ker}(A+B-i)^*$ аналогично. ∎

Выбирая $A=-B$, убеждаемся, что невозможно заменить в утверждении теоремы X.14 «самосопряженность в существенном» на «самосопряженность». Отметим еще, что существуют контрпримеры, показывающие ложность утверждения теоремы X.14 в случае, когда относительная грань больше единицы (см. пример 4 в конце этого раздела). Отметим также, что, согласно проведенному выше обсуждению неравенств (X.19), условие (X.21a), нужное для применения теоремы X.14, само вытекает из неравенства

$$\|B\varphi\|^2\leqslant\|A\varphi\|^2+b^2\|\varphi\|^2, \qquad \text{(X.21b)}$$

которое эквивалентно операторному неравенству

$$B^2\leqslant A^2+b^2. \qquad \text{(X.21c)}$$

Перейдем теперь к основному применению теоремы Като — Реллиха — анализу гамильтонианов атомов. Сначала введем несколько новых классов функций.

Определение. Пусть $\langle M,\mu\rangle$ — пространство с мерой. Обозначим через $L^r(M,d\mu)+L^s(M,d\mu)$ множество измеримых функций f на M, которые можно представить в виде суммы $f=f_1+f_2$, где $f_1\in L^r(M,d\mu)$ и $f_2\in L^s(M,d\mu)$.

Теорема X.15. Пусть $V\in L^2(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)$ — вещественнозначная функция. Тогда $-\Delta+V(x)$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ и самосопряжен на $D(-\Delta)$.

Доказательство. Поскольку функция V вещественнозначна, оператор умножения на V самосопряжен на

$$D(V)=\{\varphi\mid\varphi\in L^2(\mathbb{R}^3),\ V\varphi\in L^2(\mathbb{R}^3)\}.$$

Пусть $V=V_1+V_2$, где $V_1\in L^2(\mathbb{R}^3)$ и $V_2\in L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Тогда

$$\|V\varphi\|_2\leqslant\|V_1\|_2\|\varphi\|_\infty+\|V_2\|_\infty\|\varphi\|_2, \qquad \text{(X.22)}$$

так что $D(V)\supset C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. В силу теоремы IX.28, при любом заданном $a>0$ существует такое $b>0$, что

$$\|\varphi\|_\infty\leqslant a\|\Delta\varphi\|_2+b\|\varphi\|_2 \qquad \text{(X.23)}$$

для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Это иеравенство и (X.22) дают

$$\|V\varphi\|_2 \leqslant a\|V_1\|_2\|-\Delta\varphi\|_2+(b+\|V_2\|_\infty)\|\varphi\|_2$$

для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Таким образом, V оказывается $-\Delta$-ограниченным и имеет произвольно малую грань на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Поскольку $-\Delta$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, теорема Като—Реллиха утверждает, что $-\Delta+V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. ∎

Пример 1. Пусть $V(r)=-e^2/r$, где $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$. Тогда $-\Delta-e^2/r$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Теорема X.16 (Като). Пусть $\{V_k\}_{k=1}^m$ — набор вещественнозначных измеримых функций, каждая из которых принадлежит $L^2(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Обозначим через $\{y_{k,\alpha}\}$, $k=1, \ldots, n$; $\alpha=1,2,3$, координаты в $\mathbb{R}^{3n}$. Пусть $V_k(\mathbf{y}_k)$ — оператор умножения на $L^2(\mathbb{R}^{3n})$, получаемый выбором в качестве $\mathbf{y}_k$ соответствующих координат $y_{k,\alpha}$. Тогда $-\Delta+\sum\limits_{k=1}^m V_k(\mathbf{y}_k)$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$, где Δ — лапласиан на $\mathbb{R}^{3n}$.

Доказательство. Рассмотрим сначала отдельно одну из функций V_k. Учитывая возможность поворота системы координат, можно считать, что переменными в $V_k(\cdot)$ являются x_1, x_2, x_3. (Это справедливо в силу инвариантности $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_\infty$ и $-\Delta$ относительно вращения координат). Пусть Δ_1 обозначает лапласиан по переменным x_1, x_2, x_3. Принимая во внимание оценку (X.23) и учитывая «эквивалентность» неравенств (X.19a) и (X.19b), для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$ получаем

$$\begin{aligned}
\|V_k\varphi\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{3n})} &\leqslant a^2\int|-\Delta_1\varphi(x_1, \ldots, x_{3n})|^2dx_1\ldots dx_{3n}+\\
&\qquad +b^2\int|\varphi(x_1, \ldots, x_{3n})|^2dx_1\ldots dx_{3n}=\\
&=a^2\int\left|\sum_{i=1}^3 p_i^2\hat\varphi(p_1, \ldots, p_{3n})\right|^2dp_1\ldots dp_{3n}+b^2\|\varphi\|^2\leqslant\\
&\leqslant a^2\int\left|\sum_{i=1}^{3n} p_i^2\hat\varphi(p_1, \ldots, p_{3n})\right|^2dp_1\ldots dp_{3n}+b^2\|\varphi\|^2=\\
&=a^2\|-\Delta\varphi\|^2+b^2\|\varphi\|^2.
\end{aligned}$$

В итоге с помощью неравенства Шварца заключаем, что

$$\left\|\sum_{k=1}^m V_k(\mathbf{y}_k)\varphi\right\|^2\leqslant m^2a^2\|-\Delta\varphi\|^2+m^2b^2\|\varphi\|^2$$

для всех $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$. Поскольку a можно выбрать как угодно малым, сумма $\sum_{k=1}^{m} V_k(\mathbf{y}_k)$ бесконечно мала относительно $-\Delta$. Следовательно, согласно теореме Като—Реллиха, $-\Delta+\sum_{k=1}^{m} V_k(\mathbf{y}_k)$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$. ∎

Пример 2 (гамильтонианы атомов). Пусть $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ из $\mathbb{R}^3$ образуют ортогональные координаты в $\mathbb{R}^{3n}$. Тогда оператор

$$-\sum_{i=1}^{n} \Delta_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{ne^2}{|\mathbf{x}_i|} + \sum_{i<j}^{n} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|}$$

самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$.

По поводу применения теоремы Като—Реллиха к обыкновенным дифференциальным операторам см. задачу 7.

Существует аналог теоремы Като—Реллиха в теории форм, который можно использовать, когда форма $(B\varphi, \varphi)$ «мала» относительно формы $(A\varphi, \varphi)$, хотя оператор B и не A-ограничен. Несмотря на то что утверждение нижеследующей теоремы похоже на теорему X.12, его доказательство носит совершенно иной характер.

Теорема X.17 (КЛМН-теорема). Пусть A — положительный самосопряженный оператор и $\beta(\varphi, \psi)$ — такая симметрическая квадратичная форма на $Q(A)$, что

$$|\beta(\varphi, \varphi)| \leqslant a(\varphi, A\varphi)+b(\varphi, \varphi) \text{ для всех } \varphi\in D(A) \quad (X.24)$$

при некоторых $a<1$ и $b\in\mathbb{R}$. Тогда существует единственный самосопряженный оператор C, для которого $Q(C)=Q(A)$ и

$$(\varphi, C\psi)=(\varphi, A\psi)+\beta(\varphi, \psi) \text{ для всех } \varphi, \psi\in Q(C).$$

Оператор C ограничен снизу числом $-b$, и любая область самосопряженности в существенном оператора A является существенной областью для C.

Доказательство. Введем на $Q(A)$ форму $\gamma(\varphi, \psi)=(\varphi, A\psi)+\beta(\varphi, \psi)$. В силу (X.24)

$$\gamma(\varphi, \varphi) \geqslant (1-a)(\varphi, A\varphi)-b(\varphi, \varphi) \geqslant -b(\varphi, \varphi),$$

так как A положителен. Следовательно, γ ограничена снизу числом $-b$. Более того,

$$(1-a)(\varphi, A\varphi)+(\varphi, \varphi) \leqslant \gamma(\varphi, \varphi)+(b+1)(\varphi, \varphi) \leqslant$$
$$\leqslant (1+a)(\varphi, A\varphi)+(2b+1)(\varphi, \varphi).$$

Таким образом, нормы $\|\cdot\|_{+1,A}$ и $\|\cdot\|_{+1,\gamma}$ на $Q(A)$ эквивалентны.

Поскольку область $Q(A)$ замкнута относительно $\|\cdot\|_{+1, A}$, она замкнута и относительно $\|\cdot\|_{+1, \gamma}$. Поэтому γ — полуограниченная замкнутая квадратичная форма на $Q(A)$. Теперь теорема вытекает из утверждения и доказательства теоремы VIII.15. ∎

Эта теорема подсказывает естественное

Определение. Пусть A — положительный самосопряженный оператор. Предположим, что B — самосопряженный оператор, удовлетворяющий условиям

(i) $Q(B) \supset Q(A)$,

(ii) $|(\varphi, B\varphi)| \leqslant a(\varphi, A\varphi) + b(\varphi, \varphi)$, $\varphi \in Q(A)$,

для некоторого $a > 0$ и $b \in \mathbb{R}$. Тогда говорят, что B **ограничен относительно** A **в смысле форм.** Если a можно выбрать как угодно малым, то говорят, что B **бесконечно мал по отношению к** A **в смысле форм** (и пишут $B \ll A$).

Если B самосопряжен и ограничен в смысле форм ($a < 1$) относительно положительного самосопряженного оператора A, то КЛМН-теорема придает смысл $A + B$. Подчеркнем, что так определенная сумма «$A + B$» может *отличаться* от операторной суммы. Существуют примеры, когда B A-ограничен в смысле форм, хотя $D(A) \cap D(B) = \{0\}$. На самом деле, как показывает следующий пример, форма β из КЛМН-теоремы не обязана быть ни формой, порождаемой оператором, ни даже замыкаемой формой.

Пример 3. Пусть $A = -d^2/dx^2$ на $\mathbb{R}$. Определим для любых $\varphi, \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ форму $\beta(\varphi, \psi) = \bar{\varphi}(0)\psi(0)$. В силу леммы Соболева для любого $a > 0$ существует такое b, что

$$\|\varphi\|_\infty^2 \leqslant a(\varphi, -\varphi'') + b\|\varphi\|^2.$$

По этой причине можно воспользоваться теоремой X.17 и определить $-d^2/dx^2 + \delta$! Функция $\psi \in Q(-d^2/dx^2) \subset C_\infty(\mathbb{R})$ входит в область определения $-d^2/dx^2 + \delta$ тогда и только тогда, когда $(-\psi''(x) + \delta(x)\psi(0)) \in L^2(\mathbb{R})$, где производная понимается в смысле теории обобщенных функций. Например, если $\psi(x)$ около нуля ведет себя как $1 + |x|/2$, бесконечно дифференцируема вне нуля и имеет компактный носитель, то $\psi \in D(-d^2/dx^2 + \delta(x))$, поскольку $\delta(x)\psi(0)$ в точности компенсирует член $-\delta(x)\psi(x)$, появляющийся в $-\psi''(x)$. Таким образом, $D(A + B)$ может содержать векторы, не входящие ни в $D(A)$, ни в $D(B)$, но для которых происходит компенсация в «$A\psi + B\psi$».

Следующая теорема показывает, что когда B A-ограничен, он ограничен относительно A и в смысле форм.

Теорема X.18. Пусть A — положительный самосопряженный оператор. Предположим, что B самосопряжен. Тогда

(a) Если B A-ограничен и имеет A-грань a, то B ограничен относительно A в смысле форм и его A-грань в смысле форм равна a.

(b) Из $B << A$ вытекает $B \lessdot\!\lessdot A$.

Доказательство. Пусть $C^\infty(A) = \bigcap\limits_{n=1}^{\infty} D(A^n)$, $\mu > 0$ и $\mathscr{H}_n$ — замыкание $C^\infty(A)$ относительно нормы $\|\varphi\|_n = \|(A+I)^{n/2}\varphi\|$, $n = 0$, ± 1, ± 2, ... Отображение C из $C^\infty(A)$ в $\mathscr{H}$ продолжается до ограниченного оператора из $\mathscr{H}_m$ в $\mathscr{H}_{-n}$ тогда и только тогда, когда $(A+I)^{-n/2}C(A+I)^{-m/2}$ ограничено на $C^\infty(A)$ в обычной операторной норме.

Если B A-ограничен и его A-грань равна a, то $B(A+\mu I)^{-1}$ и $(A+\mu I)^{-1}B$ ограничены величиной $(a+b/\mu)$. Рассуждения примера 3 из дополнения к § IX.4 показывают, что оператор

$$(A+\mu I)^{-1/2} B (A+\mu I)^{-1/2}$$

также ограничен величиной $a+b/\mu$, откуда немедленно следует, что

$$(\varphi, B\varphi) \leqslant (a+b/\mu)(\varphi, (A+\mu I)\varphi)$$

для всех $\varphi \in D_\infty(A)$. Поскольку $\mu > 0$ произвольно, тем самым доказаны и (a) и (b). ∎

КЛМН-теорему иногда можно использовать для определения гамильтонианов и тогда, когда не применима теорема Реллиха. Для того чтобы было понятно, что (L^2+L^∞)-класс потенциалов не включает в себя все «разумные» потенциалы, отметим, что, как давно известно из физики, потенциалы вида $V_\alpha(r) = -r^{-\alpha}$ порождают разумную квантовую динамику при условии $\alpha < 2$. Но $V_\alpha \in L^2+L^\infty$, только если $\alpha < 3/2$! Таким образом, при $3/2 \leqslant \alpha < 2$ нельзя применять теорему Реллиха (см. задачу 14). Однако можно воспользоваться теоремой X.17. Сначала получим предварительную оценку.

Лемма (принцип неопределенности). Пусть $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Тогда

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4r^2} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \leqslant \int\limits_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}.$$

Доказательство. Можно считать, что ψ — вещественнозначная функция. Тогда

$$\nabla(r^{1/2}\psi) = r^{1/2}\nabla\psi + \frac{1}{2} r^{-3/2}\mathbf{r}\psi.$$

Таким образом, если $r \neq 0$, то

$$|\nabla\psi|^2 = |r^{-1/2}\nabla(r^{1/2}\psi) - \frac{1}{2}r^{-2}\mathbf{r}\psi|^2 \geqslant$$
$$\geqslant -r^{-3/2}\psi\frac{\partial}{\partial r}(r^{1/2}\psi) + \frac{1}{4}r^{-2}|\psi|^2 =$$
$$= -\frac{1}{2r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r|\psi|^2) + \frac{1}{4}r^{-2}|\psi|^2.$$

Поэтому

$$\int|\nabla\psi|^2 d\mathbf{r} \geqslant \int\frac{1}{4r^2}|\psi|^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_0^\infty\frac{\partial}{\partial r}\int_{S^2} r|\psi|^2 d\Omega\, dr =$$
$$= \int\frac{1}{4r^2}|\psi|^2 d\mathbf{r}. \blacksquare$$

Предложение. Если $\alpha < 2$, то $-r^{-\alpha} \ll -\Delta$.

Доказательство. Пусть заданы $\varphi \in C_0^\infty$ и $a > 0$. Выберем $\varepsilon > 0$ таким, чтобы $1/r^\alpha \leqslant a/4r^2$ для всех $r \leqslant \varepsilon$. Тогда

$$\int_{\mathbb{R}^3}\frac{1}{r^\alpha}|\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int_{|\mathbf{r}|\leqslant\varepsilon}\frac{1}{r^\alpha}|\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} + \int_{|\mathbf{r}|>\varepsilon}\frac{1}{r^\alpha}|\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \leqslant$$
$$\leqslant a\int_{|\mathbf{r}|\leqslant\varepsilon}|\nabla\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} + \frac{1}{\varepsilon^\alpha}\int_{|\mathbf{r}|>\varepsilon}|\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \leqslant$$
$$\leqslant a\int_{\mathbb{R}^3}(-\Delta\varphi(\mathbf{r}))\overline{\varphi(\mathbf{r})}\, d\mathbf{r} + \frac{1}{\varepsilon^\alpha}\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}. \blacksquare$$

Это предложение показывает, что при $3/2 < \alpha < 2$ для определения $-\Delta - r^{-\alpha}$ можно использовать теорему X.17. Класс $L^2 + L^\infty$ образует естественный класс потенциалов, связанный с теоремой Като—Реллиха (см. задачу 14). Но естественного класса потенциалов, связанного с КЛМН-теоремой, не существует.

Определение. Измеримая функция V на $\mathbb{R}^3$ называется **потенциалом Рольника**, если

$$\|V\|_R^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^6}\frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2}d^3x\, d^3y < \infty.$$

Обозначим множество потенциалов Рольника через R.

Множество R становится полным векторным пространством при наделении его нормой Рольника $\|\cdot\|_R$. Более того, в силу неравенства Соболева (IX.19), $L^{3/2}(\mathbb{R}^3) \subset R$; в частности, если $\alpha < 2$, то $r^{-\alpha} \in R + L^\infty$. Аналогом теоремы Като служит

Теорема X.19.
(a) Если $V \in R + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, то $V \ll -\Delta$.

(b) Если $V_i(\mathbf{r})$ и $V_{ij}(\mathbf{r})$ лежат в $R+L^\infty$ и

$$V=\sum_{i=1}^{N} V_i(\mathbf{r}_i)+\sum_{i,\,j=1}^{N} V_{ij}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)$$

на $\mathbb{R}^{3N}$, то $V<<-\Delta$.

Доказательство можно найти в ссылках, данных в Замечаниях или в задаче 17. Напоминаем читателю еще раз, что смысл, придаваемый выражению $-\Delta+V$ КЛМН-теоремой, *может отличаться* от смысла, которое имеет это выражение как операторная сумма, определенная на $D(-\Delta)\cap D(V)$.

Задача нахождения условий на потенциалы в $\mathbb{R}^s$, при которых $-\Delta+V$ является самосопряженным оператором, широко изучалась при помощи теоремы Реллиха и КЛМН-теоремы. В доказательствах необходимых неравенств часто применяются L^p-оценки § IX.4 и интерполяционные теоремы, поэтому результаты обычно зависят от размерности s. Ниже мы дадим тому два примера. Другие теоремы можно найти в § X.4 и в ссылках, приведенных в Замечаниях.

Теорема X.20. Пусть $s\geqslant 4$. Если $V\in L^p(\mathbb{R}^s)$ для некоторого $p>s/2$, то $V<<-\Delta$.

Доказательство. Благодаря теореме IX.27 мы знаем, что

$$(1+k^2)\,\hat{u}(k)\in L^2(\mathbb{R}^s),$$

если $u\in D(-\Delta)$. Более того, $(1+k^2)^{-1}\in L^p(\mathbb{R}^s)$, поскольку $p>s/2$, и потому в силу неравенства Гёльдера $\hat{u}\in L^q$ и

$$\|\hat{u}\|_q\leqslant\|(1+k^2)^{-1}\|_p\|(1+k^2)\,\hat{u}\|_2,$$

где $q^{-1}=p^{-1}+1/2$. Следовательно, в силу неравенства Хаусдорфа—Юнга $u\in L^r(\mathbb{R}^s)$, где $r^{-1}=-p^{-1}+1/2$. Поскольку $V\in L^p$, из неравенства Гёльдера следует, что $Vu\in L^2$. Таким образом, $D(V)\supset D(-\Delta)$ и

$$\begin{aligned}\|Vu\|_2&\leqslant\|V\|_p\|u\|_r\leqslant\|V\|_p\|\hat{u}\|_q=\\&=\|V\|_p\|(1+tk^2)^{-1}(1+tk^2)\,\hat{u}\|_q\leqslant\\&\leqslant\|V\|_p\|(1+tk^2)^{-1}\|_p\|(1+tk^2)\,\hat{u}\|_2\leqslant\\&\leqslant(\|V\|_p\|(1+k^2)^{-1}\|_p)\,t^{-s/2p}\,(\|u\|_2+t\|-\Delta u\|_2).\end{aligned}$$

Поскольку $p>s/2$, эта оценка показывает, что $V<<-\Delta$. ∎

Доказанную теорему можно распространить на пограничный случай $p=s/2$, когда $s\geqslant 5$, но в действительности тогда справедливо более сильное утверждение:

Теорема X.21 (теорема Стрихарца). Пусть $s\geqslant 5$ и $V\in L_{\mathrm{w}}^{s/2}$. Тогда V Δ-ограничен, и его относительная грань меньше или равна $C\|V\|_{s/2,\,\mathrm{w}}$, где C зависит только от s.

Доказательство. Достаточно показать, что $\|V(I+\Delta)^{-1}\varphi\|_2 \leqslant \leqslant C\|V\|_{s/2,\,w}\|\varphi\|_2$ для всех $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^s)$. Поскольку $(I+\Delta)^{-1}\varphi = =G*\varphi$, где G—фурье-образ функции $(1+p^2)^{-1}$ на $\mathbb{R}^s$, нам понадобятся свойства G, установленные в задаче 49 *или* 50 гл. IX. Учитывая экспоненциальное убывание $G(x)$ на ∞ и оценку $\overline{\lim\limits_{|x|\to 0}}\, |x|^{s-2}|G(x)| < \infty$, легко установить, что мера Лебега $\mu\{x\,|\,|G(x)|\geqslant t\}$ ограничена величиной $C_2 t^{s/(s-2)}$ при некотором $C_2 > 0$. В итоге с помощью неравенства из задачи 39 гл. IX, взятого при $p=s/2$ и $q=2$, получаем

$$\|V(G*\varphi)\|_2 \leqslant C_3\|V\|_{s/2,\,w}\|G\|_{s/(s-2),\,w}\|\varphi\|_2. \quad \blacksquare$$

Следствие. Пусть μ—мера Лебега на $\mathbb{R}^s$ при $s\geqslant 5$. Если $V(x)$—вещественнозначная измеримая функция и

$$\lim_{t\to\infty} t^{s/2}\mu\{x\,|\,|V(x)|\geqslant t\}=0,$$

то $V<<-\Delta$. В частности, если $V\in L^{s/2}(\mathbb{R}^s)$, то $V<<-\Delta$.

Пример 4. Пусть $s=5$. Из теорем X.10 и X.11 следует, что $-\Delta+\alpha/r^2$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5\setminus\{0\})$ тогда и только тогда, когда $\alpha\geqslant -1{,}25$. Далее, $-\Delta$ также самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5\setminus\{0\})$. Читатель легко проверит, что $1/r^2 \in L_w^{5/2}(\mathbb{R}^5)$, поэтому в силу теоремы Стрихарца α/r^2 ограничен относительно $-\Delta$. Таким образом, замыкание сужения $(-\Delta+\alpha/r^2)\restriction C_0^\infty(\mathbb{R}^5\setminus\{0\})$ содержит

$$(-\Delta+\alpha/r^2)\restriction C_0^\infty(\mathbb{R}^5).$$

Следовательно, в случае $\alpha<-1{,}25$ оператор $-\Delta+\alpha/r^2$ на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5)$ не самосопряжен в существенном.

В задаче 15 читателю предлагается показать, что $-d^2/dx^2+ +c/x^2$ ограничен снизу на $C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$ в смысле форм тогда и только тогда, когда $c\geqslant -1/4$. В итоге с помощью метода примера 4 дополнения к § X.1 можно заключить, что в смысле форм $-\Delta+\alpha/r^2$ ограничен снизу на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5\setminus\{0\})$ тогда и только тогда, когда $\alpha\geqslant -2{,}25$. Следовательно, если α заключено в пределах $-2{,}25\leqslant\alpha<-1{,}25$, то для определения оператора $-\Delta+\alpha/r^2$ можно применять технику квадратичных форм, использованную в теореме VIII.15, несмотря на то, что этот оператор не самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5)$ (рис. X.4).

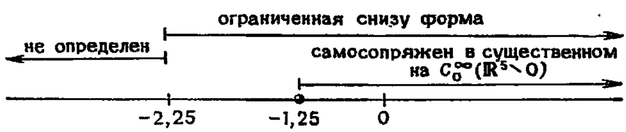

Рис. X.4. Оператор $-\Delta+(\alpha/r^2)$ при $n=5$.

Пример 5 (операторы Шредингера для систем с магнитными полями). Согласно гамильтоновой теории классической механики, энергия системы с магнитным полем, записанная через координаты $\mathbf{q}$ и канонически сопряженные импульсы $\mathbf{p}=m\dot{\mathbf{q}}+e\mathbf{A}/c$, имеет вид

$$E=\frac{1}{2m}(\mathbf{p}-e\mathbf{A}/c)^2+V(\mathbf{q}),$$

где $\mathbf{A}$ — **магнитный векторный потенциал**, связанный с **магнитным полем** $\mathbf{B}$ соотношением

$$\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}. \tag{X.25}$$

Опираясь на соответствие между классическими выражениями для энергии и квантовомеханическими операторами Гамильтона (§ VIII.11), можно убедиться, что гамильтониан n-частичной системы в магнитном поле таков:

$$H=\sum_{j=1}^{n}(2m_j)^{-1}\left(-i\nabla_j-\frac{e_j}{c}\mathbf{A}\right)^2+V(\mathbf{x}_1,\ \ldots,\ \mathbf{x}_n). \tag{X.26}$$

Особенно важен случай

$$\mathbf{A}(\mathbf{x})=\frac{1}{2}\mathbf{x}\times\mathbf{B}_0 \tag{X.27}$$

при постоянном $\mathbf{B}_0$, ибо он отвечает постоянному магнитному полю $\mathbf{B}=\mathbf{B}_0$. Такое поле приводит к так называемому эффекту Зеемана, но его описание требует специальных методов (см. § 4), поскольку $\mathbf{A}$ растет на бесконечности. Здесь же мы отметим, что методы теории возмущений действительно позволяют рассмотреть магнитные векторные потенциалы некоторого типа. Сейчас мы подробно приведем один результат, относящийся к случаю операторной теории возмущений, а анализ случая, относящегося к теории форм, оставим читателю (задача 36).

Теорема X.22. Предположим, что каждая компонента потенциала $\mathbf{A}$ — вещественнозначная функция из $L^4(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)$, что $\nabla\cdot\mathbf{A}\in L^2(\mathbb{R}^3)+L^\infty(\mathbb{R}^3)$ (в смысле обобщенных функций) и что V — вещественнозначная функция из L^2+L^∞. При $\varphi\in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ положим

$$H\varphi=-\Delta\varphi+(-2i\mathbf{A}\cdot\nabla\varphi)-i(\nabla\cdot\mathbf{A})\varphi+V\varphi+A^2\varphi.$$

Тогда H самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Доказательство. Интегрирование по частям показывает, что H симметричен на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, а условия, наложенные на V, A^2 и $\nabla\cdot\mathbf{A}$, были выбраны так, чтобы с помощью теоремы X.15 можно было вывести соотношения $V<<-\Delta$ и $\nabla\cdot\mathbf{A}<<-\Delta$. Покажем, что $\mathbf{A}\cdot\nabla << -\Delta$; с учетом теоремы X.12 отсюда будет следовать самосопряженность в существенном оператора H на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Пусть $\varphi\in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Предположим, что $A\in L^4(\mathbb{R}^3)$. В силу неравенств Гёльдера и Хаусдорфа—Юнга, имеем

$$\left\| A^{(i)}\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right\| \leqslant \|A^{(i)}\|_4\left\|\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right\|_4 \leqslant \|A^{(i)}\|_4\|p_i\hat{\varphi}(p)\|_{4/3}\leqslant$$
$$\leqslant \|A^{(i)}\|_4\|(1+|p|)^{-\alpha}\|_4\|(1+|p|)^\alpha p_i\hat{\varphi}(p)\|_2,$$

где в качестве α можно взять любое фиксированное число из интервала (3/4, 1). Для любого $a>0$ существует такое b, что, в силу теоремы Планшереля,

$$\|(1+|p|)^\alpha p_i\hat{\varphi}(p)\|_2\leqslant\|(b+a|p|^2)\hat{\varphi}(p)\|_2\leqslant$$
$$\leqslant a\|\Delta\varphi\|_2+b\|\varphi\|_2.$$

В итоге $A^{(i)}\partial/\partial x_i << -\Delta$. Утверждение, относящееся к части A, принадлежащей L^∞, может быть доказано с помощью отдельного рассмотрения. ∎

Теоремы теории возмущений просты, элегантны и применимы в таком большом числе случаев, что критерием эффективности любого другого метода доказательства самосопряженности служит применимость этого метода там, где нельзя прямо опираться на теоремы X.12, X.14 или X.17. Одним из простейших физически интересных примеров такой ситуации служит **гамильтониан ангармонического осциллятора** $-d^2/dx^2+x^2+x^4$, а также его аналоги в $\mathbb{R}^s$ и более общие операторы вида $-d^2/dx^2+x^2+x^{2m}$ $(m=2, 3, \ldots)$. И $H_0=-d^2/dx^2+x^2$, и $V=x^4$ самосопряжены в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R})$, но ни один из них не является малым возмущением другого. Мы будем использовать оператор $-d^2/dx^2+x^2+x^4$ в качестве пробного камня при оценке многих обсуждаемых далее методов доказательства самосопряженности; мы дадим пять различных доказательств самосопряженности в существенном этого оператора на $C_0^\infty(\mathbb{R})$! Все эти доказательства распространяются на случай оператора

$$\sum_{i=1}^n a_i\left(-\frac{d^2}{dx_i^2}+\omega_i^2x_i^2\right)+\sum_{i,j,k,l=1}^n b_{ijkl}x_ix_jx_kx_l$$

и доказывают его самосопряженность в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, если $a_1, \ldots, a_n>0$ и если

$$\sum_{i,j,k,l} b_{ijkl}x_ix_jx_kx_l\geqslant 0$$

для всех x. Все они, кроме двух, допускают обобщение на случай операторов возмущения вида x^{2m} и их аналогов в пространствах более высокой размерности. Отметим еще, что при рассмотрении *одномерного* ангармонического осциллятора можно применять также метод Вейля, обсуждавшийся в дополнении к § X.1.

Существует один способ совместного применения теорем X.12 и X.14 (теорем Като—Реллиха и Вюста) к операторам, которые прямо не охватываются теоремами теории возмущений. С помощью этого метода, известного как прием Конради, мы получим первое доказательство самосопряженности в существенном гамильтониана ангармонического осциллятора на $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Прием Конради доказывает самосопряженность в существенном $X+Y$ на некотором множестве D в три этапа, по следующей схеме.

(a) Найдем такой оператор Z, что сумма $X+Z$ самосопряжена в существенном на $D\subset D(X)\cap D(Z)$. При этом Z не есть малое возмущение X. Характерным примером такого Z может служить степень X на $D=C^\infty(X)$.

(b) Докажем самосопряженность в существенном на D суммы $X+Z+Y$. Обычно это делается путем доказательства $(X+Z)$-ограниченности оператора Y с $(X+Z)$-гранью, меньшей единицы, что позволяет применить теорему Като—Реллиха. Подчеркнем, что, поскольку Z не есть малое возмущение X, оператор Y может быть $(X+Z)$-ограниченным, не будучи X-ограниченным.

(c) Для некоторых b и всех $\psi\in D$ докажем оценку $\|Z\psi\|\leqslant\leqslant\|(X+Y+Z)\psi\|+b\|\psi\|$. Тогда в силу теоремы Вюста $X+Y=$ $=X+Y+Z-Z$ самосопряжен в существенном на D. Обычно эта оценка (имеющая вид (X.21a)) доказывается путем доказательства более сильной операторной оценки вида (X.21c): $Z^2\leqslant(X+Y+Z)^2+b^2$.

Конечно, применяя прием Конради, нужно разумно выбирать Z.

Пример 6 (первое доказательство самосопряженности в существенном $-d^2/dx^2+x^2+x^4$ на $C_0^\infty(\mathbb{R})$). Пусть $X=-d^2/dx^2+x^2$ и $Y=x^4$. Пусть $Z=cX^2$, где c — положительная постоянная, которую мы фиксируем в процессе доказательства. Пусть $D=$ $=C^\infty(X)=\mathscr{S}(\mathbb{R})$. Докажем самосопряженность в существенном $X+Y$ на D; простые рассуждения, позволяющие вывести отсюда самосопряженность в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R})$, читателю предлагается провести самому. Мы знаем, что функции Эрмита (см. дополнение к § V.3) образуют полное ортонормированное множество в $L^2(-\infty, \infty)$ (гл. IX, задачи 6 и 7) и что $X\psi_n=$ $=(2n+1)\psi_n$. Из дополнения к § V.3 следует, что $\operatorname{Ran}(X+1)=$ $=\mathscr{S}(\mathbb{R})$, откуда вытекает самосопряженность в существенном X на $\mathscr{S}$. В силу спектральной теоремы $X+Z$ самосопряжен в существенном на $D=C^\infty(X)$. Этим завершается первый шаг приема Конради. Перепишем X и Y с помощью операторов A, $A^\dagger$, введенных в дополнении к § V.3: $X=2A^\dagger A+1$, $Y=$

$= {}^1/_4\,(A+A^\dagger)^4$. Пользуясь неравенством

$$\| A_1^\# \ldots A_n^\# \psi \| \leqslant c_n \| X^{n/2}\psi \| \qquad (\text{X}.28)$$

(где каждый $A_i^\#$ равен либо A, либо $A^\dagger$), легко доказать, что $\| Y\psi \| \leqslant d \| X^2\psi \| \leqslant dc^{-1} \| (X+Z)\,\psi \|$. Положив $c=2d$, выведем с помощью теоремы Като—Реллиха самосопряженность в существенном $X+Y+Z$ на $\mathscr{S}(\mathbb{R})$. Этим завершается второй шаг приема Конради. Наконец, давайте докажем, что для некоторой постоянной e

$$Z^2 \leqslant (X+Y+Z)^2 + e. \qquad (\text{X}.29)$$

Вычисляем:

$$\begin{aligned}(X+Y+Z)^2 &= (X+Y)^2 + Z^2 + Z\,(X+Y) + (X+Y)\,Z = \\ &= (X+Y)^2 + Z^2 + 2cX^3 + 2cXYZ + 2c[X,\ [X,Y]] \geqslant \\ &\geqslant Z^2 + 2cX^3 + 2c[X,\ [X,\ Y]],\end{aligned}$$

где надо воспользоваться неотрицательностью Y, равенством $[X,\ [X,\ Y]] = X^2Y + YX^2 - 2XYX$ и учесть, что все проделанные манипуляции законны в применении к векторам из $\mathscr{S}(\mathbb{R})$. Наконец, заметим, что $[X,[X,\ Y]]$ можно записать как сумму 16 мономов вида $A_1^\# A_2^\# A_3^\# A_4^\#$. Таким образом, применяя теорему X.18, неравенство (X.28) и симметричность $[X,\ [X,\ Y]]$, заключаем, что

$$-[X,\ [X,\ Y]] \leqslant fX^2 \leqslant X^3 + (f+1).$$

Это доказывает (X.29) и позволяет с помощью. теоремы Вюста вывести самосопряженность в существенном оператора $X+Y = X+Y+Z-Z$ на D.

Еще раз прием Конради мы используем в примере 3 § X.9 (см. также задачу 22).

X.3. Положительность и самосопряженность I: квадратичные формы

Выше уже было доказано несколько утверждений о положительных или полуограниченных операторах; см., например, теоремы X.12 и X.17. В этом и следующем разделах мы воспользуемся двумя различными понятиями положительности для доказательства новых теорем о самосопряженности. В настоящем разделе применяется понятие положительного оператора и техника квадратичных форм. В следующем—тот факт, что при обычной в приложениях реализации гильбертова пространства в виде $L^2(M,\ d\mu)$ оно содержит выделенный конус неотрицательных почти всюду функций. Другие приложения условий поло-