X.4. Положительность и самосопряженность II: поточечная положительность

Результаты предыдущего раздела основывались на понятии положительного оператора, имеющем смысл в любом гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$. В этом разделе мы используем положительность другого типа. Она связана с L^2-пространствами и основана на понятии положительного вектора. Это понятие внутренне присуще не самому $\mathscr{H}$, а его реализации как L^2-пространства. Оно будет появляться неоднократно на протяжении этого курса и будет играть основную роль в § XIII.11. Поскольку гильбертово пространство квантовой механики обычно задается как некоторое L^2-пространство, оно обладает структурой, порождаемой положительными векторами. Имея положительные векторы, можно ввести положительные операторы умножения, т. е. операторы умножения $\psi(x) \mapsto V(x)\psi(x)$, переводящие положительные векторы в положительные. Главный результат этого раздела касается самосопряженности в существенном операторов: $-\Delta+V(x)$, когда $V \geqslant 0$ удовлетворяет некоторым весьма слабым дополнительным условиям, и шредингерова гамильтониана системы с произвольным магнитным полем.

Сначала распространим понятие положительности на обобщенные функции.

Определение. Пусть $T \in \mathscr{D}'(\mathbb{R}^n)$. Будем говорить, что обобщенная функция T **положительна**, и писать $T \geqslant 0$, если $T(f) \geqslant 0$ для всех поточечно неотрицательных f из $\mathscr{D}$. В случае если T, $S \in \mathscr{D}'$ и $T-S \geqslant 0$, будем писать $T \geqslant S$.

Сразу же отметим два факта о положительных обобщенных функциях. Во-первых, если $T(f)=\int F(x) f(x)\,d^n x$, где F — непрерывная функция на $\mathbb{R}^n$, то $T \geqslant 0$ в том и только том случае, когда $F(x) \geqslant 0$ для всех x. Во-вторых, если T_n — последовательность положительных обобщенных функций и $T_n \to T$ слабо, то предел T положителен.

Наш результат о самосопряженности основывается на следующем элегантном неравенстве для обобщенных функций.

Теорема X.27 (неравенство Като). Пусть функция u на $\mathbb{R}^n$ локально принадлежит L^1 и ее лапласиан Δu в смысле обобщенных функций также локально принадлежит L^1. Положим

$$(\operatorname{sgn} u)(x)=\begin{cases} 0, & \text{если } u(x)=0, \\ \overline{u(x)}/|u(x)|, & \text{если } u(x) \neq 0, \end{cases}$$

так что $\operatorname{sgn} u \in L^\infty$, а $(\operatorname{sgn} u)\Delta u$ локально принадлежит L^1 и потому является обобщенной функцией. Тогда лапласиан $\Delta|u|$

в смысле обобщенных функций удовлетворяет следующему неравенству:

$$\Delta |u| \geqslant \operatorname{Re}[(\operatorname{sgn} u) \Delta u]. \tag{X.30}$$

Пример 1. Чтобы облегчить понимание этого результата, рассмотрим случай $n=1$ с функцией $u \in C^\infty(\mathbb{R})$, строго положительной при $x>0$ и строго отрицательной при $x<0$. Тогда $|u|$ есть C^∞-функция на $\mathbb{R}\diagdown\{0\}$, но в точке $x=0$ ее первая производная испытывает скачок величины $2u'(0)$. Поэтому

$$\frac{d^2}{dx^2}|u| = (\operatorname{sgn} u)\frac{d^2}{dx^2}u + 2u'(0)\,\delta(x)$$

и (X.30) выполняется, ибо $u'(0) \geqslant 0$.

Доказательство теоремы X.27. Предположим сначала, что u принадлежит классу C^∞, и пусть u_ε задана формулой

$$u_\varepsilon(x) = \sqrt{|u(x)|^2 + \varepsilon^2}, \tag{X.31}$$

так что u_ε тоже принадлежит классу C^∞. Дифференцируя квадрат (X.31), получаем

$$2u_\varepsilon(x)[\operatorname{grad} u_\varepsilon(x)] = 2\operatorname{Re}[\overline{u(x)}\,(\operatorname{grad} u(x))]. \tag{X.32}$$

Поскольку из (X.31) следует, что $|u_\varepsilon| \geqslant |u|$, из (X.32) следует, что

$$|\operatorname{grad} u_\varepsilon| \leqslant |\overline{u(x)}|\,|u_\varepsilon(x)|^{-1}|\operatorname{grad} u(x)| \leqslant |\operatorname{grad} u(x)|. \tag{X.33}$$

Беря дивергенцию от (X.32), получаем

$$u_\varepsilon \Delta u_\varepsilon + |\operatorname{grad} u_\varepsilon|^2 = \operatorname{Re}(\bar{u}\,\Delta u) + |\operatorname{grad} u|^2;$$

с учетом (X.33) это дает неравенство

$$u_\varepsilon \Delta u_\varepsilon \geqslant \operatorname{Re}(\bar{u}\,\Delta u)$$

поточечно и, следовательно, в смысле обобщенных функций.

В результате

$$\Delta u_\varepsilon \geqslant \operatorname{Re}(\operatorname{sgn}_\varepsilon(u)\,\Delta u), \tag{X.34}$$

где

$$\operatorname{sgn}_\varepsilon(u(x)) = \overline{u(x)}/u_\varepsilon(x).$$

Теперь пусть u — произвольная локально суммируемая функция, $\Delta u \in L^1_{\mathrm{loc}}$, и пусть j_δ — аппроксимативная единица, т. е. $j_\delta(x) = j(x/\delta)\delta^{-n}$, где $j \geqslant 0$, $j \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ и $\int j(x)\,d^nx = 1$. Пусть $u^\delta = u * j_\delta$. Поскольку u^δ бесконечно дифференцируема,

$$\Delta(u^\delta)_\varepsilon \geqslant \operatorname{Re}(\operatorname{sgn}_\varepsilon(u^\delta)\,\Delta u^\delta) \tag{X.35}$$

для любых ε, $\delta>0$. Фиксируем $\varepsilon>0$ и устремим δ к 0. Тогда $u^\delta \to u$ по локальной L^1-норме, а потому и в $\mathscr{D}'$. В частности, переходя к подпоследовательности, можно считать, что $u^\delta(x) \to u(x)$ поточечно почти всюду. Следовательно, $\operatorname{sgn}_\varepsilon(u^\delta) \to \operatorname{sgn}_\varepsilon(u)$ поточечно почти всюду. Так как $\Delta u^\delta = (\Delta u)^\delta$ и $\Delta u \in L^1_{\text{loc}}$, то $\Delta u^\delta \to \Delta u$ в L^1_{loc}. Теперь легко видеть, что $\operatorname{sgn}_\varepsilon(u^\delta)\,\Delta u^\delta \to \operatorname{sgn}_\varepsilon(u)\,\Delta u$ в $\mathscr{D}'$, и потому, устремив δ в (X.35) к 0, заключаем, что (X.34) выполняется для u. Теперь устремим к нулю ε. Тогда последовательность $\operatorname{sgn}_\varepsilon(u)$ сходится к $\operatorname{sgn}(u)$ поточечно, оставаясь равномерно ограниченной ($|\operatorname{sgn}_\varepsilon u| \leqslant 1$), так что обе части (X.34) сходятся в $\mathscr{D}'$ к соответствующим частям (X.30). ∎

Типичным приложением теоремы X.27 служит

Теорема X.28. Пусть $V \in L^2(\mathbb{R}^n)_{\text{loc}}$ и $V \geqslant 0$ поточечно. Тогда $-\Delta+V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Доказательство. В силу теоремы X.26 нужно только доказать, что из

$$(-\Delta+V+1)^* u = 0 \qquad \text{(X.36)}$$

следует $u=0$. Но в силу того, что область определения $-\Delta+V$ равна C_0^∞, равенство (X.36) эквивалентно равенству

$$(-\Delta+V+1)\,u=0, \qquad u \in L^2(\mathbb{R}^n), \qquad \text{(X.37)}$$

где производная понимается в смысле обобщенных функций. Из (X.35) следует, что $\Delta u = (Vu+u) \in L^1_{\text{loc}}$, поскольку и u, и $V+1$ лежат в L^2_{loc}. Таким образом, в силу теоремы X.27

$$\Delta|u| \geqslant \operatorname{Re}(\operatorname{sgn} u\, \Delta u) = \operatorname{Re}(\operatorname{sgn} u\,(Vu+u)) = (V+1)\,|u|. \qquad \text{(X.38)}$$

В частности, $\Delta|u| \geqslant 0$.

Пусть j_δ — аппроксимативная единица, как в предыдущей теореме, и пусть $w=|u|$, $w^\delta = w * j^\delta$. Тогда $\Delta w^\delta = w * \Delta j_\delta \in L^2$, так что $w^\delta \in D(\Delta)$ и потому $(w^\delta, \Delta w^\delta) \leqslant 0$, причем равенство имеет место только при $w^\delta=0$. Но $\Delta w^\delta = \Delta|u| * j_\delta \geqslant 0$ в смысле обобщенных функций и потому $\Delta w^\delta \geqslant 0$ поточечно. Таким образом, $(w^\delta, \Delta w^\delta) \geqslant 0$, так что $w^\delta=0$. Поскольку $w^\delta \to w$ при $\delta \to 0$, имеем $w=0$ и, следовательно, $u=0$. ∎

Пример 2 (самосопряженность в существенном оператора $-d^2/dx^2+x^2+x^4$ на $C_0^\infty(\mathbb{R})$; второе доказательство). Поскольку функция x^2+x^4 положительна и локально принадлежит L^2, из теоремы X.28 следует, что $-d^2/dx^2+x^2+x^4$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R})$. И вообще, $-\Delta+P(x_1, \ldots, x_n)$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ при любом ограниченном снизу полиноме P.

Пример 3. Пусть $V(x)=2|x|^{-2}$ в $L^2(\mathbb{R}^5)$. Тогда $-\Delta+V$ в силу теоремы X.28 (или теоремы X.11) самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5)$. С другой стороны, $V\in L^2_{\text{loc}}$ и $-\Delta-V$ ограничен снизу, но не самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^5)$ (см. теорему X.11 и пример 4 в § X.2). Таким образом, условие $V\geqslant 0$ в теореме X.28 полностью исключить нельзя.

Теорема X.28 допускает много различных обобщений.

Теорема X.29. Пусть $V=V_1+V_2$, где $V_1\geqslant 0$, $V_1\in L^2(\mathbb{R}^n)_{\text{loc}}$ и V_2 — ограниченный относительно $-\Delta$ оператор умножения с $-\Delta$-гранью $a<1$. Тогда $-\Delta+V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. В частности, если V — такой оператор умножения, что $V_+=\max(V,\,0)\in L^2_{\text{loc}}$ и $V_-=\min(V,\,0)\in L^p+L^\infty$, где $p=2$ при $n\leqslant 3$, $p>2$ при $n=4$ и $p=n/2$ при $n\geqslant 5$, то $-\Delta+V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Доказательство. После повторения аргументов теоремы X.28 остается только показать, что если $(-\Delta+V+b)\,u=0$ (в смысле обобщенных функций) и $u\in L^2(\mathbb{R}^n)$, то $u=0$; здесь b — большая константа, которую мы выберем ниже. Поскольку $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)\subset\subset D(-\Delta)\subset D(V_2)$, имеем $V_2\in L^2_{\text{loc}}$; поэтому с помощью неравенства Като получаем аналог (X.38):

$$\Delta|u|\geqslant(V+b)\,|u|\geqslant(V_2+b)\,|u|.$$

Таким образом,

$$(-\Delta+b)\,|u|\leqslant -V_2\,|u|. \qquad \text{(X.39)}$$

Теперь, пользуясь явным выражением для ядра оператора $(-\Delta+b)^{-1}$ (задача 50 гл. IX), можно убедиться, что он переводит положительные элементы $\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$ в положительные, а поскольку этот оператор самосопряжен, он переводит в себя и множество положительных элементов из $\mathscr{S}'(\mathbb{R}^n)$. Более того, поскольку V_2 ограничен относительно $-\Delta$,

$$\left|\int V_2(x)\,|u(x)|\,f(x)\,dx\right|\leqslant(\text{const})\,\|u\|_{L_2}\|(-\Delta+1)f\|,$$

так что $V_2|u|$ — обобщенная функция медленного роста. В итоге (X.39) дает

$$|u|\leqslant-(-\Delta+b)^{-1}V_2\,|u|. \qquad \text{(X.40)}$$

Так как $-\Delta$-грань оператора V_2 меньше 1, можно выбрать b таким, что $\|(-\Delta+b)^{-1}V_2\|\leqslant(a+1)/2<1$. Тогда, в силу (X.40),

$$\|u\|\leqslant\|(-\Delta+b)^{-1}V_2\|\,\|u\|,$$

и потому $\|u\|=0$. ∎

Приведем без доказательства теорему, обобщающую часть теоремы X.11 на нецентральный случай.

Теорема X.30 (Кальф—Вальтер—Шминке—Саймон). Пусть $V=V_1+V_2$, где $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ и $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})_{\mathrm{loc}}$, удовлетворяет неравенству

$$V_1(\mathbf{r}) \geqslant -n(n-4)/4r^2.$$

Тогда $-\Delta+V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$.

Доказательство, использующее неравенство Като, можно найти в работах, указанных в Замечаниях.

Теорема X.29 допускает другое доказательство, интересное тем, что оно опирается на следующий красивый результат о положительности в L^2-пространствах.

Определение. Ограниченный оператор A в $L^2(X, d\mu)$ называется **сохраняющим положительность**, если $(A\varphi)(x) \geqslant 0$ почти всюду, когда $\varphi(x) \geqslant 0$ почти всюду. Полугруппа $\{T(t)\}$ называется сохраняющей положительность, если таковы операторы $T(t)$ при каждом $t \geqslant 0$.

Теорема X.31 (Дэвис—Фари). Пусть H_0—такой положительный самосопряженный оператор в $L^2(X, d\mu)$, что полугруппа $\exp[-tH_0]$ сохраняет положительность. Пусть V—оператор умножения и $V \geqslant 0$. Предположим, что $H=H_0+V$ самосопряжен в существенном на $D(H_0) \cap D(V)$. Пусть W—оператор умножения, ограниченный относительно H_0. Тогда W ограничен относительно H, причем если

$$\|W\psi\| \leqslant a\|(H_0+b)\psi\| \quad \text{при всех } \psi \in D(H_0),$$

то

$$\|W\psi\| \leqslant a\|(H+b)\psi\| \quad \text{при всех } \psi \in D(H).$$

Доказательство. Предположим, что $\|W(H_0+b)^{-1}\| \leqslant a$. Покажем, что

$$\|W(H+b)^{-1}\| \leqslant a.$$

Поскольку $\exp[-tH_0]$ сохраняет положительность, этим свойством обладает и $(H_0+b)^{-1} = \int\limits_0^\infty e^{-bt} \exp[-tH_0]\, dt$. Кроме того, в силу теоремы Троттера, $\exp[-tH] = \operatorname{s-lim}\limits_{n\to\infty} (\exp[-tH_0/n] \times \exp[-tV/n])^n$ сохраняет положительность, и потому $(H+b)^{-1}$ обладает тем же свойством. Дальше мы докажем (см. теорему X.55), что в случае, когда A ограничен и сохраняет положительность, $|A\psi| \leqslant A|\psi|$ поточечно для всех ψ. По этой причине сейчас нужно только доказать, что

$$\| W(H+b)^{-1}|\psi|\| \leqslant a\|\psi\|$$

для всех ψ. Если показать, что (поточечно)

$$0 \leqslant (H+b)^{-1}\varphi \leqslant (H_0+b)^{-1}\varphi \qquad (X.41a)$$

для всех $\varphi \geqslant 0$, то отсюда будет следовать, что (поточечно)

$$0 \leqslant |W|(H+b)^{-1}\varphi \leqslant |W|(H_0+b)^{-1}\varphi \qquad (X.41b)$$

и

$$\| W(H+b)^{-1}|\psi|\| \leqslant a\|\psi\|$$

для всех ψ.

Итак, предположим, что $\varphi \geqslant 0$. Тогда, поскольку $|e^{-sV}| \leqslant 1$ и $\exp[-sH_0]$ сохраняет положительность,

$$e^{-sH_0}(1-e^{-sV})\varphi \geqslant 0,$$

так что

$$0 \leqslant (e^{-sH_0}e^{-sV})\varphi \leqslant e^{-sH_0}\varphi. \qquad (X.42)$$

Итерируя (X.42), получаем

$$0 \leqslant (e^{-tH_0/n}e^{-tV/n})^n\varphi \leqslant e^{-tH_0}\varphi,$$

и в силу формулы Троттера

$$0 \leqslant e^{-tH}\varphi \leqslant e^{-tH_0}\varphi. \qquad (X.43)$$

Неравенство (X.41b) выводится из (X.43), если выразить оператор $(H+b)^{-1}$ через $\exp[-tH]$ с помощью преобразования Лапласа. ∎

В качестве следствия теоремы Дэвиса—Фари получаем

Второе доказательство теоремы X.29. В силу теоремы X.28 оператор $-\Delta+V_1$ самосопряжен в существенном на $D(\Delta)\cap D(V_1)$. Более того, $\exp[t\Delta]$ сохраняет положительность, что следует из явного вида ядра (IX.31). Таким образом, используя условия теоремы X.29 и теорему X.31, получаем $(-\Delta+V_1)$-ограниченность V_2 с $(-\Delta+V_1)$-гранью, меньшей 1, и по этой причине $(-\Delta+V_1+V_2)$ самосопряжен в существенном на любой существенной области для $-\Delta+V_1$ (теорема Като—Реллиха). ∎

Неравенство Като можно также использовать для изучения $D(-\Delta+V)$, когда сумма $-\Delta+V$ определена в смысле квадратичных форм:

Теорема X.32. Пусть $V \geqslant 0$ лежит в $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$. Пусть $H=-\Delta+V$ определено как сумма квадратичных форм. Тогда $D(H)$ равна

$$\{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid V\varphi \in L^1_{\text{loc}};\ (-\Delta\varphi+V\varphi)_{\text{о. ф.}} \in L^2\}, \qquad (X.44)$$

где $(-\Delta\varphi+V\varphi)_{\text{о.ф.}}$—обобщенная функция $f \to \int \varphi(-\Delta f)+\int (V\varphi) f$. Более того, $H\varphi=(-\Delta\varphi+V\varphi)_{\text{о.ф.}}$.

Доказательство. Пусть T—оператор с областью определения (X.44) и $T\varphi=-\Delta\varphi+V\varphi$. Прежде всего мы утверждаем, что T расширяет H. Действительно, пусть $\varphi \in D(H) \subset Q(H) = Q(-\Delta) \cap Q(V)$. Поскольку $\varphi \in Q(V)$, имеем $|V|^{1/2}\varphi \in L^2$, а поскольку $|V|^{1/2} \in L^2_{\text{loc}}$, мы заключаем, что $V\varphi \in L^1_{\text{loc}}$. Более того, H: $\mathscr{H}_{+1} \to \mathscr{H}_{-1}$ совпадает с $-\Delta+V$, определенным в смысле обобщенных функций, поэтому в силу построения $D(H)$, проведенного в теореме VIII.15, $H\varphi=(-\Delta\varphi+V\varphi) \in L^2$, т. е. $\varphi \in D(T)$ и $H\varphi=T\varphi$.

Предположим теперь, что $\eta \in D(T)$. Поскольку H самосопряжен и положителен, можно найти $\varphi \in D(H)$ со свойством $(T+1)\eta=(H+1)\varphi$. Пусть $\psi=\eta-\varphi$. Тогда благодаря тому, что T расширяет H, имеем $(T+1)\psi=0$. Так как $\psi \in D(T)$, то $-\Delta\psi=T\psi-V\psi=(-\psi-V\psi) \in L^1_{\text{loc}}$; поэтому применимо неравенство Като, которое дает

$$\Delta|\psi| \geqslant (\operatorname{sgn}\psi)(\psi+V\psi)=(V+1)|\psi| \geqslant 0.$$

Как и при доказательстве теоремы X.28, отсюда следует, что $\psi=0$. Таким образом, $\eta=\varphi \in D(H)$, т. е. $D(T) \subset D(H)$, и потому $T=H$. ∎

Теперь обратимся к приложениям неравенства Като к операторам Шредингера систем в магнитных полях. Прежде всего, нам нужен более общий вариант этого неравенства:

Теорема X.33. Пусть a_k $(k=1, \ldots, n)$—вещественнозначные функции из $C^1(\mathbb{R}^n)$. Пусть D_k—оператор на $\mathscr{D}'$ следующего вида:

$$D_k T=\frac{1}{i}\frac{\partial T}{\partial x_k}-a_k T$$

и $D^2=\sum D_k^2$. Тогда для любой функции $u \in L^1_{\text{loc}}$, такой, что $D^2 u \in L^2_{\text{loc}}$, справедливо неравенство

$$\Delta|u| \geqslant -\operatorname{Re}[(\operatorname{sgn} u) D^2 u]. \tag{X.45}$$

Основную дополнительную идею, нужную для доказательства теоремы X.33 после того, как уже доказана теорема X.27, дает следующая

Лемма. В условиях теоремы X.33 функции Δu и ∇u лежат в L^1_{loc}.

Доказательство. Нужно только показать, что Δu, ∇u локально лежат в L^1 около $x=0$. Пусть f—функция из C_0^∞, тождественно равная 1 около нуля. Тогда с помощью явного вычисления получаем

$$(-\Delta+1)(fu)=h_1+\nabla\cdot\mathbf{h}_2, \tag{X.46}$$

где

$$h_1 = fD^2u + (\Delta f)\, u + if\, (\nabla\cdot\mathbf{a})\, u - 2i\, (\nabla f)\cdot\mathbf{a}u + (a^2+1)\, fu,$$
$$\mathbf{h}_2 = 2if\mathbf{a}u - 2\,(\nabla f)\, u.$$

Важно то, что в силу условий теоремы $h_1 \in L^1$, $\mathbf{h}_2 \in L^2$ и $fu \in L^2$. В итоге все функции в (X.46) лежат в $\mathscr{S}'(\mathbb{R}^n)$. Поскольку $(-\Delta+1)$ обратим на $\mathscr{S}$, он обратим и на $\mathscr{S}'$, так что

$$fu = (-\Delta+1)^{-1}h_1 + (-\Delta+1)^{-1}\nabla\cdot\mathbf{h}_2$$

и

$$\nabla(fu) = \nabla(-\Delta+1)^{-1}h_1 + \nabla(-\Delta+1)^{-1}\nabla\cdot\mathbf{h}_2.$$

Далее, преобразование Фурье функции $\mathbf{h}_2 \in L^2$ само лежит в L^2, так что

$$\nabla_i(-\Delta+1)^{-1}\,\nabla\cdot\mathbf{h}_2 = \mathscr{F}^{-1}\Big(p_i(p^2+1)^{-1}\sum_j p_j\cdot\hat{h}_j\Big)$$

принадлежит L^2, ибо $p_ip_j(p^2+1)^{-1} \in L^\infty$. Пусть $G_i(x)$ — обобщенная функция, у которой $\hat{G}_i(p) = (2\pi)^{-n/2}p_i(p^2+1)^{-1}$. Следуя методам задачи 50 гл. IX, можно доказать, что $G_i(x)$ непрерывна вне $x=0$, экспоненциально убывает на бесконечности и $|G_i(x)| \leqslant \leqslant C|x|^{-n+1}$ ($\ln|x|$, если $n=1$). Таким образом, $G_i \in L^p$ при некотором $p>1$ и потому в силу неравенства Юнга $G_i * h_1 \in L^p$. Мы видим, что $\nabla(fu)$ лежит в L^1_{loc} и, следовательно, $\nabla u \in L^1_{\text{loc}}$ около нуля, откуда $\nabla\cdot\mathbf{h}_2 \in L^1_{\text{loc}}$, так что в силу (X.46) $-\Delta u \in L^1_{\text{loc}}$. ∎

Доказательство теоремы X.33. Предположим сначала, что $u \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$, и пусть u_ε задано с помощью (X.31). Тогда (X.32) с учетом равенства $\operatorname{Im}(\overline{u(x)}\, a_j(x)\, u(x)) = 0$ дает

$$u_\varepsilon\,\mathrm{grad}_k\, u_\varepsilon = \operatorname{Re}[\overline{u(x)}\,(iD_ku)(x)], \tag{X.47}$$

так что

$$|\mathrm{grad}\, u_\varepsilon| \leqslant |Du|. \tag{X.48}$$

Беря дивергенцию от (X.47) и пользуясь соотношением

$$\begin{aligned}\partial_k[\bar{u}\,(iD_ku)] &= (\partial_k\bar{u})\,(iD_ku) + \bar{u}\,(\partial_k\,(iD_ku)) = \\ &= \overline{[(\partial_k - ia_k)\, u]}\,(iD_ku) + \bar{u}\,(\partial_k - ia_k)\,(iD_ku) = \\ &= |D_ku|^2 - \bar{u}D_k^2u,\end{aligned}$$

получаем

$$\Delta u_\varepsilon \geqslant -\operatorname{Re}[\mathrm{sgn}_\varepsilon(u)\, D^2u]. \tag{X.49}$$

Мы применяли (X.48) так же, как в доказательстве теоремы X.27. Как и в этом доказательстве, приблизим заданную $u \in L^2_{\text{loc}}$ с $D^2u \in L^1_{\text{loc}}$ функцией u^δ. Поскольку в силу леммы из $u \in L^2_{\text{loc}}$

и $D^2u \in L^1_{\rm loc}$ следует, что Δu и ∇u лежат в $L^1_{\rm loc}$, мы заключаем, что $D^2u^\delta \to D^2u$ в $L^1_{\rm loc}$. Таким образом, (X.49) выполняется для любой функции u, удовлетворяющей условиям теоремы, а (X.45) следует из (X.49) при $\varepsilon \to 0$. ∎

Теорема X.34. Пусть $a_k \in C^1(\mathbb{R}^n)$. Пусть $V = V_1 + V_2$, где V_1, V_2 удовлетворяют условиям теоремы X.29. Тогда оператор

$$H = -\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2m_j}(\partial_j - ia_j)^2 + V$$

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

Доказательство. Следуя доказательству теоремы X.29, применим (X.45) вместо (X.30) и заметим, что u, к которой мы применяем (X.45), лежит в $L^2_{\rm loc}$, а не только в $L^1_{\rm loc}$. ∎

Пример 4 (эффект Зеемана). Пусть $\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x} \times \mathbf{B}_0$, где $\mathbf{B}_0$ — константа. Гамильтониан N-электронного атома в постоянном внешнем магнитном поле имеет вид

$$H = -\frac{1}{2M}(\boldsymbol{\partial}_0 - iNe\mathbf{a}(\mathbf{x}_0)/c)^2 - \frac{1}{2m}\sum_{n=1}^{N}(\boldsymbol{\partial}_n + ie\mathbf{a}(\mathbf{x}_n)/c)^2 -$$
$$-\sum_{n=1}^{N}\frac{Ne^2}{|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_0|} + \frac{1}{2}\sum_{n \neq m}\frac{e^2}{|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m|}.$$

В силу теоремы X.34 H самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3N+3})$.

Можно значительно ослабить условия гладкости, налагаемые на $\mathbf{a}$, если выбрать **кулонову калибровку**, т. е. потребовать, чтобы $\operatorname{div}\mathbf{a} = 0$ (в смысле обобщенных функций). Заметим, что в этом случае

$$D^2u = -\Delta u - 2i\mathbf{a}\cdot\nabla u + \mathbf{a}^2 u,$$

так что D^2 можно определить на C_0^∞ без всяких предположений о гладкости $\mathbf{a}$; нужна только локальная принадлежность $\mathbf{a}$ пространству $L^4_{\rm loc}$. Дополнительное условие $\operatorname{div}\mathbf{a} = 0$ весьма обычно для физической литературы. Чтобы понять почему, давайте действовать формально. Возьмем $\lambda(x)$ и положим $\tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{a} + \operatorname{grad}\lambda$. Заметим, что это не изменяет магнитного поля $\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{a}$, т. е. $\operatorname{rot}\mathbf{a} = \operatorname{rot}\tilde{\mathbf{a}}$. Если $\tilde{\mathbf{D}} = (i\boldsymbol{\partial} - \tilde{\mathbf{a}})$, то

$$\tilde{\mathbf{D}} = e^{-i\lambda}\mathbf{D}e^{i\lambda},$$

так что

$$e^{-i\lambda}(-D^2 + V)e^{i\lambda} = -\tilde{D}^2 + V.$$

Таким образом, $-D^2+V$ и $-\tilde{D}^2+V$ формально унитарно эквивалентны и калибровочное преобразование $\mathbf{a} \mapsto \tilde{\mathbf{a}}$ не изменяет магнитного поля. Если λ не принадлежит C^∞, то $-\tilde{D}^2+V$ может иметь в качестве своей существенной области $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, тогда как для $-D^2+V$ это множество не является существенной областью (скорее уж таковым будет множество $e^{i\lambda}(C_0^\infty)$). Таким образом, интересуясь самосопряженностью в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, нужно быть готовым к переходу к удобной калибровке. Решая уравнение в частных производных $-\Delta\lambda = \operatorname{div}\mathbf{a}$, всегда можно найти $\tilde{\mathbf{a}}$ с $\operatorname{div}\tilde{\mathbf{a}}=0$, так что $\mathbf{a}$ и $\tilde{\mathbf{a}}$ связаны калибровочным преобразованием.

Следующая теорема доказывается в одной работе, указанной в Замечаниях.

Теорема X.35. Пусть V удовлетворяет условиям теоремы X.29. Предположим, что $\tilde{\mathbf{a}} \in L^q_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$, $q \geqslant 4$, $q > n$ и $\operatorname{div}\tilde{\mathbf{a}}=0$ (в смысле обобщенных функций). Тогда оператор

$$-\sum_{j=1}^{n}(\partial_j - ia_j)^2 + V$$

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

X.5. Коммутаторная теорема

Многие факты о самосопряженности, обсуждавшиеся до сих пор, относились только к полуограниченным операторам и формам. Кроме того, и в теореме Като—Реллиха и КЛМН-теореме существенно, что возмущения положительных операторов, о которых в них идет речь, полуограничены. В этом разделе доказывается несколько теорем, полезных при доказательстве самосопряженности неполуограниченных операторов. В конце раздела с помощью этих теорем изучается гамильтониан, описывающий эффект Штарка, т. е. гамильтониан атома в постоянном электрическом поле.

Хотя оператор A, самосопряженность которого мы хотим установить, не будет полуограниченным, мы будем предполагать, что его можно различными способами оценить с помощью вспомогательного самосопряженного оператора N, который полуограничен. На протяжении всего этого раздела мы считаем, что $N \geqslant I$, и обозначаем через $\mathcal{H}_n$, $n=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, пополнение $D(N^{n/2})$ по норме

$$\|\psi\|_n = \|N^{n/2}\psi\|. \tag{X.50}$$

Таким образом, у нас возникает шкала пространств $\ldots \supset \mathcal{H}_n \supset \supset \mathcal{H}_{n+1} \ldots$, обсуждавшаяся в дополнении к § IX.4 и впервые