Прямая элементарная формальная выкладка показывает, что

$$1 \otimes H_S(A) = (2m)^{-1}[H_D^2(A) - m^2].$$

Если A из C^1, причем A и ∇A ограничены, то эта формальная выкладка приводит к равенству на уровне самосопряженных операторов. Если, кроме того, $|A(r)| \leqslant C(1+r)^{-1-\varepsilon}$, то $\Omega^{\pm}(H_D(A), H_D(0))$ существуют, как можно установить методом стационарной фазы. Далее, если применим принцип инвариантности (теорема XI.23), то

$$\Omega^{\pm}(H_D(A), H_D(0)) = 1 \otimes \Omega^{\pm}(H_S(A), H_S(0)).$$

Тем самым продемонстрировано отсутствие релятивистских поправок к рассеянию, по крайней мере если рассеяние описывается в переменных координат и импульсов. Разумеется, если в описании участвуют асимптотические скорости или энергии, то не следует забывать о релятивистской кинематике.

XI.4. Квантовое рассеяние I: двухчастичный случай

Мы рассмотрим особенно подробно рассеяние в двухчастичной квантовой системе, или, что эквивалентно, рассеяние одной частицы во внешнем потенциале. Это наиболее тщательно изученный раздел теории рассеяния, и здесь существует множество разнообразных интересных результатов.

Гильбертово пространство системы двух частиц представимо в виде

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}^6),$$

а свободный гамильтониан равен

$$\tilde{H}_0 = -\frac{1}{2\mu_1}\Delta_1 - \frac{1}{2\mu_2}\Delta_2,$$

где Δ_i — трехмерный лапласиан по координате $\mathbf{r}_i$, причем $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^3$, а пара $\mathbf{r} = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle$ — точка в $\mathbb{R}^6$. Гамильтониан со взаимодействием равен

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

где V — функция из $L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Поэтому, согласно теореме Като (теорема X.16), $\tilde{H}$ самосопряжен в $C_0^\infty(\mathbb{R}^6)$. Позже мы наложим на V более жесткие ограничения.

Прежде всего произведем замену координат, чтобы отделить движение центра масс. Новыми координатами будут

$$\mathbf{R} = (\mu_1 + \mu_2)^{-1}(\mu_1 \mathbf{r}_1 + \mu_2 \mathbf{r}_2), \qquad \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Пусть U — унитарный оператор в $L^2(\mathbb{R}^6)$, заданный отображением

$$(Uf)(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f((\mu_1 + \mu_2)^{-1}(\mu_1 \mathbf{x} + \mu_2 \mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

и пусть $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ обозначают операторы умножения на координату. Обозначим $U\mathbf{r}_1U^{-1}$ через $\mathbf{R}$, а $U\mathbf{r}_2U^{-1}$ через $\mathbf{r}_{12}$. Тогда

$$U\tilde{H}U^{-1} = -\frac{1}{2(\mu_1+\mu_2)}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2m}\Delta_{\mathbf{r}_{12}} + V(\mathbf{r}_{12}),$$

$$U\tilde{H}_0U^{-1} = -\frac{1}{2(\mu_1+\mu_2)}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2m}\Delta_{\mathbf{r}_{12}},$$

где $m^{-1} = \mu_1^{-1} + \mu_2^{-1}$ (задача 40). Запишем далее $L^2(\mathbb{R}^6)$ в виде $L^2(\mathbb{R}^3)\otimes L^2(\mathbb{R}^3)$, причем теперь переменные суть $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}_{12}$. Тогда $U\tilde{H}_0U^{-1}$ и $U\tilde{H}U^{-1}$ как операторы в $\tilde{D} \equiv C_0^\infty(\mathbb{R}^3)\otimes C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \subset C_0^\infty(\mathbb{R}^6)$ можно разложить следующим образом:

$$U\tilde{H}_0U^{-1} = h_0\otimes I + I\otimes H_0, \qquad U\tilde{H}U^{-1} = h_0\otimes I + I\otimes H,$$

где

$$h_0 = -[2\mu_1+2\mu_2]^{-1}\Delta, \quad H_0 = -(2m)^{-1}\Delta, \quad H = -(2m)^{-1}\Delta + V(r).$$

Таким образом, $e^{-itU\tilde{H}_0U^{-1}} = e^{-ith_0}\otimes e^{-itH_0}$ и $e^{-itU\tilde{H}U^{-1}} = e^{-ith_0}\otimes \otimes e^{-itH}$. Так как эти операторы отличаются только вторыми сомножителями, то определим волновые операторы $\Omega^\pm$ и оператор рассеяния S для системы $\{e^{-itH}, e^{-itH_0}\}$ на $L^2(\mathbb{R}^3)$. Тогда волновые операторы и оператор рассеяния для исходной системы будут задаваться посредством $U^{-1}(I\otimes\Omega^\pm)U$ и $U^{-1}(I\otimes S)U$.

Приведенное описание замены координат с помощью унитарного оператора — это так называемая «активная» форма координатного преобразования. Есть и вторая — так называемая «пассивная» форма. В этой последней интерпретации $-\Delta_1-\Delta_2$ и $-{}^1/_2\Delta_{\mathbf{R}} - 2\Delta_{\mathbf{r}_{12}}$ рассматриваются как *один и тот же* оператор (а не как унитарно эквивалентные операторы), записанный в разных системах координат. Когда мы сталкиваемся с несколькими заменами координат, как это будет, например, в § 6, то эта вторая, «пассивная», интерпретация с точки зрения обозначений проще, чем первая, «активная». Поэтому в дальнейшем мы будем придерживаться «пассивной» интерпретации.

Из обсуждения в предыдущих разделах очевидно, что существование состояний рассеяния эквивалентно существованию операторов $\Omega^\pm(H, H_0)$. Заметим, что единственность состояний рассеяния тривиальна, так как если и $\|e^{-iHt}\psi_1 - e^{-iH_0t}\varphi\|$, и $\|e^{-iHt}\psi_2 - e^{-iH_0t}\varphi\|$ стремятся к нулю при $t\to-\infty$, то $\psi_1-\psi_2=0$ вследствие линейности и равномерной ограниченности e^{-iHt}.

Основная теорема существования следующая.

Теорема XI.24 (теорема Хака — Кука). Пусть $V\in L^2(\mathbb{R}^3)+L^r(\mathbb{R}^3)$ при $2\leqslant r<3$. Пусть $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$ и $H=H_0+V$. Тогда $\Omega^\pm(H, H_0)$ существуют.

Мы приведем три разных доказательства. Все они основаны на методе Кука и иллюстрируют различные способы оценки $\|Ve^{-itH_0}\varphi\|$.

Первое доказательство теоремы XI.24. Это самое «элементарное» доказательство: оно основано на прямых выкладках и не требует ни интерполяции, ни применения метода стационарной фазы. Выберем некоторое $\gamma > 0$ и положим

$$\varphi_\gamma(x) = \gamma^{3/4}\exp(-{}^1/_2\gamma x^2).$$

Тогда

$$(e^{-itH_0}\varphi_\gamma)(x) = \alpha(t)^{3/4}\exp(-{}^1/_2[\alpha(t) + i\beta(t)]x^2), \tag{55}$$

где $\beta(t)$ — подходящая вещественнозначная функция и $\alpha(t) = \gamma(1+4t^2\gamma^2)^{-1}$. Чтобы доказать (55), достаточно заметить, что с точностью до константы $\hat{\varphi}_\gamma$ есть $\exp(-{}^1/_2p^2\gamma^{-1})$, так что $(e^{-itH_0}\varphi_\gamma)^\wedge$ есть $\exp(-{}^1/_2p^2\gamma(t)^{-1})$, где $\gamma(t)^{-1} = \gamma^{-1} - 2it$. Отсюда (55) следует непосредственно, а константу легко подсчитать, используя равенство $\|e^{-itH_0}\varphi_\gamma\|_2 = \|\varphi_\gamma\|_2$. Из (55) легко увидеть (задача 42), что для $k > 0$

$$\|(1+|x|)^k e^{-itH_0}\varphi_\gamma\|_\infty \leqslant c(1+|t|)^{-3/2+k}. \tag{56}$$

Следовательно,

$$\|Ve^{-itH_0}\varphi_\gamma\|_2 \leqslant c\|(1+|x|)^{-k}V\|_2(1+|t|)^{-3/2+k} \leqslant$$
$$\leqslant c'(\|V_2\|_2 + \|V_r\|_r)(1+|t|)^{-3/2+k},$$

если $V = V_2 + V_r \in L^2 + L^r$ и $r^{-1} = {}^1/_2 - k/(3+\varepsilon)$ с некоторым $\varepsilon > 0$. Это следует из неравенства Гёльдера и из того, что $(1+|x|)^{-k} \in L^m$ при всех $m > 3k^{-1}$. Поскольку $r < 3$, можно взять $k < 1/2$, так что $\int\|Ve^{-itH_0}\varphi_\gamma\|_2\,dt < \infty$ для любого γ. Так как линейные комбинации трансляций функции φ_γ плотны в L^2 (задача 43), из этой оценки методом Кука (теорема XI.4) выводится существование $\Omega^\pm(H, H_0)$. ∎

Второе доказательство теоремы XI.24. В методе Кука требуется только показать, что для любой $\varphi \in \mathscr{S}$ функция $f(t) = \|Ve^{-itH_0}\varphi\|_2$ принадлежит $L^1(1, \infty)$. Вспомним теорему XI.30, которая говорит, что

$$\|e^{-iH_0t}\varphi\|_p \leqslant t^{-3/2+3/p}\|\varphi\|_q,$$

если $\varphi \in \mathscr{S}$ и $q^{-1} = 1 - p^{-1}$, $2 \leqslant p \leqslant \infty$. Запишем $V = V_2 + V_r$, где $V_2 \in L^2$, $V_r \in L^r$, и положим $p^{-1} = {}^1/_2 - r^{-1}$, так что $p > 6$. Тогда, по неравенству Гёльдера,

$$\|Ve^{-iH_0t}\varphi\|_2 \leqslant \|V_2\|_2\|e^{-iH_0t}\varphi\|_\infty + \|V_r\|_r\|e^{-iH_0t}\varphi\|_p \leqslant$$
$$\leqslant \|V_2\|_2\|\varphi\|_1 t^{-3/2} + \|V_r\|_r\|\varphi\|_q t^{-3/2+3/p},$$

Так как $p > 6$, $^3/_2 - 3p^{-1} > 1$, поэтому $f(t) \in L^1(1, \infty)$, что и доказывает теорему. ∎

Заметим, что условие $r < 3$ решающее, так как из него следует, что $p > 6$ и что $t^{-\alpha}$ убывает при $\alpha > 1$, а это необходимо для того, чтобы $f(t)$ принадлежало $L^1(1, \infty)$. Какие потенциалы вида $(1+|r|)^{-\beta}$ принадлежат L^2+L^r? В точности те, для которых $\beta > 1$. Опять, как и в классическом случае, простая теория рассеяния не проходит для кулоновых сил. Мы рассмотрим в § 9, как следует изменить квантовую теорию рассеяния, для того чтобы включить этот случай.

Третье доказательство теоремы XI.24. По теореме XI.16, достаточно доказать, что выполнено условие (45), так как после этого можно пользоваться оценками метода стационарной фазы Запишем V в виде $V = V_2 + V_r$, где $V_2 \in L^2$, $V_r \in L^r$. В силу неравенства Гёльдера,

$$\left(\int\limits_{at<|x|<bt} |V_r(x)|^2\, dx\right)^{1/2} \leqslant \|V_r\|_r \left(\int\limits_{at<|x|<bt} dx\right)^{1/2-1/r} = C\|V_r\|_r\, t^{3/2-3/r}.$$

Тогда

$$\int\limits_1^\infty \left(\int\limits_{a<|x|<b} |V_r(xt)|^2\, dx\right)^{1/2} dt \leqslant \int\limits_1^\infty Ct^{-3/r}\|V_r\|_r\, dt < \infty,$$

поскольку $r < 3$. Так как $|V(x)|^2 \leqslant 2|V_2(x)|^2 + 2|V_r(x)|^2$, то условие (45) выполнено. ∎

Основная теорема допускает обобщения в разных направлениях. Если вместо $\mathbb{R}^3$ рассмотреть $\mathbb{R}^n$ с $n > 3$, то теорема выполняется с заменой условия $r < 3$ условием $r < n$; все приведенные доказательства проходят и в этом случае. Разумеется, для потенциала общего вида $V \in L^2 + L^r$ может случиться, что $H_0 + V$ не будет самосопряжен в существенном на C_0^∞; все рассуждения проходят для *любого* самосопряженного расширения $(H_0+V) \upharpoonright C_0^\infty$. Если $V \in L^{n/2} + L^r$ $(n \geqslant 5)$ или $L^{2+\varepsilon} + L^r$ $(n = 4)$, то из общих принципов известно, что $H_0 + V$ самосопряжен на $D(H_0)$. Для $n = 1$ или 2 проходит только третье доказательство; см. в связи с этим задачу 44. Второе направление обобщений связано с рассмотрением локальных особенностей.

Теорема XI.25. Пусть V — измеримая функция на $\mathbb{R}^3$, такая, что

$$V(r) \leqslant Cr^{-1-\varepsilon}, \quad \text{если } r < R,$$

с некоторыми R, $\varepsilon > 0$ и C. Пусть H — самосопряженный оператор с областью определения $D(H)$, содержащей $D_R \equiv C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{\mathbf{r} \mid r < R\})$, и

$$H\varphi = -\Delta\varphi + V\varphi$$

при $\varphi \in D_R$. Пусть $H_0 = -\Delta$. Тогда $\Omega^\pm(H, H_0)$ существуют.

Доказательство. Пусть χ — оператор умножения на функцию из C_0^∞, равную единице на шаре радиуса R. Тогда, как при доказательстве теоремы Хака — Кука,

$$\|[H(1-\chi)-(1-\chi)H_0]e^{-itH_0}\varphi\| \in L^1,$$

так как $H(1-\chi)-(1-\chi)H_0 = V(1-\chi)-\Delta\chi-\nabla\chi\cdot\operatorname{grad}$ и

$$\operatorname{grad}(e^{-itH_0}\varphi) = e^{itH_0}(\operatorname{grad}\varphi).$$

Но $\chi(H_0+1)^{-1}$ есть оператор Гильберта — Шмидта и потому компактен. Согласно задаче 18, отсюда следует, что $\lim\limits_{t\to\infty}\|\chi e^{-itH_0}\varphi\| = 0$. Результат теперь следует из теоремы Купша — Сандаса (теорема XI.5). ∎

Так как у нас есть явная формула для $e^{-itH_0}\varphi$, то можно непосредственно доказать, что $\lim\limits_{t\to\infty}\|\chi e^{-iH_0t}\varphi\| = 0$, не обращаясь к абстрактному результату задачи 18.

Наконец, есть еще результаты, относящиеся к квадратичным формам.

Теорема XI.26. Пусть $V = V_1 + V_2$ — такая функция на $\mathbb{R}^3$, что $W_1 \equiv (1+|x|^2)^{1/2+\varepsilon}V_1$ принадлежит $L^{3/2}+L^\infty$, а V_2 принадлежит $L^{3/2} \cap L^{3/2-\delta}$ при некоторых $\varepsilon > 0$ и $\delta > 0$. Пусть $H_0 = -\Delta$ и $H = H_0 + V$ в смысле квадратичных форм. Тогда $\Omega^\pm(H, H_0)$ существуют.

Доказательство. Пусть $V = C_1D_1 + C_2D_2$, причем $C_1^* = W_1/|W_1|^{1/2}$, $D_1 = |W_1|^{1/2}(1+|x|^2)^{-1/2-\varepsilon}$, $C_2^* = V_2/|V_2|^{1/2}$, $D_2 = |V_2|^{1/2}$. Тогда, согласно допущениям теоремы, $C_1^*C_1$, $D_1^*D_1$, $C_2^*C_2$ и $D_2^*D_2$ все H_0-ограничены как формы с нулевой относительной гранью, так что, по теореме XI.6, достаточно доказать, что $\|D_1e^{-itH_0}\varphi\| \in L^1$ и $\|D_2e^{-itH_0}\varphi\| \in L^1$ для $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Так как $D_2 \in L^{3-2\delta}$, то второе выражение принадлежит L^1 согласно доказательству теоремы XI.24 Пусть $f = (1+|x|^2)^{-1/2-\varepsilon}$. Тогда, поскольку $D_1(H_0+1)^{-1}$ ограничен, достаточно показать, что $G(t) \equiv \|(H_0+1)fe^{-itH_0}\varphi\|$ принадлежит L^1. Заметим, что

$$(H_0+1)fe^{-itH_0}\varphi = fe^{-itH_0}[(H_0+1)\varphi] - 2(\nabla f)e^{-itH_0}(\operatorname{grad}\varphi) - (\Delta f)e^{-itH_0}\varphi.$$

Так как φ, $(H_0+1)\varphi$, $\operatorname{grad}\varphi$ принадлежат $\mathcal{S}$, а f, ∇f, $-\Delta f$ принадлежат $L^2+L^{3-\varepsilon}$, мы заключаем, что $G \in L^1$. ∎

В § XIII.4 будет доказано, что если $V \in L^{3/2} + (L^\infty)_\varepsilon$, то $\sigma_{ess}(-\Delta + V) = [0, \infty)$. Так как $\sigma_{ac} \subset \sigma_{ess}$, получаем такое

Следствие. Абсолютно непрерывный спектр $\sigma_{ac}(H)$ оператора H из теоремы XI.26 совпадает с полуосью $[0, \infty)$.

Развитые здесь методы применимы и в других случаях, когда H отличается от $-\Delta + V$, а H_0 — от $-\Delta$. Рассмотрим случай $B_0 = -\Delta + x_1$, $B = -\Delta + V + x_1$, где x_1 — первая компонента вектора $\mathbf{x}$. Эта пара описывает рассеяние в постоянном внешнем электрическом поле. Для начала нам потребуется

Лемма. Пусть $B_0 = -\Delta + x_1$. Тогда

$$e^{-itB_0} = e^{-itx_1} e^{-it^3/3} e^{+it^2 p_1} e^{-itH_0},$$

где $H_0 = -\Delta$.

Доказательство. Рассмотрим сначала одномерный случай. Пусть $f(\alpha) = e^{ip^3\alpha} x e^{-ip^3\alpha}$. Тогда для f как оператора из $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ в $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ имеем $f(0) = x$ и $f'(\alpha) = 3p^2$. Значит, $f(\alpha) = x + 3p^2\alpha$. Следовательно, для любого α оператор $f(\alpha)$ в существенном самосопряжен на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, и для всякой ограниченной борелевой функции F

$$F(x + 3p^2\alpha) = e^{ip^3\alpha} F(x) e^{-ip^3\alpha}.$$

Поэтому

$$e^{-it(p^2 + x)} = e^{ip^3/3} e^{-itx} e^{-ip^3/3} = e^{-itx} e^{i(p-t)^3/3} e^{-ip^3/3} =$$
$$= e^{-itx} e^{-it^3/3} e^{it^2 p} e^{-itp^2},$$

где на втором шаге мы воспользовались тем, что $e^{itx} g(p) e^{-itx} = g(p - t)$. В n-мерном случае положим $\mathbf{p} = \langle p_1, \mathbf{p}_\perp \rangle$. Тогда

$$e^{-itB_0} = e^{-it(p_1^2 + x_1)} e^{-itp_\perp^2},$$

и нужный результат выводится из доказанного в одномерном случае. ∎

Теорема XI.27 (теорема Аврона — Хербста). Пусть $\mathbf{x} = \langle x_1, \mathbf{x}_\perp \rangle$. Пусть V — функция на $\mathbb{R}^n$, удовлетворяющая условиям

(i) $$\int_{|y-x|<1} |V(y)|^2 dy \leqslant C(1 + |x|^2)^N$$
при некоторых N и C и *всех* x;

(ii) при некоторых k и l, удовлетворяющих $2l - k > 1$, и некотором x_0

$$\left(\int_{|y-x|<1} |V(y)|^2 dy \right)^{1/2} \leqslant C(1 + |x_\perp|)^k / (1 + |x_1|)^l$$

при всех x с $x_1 < -x_0$.

Пусть $B_0 = -\Delta + x_1$ и B — некоторое самосопряженное расширение оператора $(B_0 + V) \restriction \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Тогда $\Omega^{\pm}(B, B_0)$ существуют.

Доказательство. Согласно лемме, для $\varphi \in \mathcal{S}$

$$\|Ve^{-itB_0}\varphi\|_2^2 = \int |V(x_1 - t^2, x_\perp)|^2 |(e^{-itH_0}\varphi)(x)|^2 dx.$$

Итак, по методу стационарной фазы, требуется только, чтобы для любых положительных a и b нашлось такое T_0, что

$$\int_{T_0}^{\infty} \left(\int_{at < |x| < bt} |V(x_1 - t^2, x_\perp)|^2 d^n x \right)^{1/2} t^{-n/2} dt < \infty, \tag{57}$$

причем интеграл по остальным x оценивается с помощью требования (i). Условие (57) легко получить из требования (ii). ∎

Подчеркнем, что в требовании (ii) участвуют только очень большие по модулю отрицательные x_1. Физическая причина этого состоит в том, что B_0 выталкивает частицы к отрицательным x_1. Так, например, если $B = -\Delta - |x_1|$, то обе пары $\Omega^{\pm}(B, -\Delta - x_1)$ и $\Omega^{\pm}(B, -\Delta + x_1)$ существуют. Очевидно, что ни один из этих операторов не полон сам по себе.

* * *

Понятие волновых операторов и метод Кука доказательства их существования применимы также к разнообразным нестационарным квантовомеханическим задачам. Так, рассмотрим решения нестационарного уравнения Шредингера

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H(t) \psi(t),$$

где имеется в виду, что $H(t) = -\Delta + V(t)$ и любой $V(t)$ есть умножение на вещественную функцию. В § X.12 мы рассмотрели решения этого уравнения и обнаружили, что при соответствующих предположениях существует сильно непрерывное двупараметрическое семейство унитарных операторов $U(t, s)$, удовлетворяющих условиям (см теорему X.71)

$$U(t, s) U(s, v) = U(t, v), \qquad U(s, s) = 1;$$
$$\frac{d}{dt}[U(t, s)\psi] = -iH(t) U(t, s)\psi, \qquad \psi \in D(H_0).$$

Простой случай, когда можно с уверенностью ожидать существования решений $U(t, 0)\psi$, которые асимптотически выглядят как $e^{-itH_0}\psi$,— это случай $V(t) = V_1 + \varphi(t) V_2$, где φ имеет компактный носитель и, скажем, $V_1, V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3)$; пользуясь существованием предела $e^{i(H_0+V_1)t}e^{-iH_0t}$ при $t\to\pm\infty$, в этом случае легко доказать существование соответствующих «зависящих от времени» волновых операторов. На самом деле такие волновые операторы существуют при очень общих допущениях, например если

$$V(t)=(\cos\omega_1 t)V_1+(\cos\omega_2 t)V_2.$$

На первый взгляд это может показаться удивительным. В самом деле, почему $U(t,\ 0)\psi$ должно иметь простой предел, когда $H(t)$ продолжает осциллировать? Причина очень простая: состояния рассеяния размазываются по большой области, когда $t\to\pm\infty$, так что не существенно, как ведет себя потенциал локально, если он стремится к нулю на бесконечности.

Определение. Пусть $U(t,\ s)$ — унитарный пропагатор, связанный с $H(t)=H_0+V(t)$ в соответствии с теоремами X.70 и X.71. Будем говорить, что соответствующие волновые операторы существуют, тогда и только тогда, когда существуют

$$\Omega^{\pm}=\operatorname*{s-lim}_{t\to\mp\infty}U(t,\ 0)^*e^{-iH_0t}. \tag{58}$$

Теорема XI.28. Пусть $V(t)=V_1(t)+V_2(t)$, где $V_1(t)$ — сильно дифференцируемая функция, принимающая значения в $L^2(\mathbb{R}^3)$, а $V_2(t)$ — сильно дифференцируемая функция, принимающая значения в $L^p(\mathbb{R}^3)$, $2\leqslant p\leqslant\infty$. Предположим, что для некоторого $\varepsilon>0$ и соответствующей постоянной c

$$\|V_1(t)\|_2\leqslant c\,|t|^{1/2-\varepsilon},\qquad |t|\geqslant 1;$$
$$\|V_2(t)\|_p\leqslant c\,|t|^{1/2-3p^{-1}-\varepsilon},\qquad |t|\geqslant 1.$$

Тогда пределы (58) существуют.

Доказательство. Пусть $\varphi,\ \psi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Тогда, по теореме X.71,

$$\frac{d}{dt}(\varphi,\ U(t,\ 0)^*e^{-iH_0t}\psi)=\frac{d}{dt}(U(t,\ 0)\varphi,\ e^{-iH_0t}\psi)=$$
$$=i(\varphi,\ U(t,\ 0)^*V(t)e^{-iH_0t}\psi).$$

Следовательно, для $t>s$

$$\|U(t,\ 0)^*e^{-iH_0t}\psi-U(s,\ 0)^*e^{-iH_0s}\psi\|\leqslant\int_s^t\|V(u)e^{-iH_0u}\psi\|\,du.$$

Согласно допущениям теоремы и оценкам второго доказательства теоремы XI.24, последний интеграл сходится. Следуя методу Кука, приходим к существованию предела (58). ∎

Отметим замечательную особенность теоремы XI.28: $V(t)$ может расти на бесконечности! Пользуясь методом стационарной фазы (задача 45), можно показать, что если $V\in L^2$ и *имеет компактный носитель*, то $V(t)=\varphi(t)V$ приводит к волновым операторам, когда φ дифференцируема и растет на бесконечности не быстрее полинома.

Переплетающие соотношения $e^{-iH_s}\Omega^{\pm}=\Omega^{\pm}e^{-iH_0 s}$, вообще говоря, не имеют аналога в нестационарном случае, так как $U(t+s,\ t)$, как правило, не стремится к «хорошему» пределу при $t\to\infty$. Однако есть один специальный случай, имеющий особый интерес для физики, когда некоторые переплетающие соотношения существуют.

Теорема XI.29. Пусть $V(t)$ удовлетворяет требованиям теоремы XI.28. Предположим далее, что $V(t+T)=V(t)$ при некотором фиксированном T и *всех* $t\in\mathbb{R}$. Тогда

$$U(T,\ 0)\,\Omega^{\pm}=\Omega^{\pm}e^{-iH_0T} \tag{59}$$

и, в частности, e^{-iH_0t} коммутирует с оператором рассеяния $(\Omega^-)^*\,\Omega^+$.

Доказательство. По условию, $U(t+T,\ s+T)=U(t,\ s)$, так что $U(nT,\ 0)=U(T,\ 0)^n$. Поэтому

$$U(nT,\ 0)^*\,e^{-iH_0(n+1)T}=U(T,\ 0)\,U((n+1)T,\ 0)^*\,e^{-iH_0(n+1)T}.$$

Устремляя $n\to\infty$, получим (59). ∎

Восстанавливая $\hbar$ и полагая $\omega=2\pi/T$, увидим, что теорема XI.29 утверждает следующее: хотя H_0, возможно, не сохраняется при рассеянии, энергия может изменяться лишь на $n\hbar\omega$, где $n=0,\ \pm1,\ \ldots$. Это нерелятивистское подтверждение первоначального правила квантования Планка!

Бóльшая часть теории рассеяния, которую мы будем дальше излагать в этом томе, допускает распространение на нестационарный случай; мы редко будем останавливаться на этом в тексте, но в Замечаниях дадим все нужные ссылки.

* * *

Вернемся теперь к основной квантовомеханической задаче о $\Omega^{\pm}(H,\ H_0)$ с $H_0=-\Delta$. Полнота этих операторов легко устанавливается при помощи теории Като — Бирмана, если функция V достаточно быстро убывает и достаточно регулярна локально. Позже мы приведем примеры, когда полнота разрушается серьезными локальными особенностями.

Теорема XI.30. Пусть V — измеримая функция на $\mathbb{R}^n$, так что $|V|$ как форма $-\Delta$-ограничена с относительной гранью $\alpha<1$. Определим $H=-\Delta+V$ как сумму форм, и пусть $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^n)$. Если $V\in L^1(\mathbb{R}^n)$, то $\Omega^{\pm}(H,\ H_0)$ существуют и полны.

Доказательство. Применим теорему Бирмана (теорема XI.10). Так как $Q(H)=Q(H_0)$, эти операторы взаимно подчинены. Поэтому достаточно показать, что $|V|^{1/2}E_I(H_0)$ и $E_I(H)|V|^{1/2}$ — операторы Гильберта — Шмидта. Это будет сделано, если показать, что $|V|^{1/2}(H_0+E)^{-m}$ и $|V|^{1/2}(H+E)^{-m}$ — операторы Гильберта — Шмидта для некоторых E и m. Согласно допущению, $|V|^{1/2}\in L^2$, так что первый из операторов есть оператор Гильберта — Шмидта по теореме XI.20, до тех пор, пока $m>n/4$. Следуя доказательству теоремы XI.12, убедимся, что $|V|^{1/2}(H+E)^{-m}$ также оператор Гильберта — Шмидта. Конкретно, путем интерполяции между $(H_0+E)^{-1/2}V(H_0+E)^{-m-1/2}\in\mathcal{I}_2$ и

$$\gamma\equiv\|(H_0+E)^{-1/2}V(H_0+E)^{-1/2}\|<\infty$$

получаем, что $|V|^{1/2}(H_0+E)^{-k-1/2}$ и $(H_0+E)^{-1/2}V(H_0+E)^{-k-1/2}$ лежат в $\mathcal{I}_{2m/k}$ при $k=1, 2, \ldots, m$. Таким образом, выбирая E так, чтобы было $\gamma<1$, и разлагая $|V|^{1/2}(H+E)^{-m}$, получим сумму по q и l членов вида

$$V|^{1/2}(H_0+E)^{-l_0-1/2}\left[\prod_{i=1}^{q}(H_0+E)^{-1/2}V(H_0+E)^{-l_i-1/2}\right](H_0+E)^{-1/2}, \tag{60}$$

причем $\sum_{i=0}^{q} l_i=m$. Пользуясь неравенством Гёльдера для идеалов $\mathcal{I}_p$, убеждаемся в том, что каждый член есть оператор Гильберта — Шмидта с нормой, ограниченной $c\gamma^q$, так что сумма норм Гильберта — Шмидта сходится. ▮

Последний результат несколько обескураживает, потому что для него требуется, чтобы $V\in L^1$, т. е. V должен убывать более или менее как $|x|^{-n-\varepsilon}$. С другой стороны, для существования достаточно, чтобы V убывал только как $|x|^{-1-\varepsilon}$. Позже мы и для этого случая докажем полноту, но пользуясь уже более изощренными методами; см. § XIII.8, теорему XIII.33, или § 17 этой главы. Оказывается, если V сферически-симметричен, то теория Като — Бирмана применима даже в том случае, когда потенциал убывает только как $|x|^{-1-\varepsilon}$.

Теорема XI.31. Пусть $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$, и пусть $V(x)=V(|x|)$ — функция только от $r=|x|$. Допустим, что

$$\int_1^\infty |V(r)|\,dr+\int_0^1 r|V(r)|\,dr<\infty. \tag{61}$$

Тогда V как форма H_0-ограничен с нулевой относительной гранью и $\Omega^{\pm}(H, H_0)$ существуют и полны.

Доказательство. Рассмотрим разложение $L^2(\mathbb{R}^3)=\bigoplus_{l=0}^{\infty}\bigoplus_{m=-l}^{l}\mathscr{H}_{lm}$, где $\mathscr{H}_{lm}=\{rf(r)Y_{lm}(\theta)\}$. Каждое $\mathscr{H}_{lm}$ изоморфно $L^2(0, \infty; dr)\equiv\mathscr{H}$ при соответствии $rf(r)Y_{lm}\leftrightarrow f(r)$ (см. пример 4 в дополнении к § X.1). Пусть $h_{0,l}=-(d^2/dr^2)+l(l+1)r^{-2}$ на $\mathscr{H}$ с граничным условием $f(0)=0$, когда $l=0$. Пусть $h_0=h_{0,0}$. Тогда H_0 изоморфен $\bigoplus_{l,m}h_{0,l}$. Пусть v — умножение на V в пространстве $\mathscr{H}$. Мы докажем, что

$$\operatorname{Tr}(|v|^{1/2}(h_0+1)^{-1}|v|^{1/2})<\infty. \tag{62}$$

Отсюда будет следовать, что $\lim\limits_{E\to\infty}\||v|^{1/2}(h_0+E)^{-1}|v|^{1/2}\|=0$, и потому $|v|$ h_0-ограничен как форма с относительной гранью нуль. Так как $h_0\leqslant h_{0,l}$, то V H_0-ограничен как форма с относительной гранью нуль. Пусть $h_l=h_{0,l}+v$. Введем разложение

$$(h_l+E)^{-1}-(h_{0,l}+E)^{-1}=ABCD,$$

где $A=(h_l+E)^{-1}(h_0+1)^{1/2}$ и $D=(h_0+1)^{1/2}(h_{0,l}+E)^{-1}$ — ограниченные операторы, а $B=(h_0+1)^{-1/2}|v|^{1/2}$ и $C=(v/|v|^{1/2})\times\times(h_0+1)^{-1/2}$ — операторы Гильберта—Шмидта по (еще не доказанному) условию (62). Тогда из теоремы Куроды—Бирмана следует, что $\Omega^\pm(h_l, h_{0,l})$ существуют и полны, а следовательно, и $\Omega^\pm(H, H_0)$ существуют и полны.

Итак, остается только доказать (62). Мы утверждаем, что

$$\operatorname{Tr}(|v|^{1/2}(h_0+1)^{-1}|v|^{1/2})=\int_0^\infty|V(r)|[e^{-r}(\operatorname{sh}r)]\,dr. \tag{63}$$

Отсюда (62) вытекает вследствие (61) и простых оценок

$$\operatorname{sh}r\leqslant e^r,\qquad \operatorname{sh}r\leqslant r\operatorname{ch}r\leqslant re^r$$

при $r\geqslant0$. Легко убедиться, что $(h_0+1)^{-1}$ — интегральный оператор с ядром (задача 47)

$$(h_0+1)^{-1}(r, r')=e^{-u}\operatorname{sh}w,\qquad u=\max\{r, r'\},\qquad w=\min\{r, r'\}.$$

Тогда $|v|^{1/2}(h_0+1)^{-1}|v|^{1/2}$ имеет интегральное ядро

$$K(r, r')=|v(r)|^{1/2}(h_0+1)^{-1}(r, r')|v(r')|^{1/2},$$

так что (63) соответствует формуле

$$\operatorname{Tr}A=\int_0^\infty K(r, r)\,dr. \tag{64}$$

Хотя на первый взгляд кажется, что (64) — просто непрерывный аналог формулы $\operatorname{Tr}(a_{ij})=\sum a_{ii}$ для конечных матриц, это *не есть* общее свойство интегральных операторов, ибо $K(r, r')$ определено только почти всюду и $\{(r, r') \mid r = r'\}$ имеет меру нуль! Тем не менее, когда ядро $K(r, r')$ непрерывно, а соответствующий оператор положительно определен, (64) выполняется — ниже это будет доказано в виде отдельной леммы. Из этой леммы (63) вытекает для непрерывных V, а далее простые рассуждения, основанные на аппроксимации (задача 48), завершают доказательство (63) для V общего вида. ∎

Лемма. Пусть μ — бэрова мера на локально компактном хаусдорфовом пространстве X. Пусть $\mathcal{H} = L^2(X, d\mu)$ и K — непрерывная функция на $X \times X$. Допустим, что

(i) для любой $\varphi \in \varkappa(X)$, т. е. непрерывной функции с компактным носителем, имеет место неравенство $\iint \overline{\varphi(x)}\varphi(y) K(x, y) \times d\mu(x) d\mu(y) \geqslant 0$ (отсюда следует, что $K(x, x) \geqslant 0$);

(ii) $\int K(x, x) d\mu(x) < \infty$.

Тогда найдется оператор A с конечным следом и интегральным ядром K. Более того,

$$\operatorname{Tr} A = \int K(x, x) d\mu(x). \qquad (65)$$

Обратно, если A — положительный оператор с конечным следом и непрерывным ядром K, то (ii) имеет место и (65) выполняется.

Доказательство. Допустим, что (i) и (ii) выполнены. Пусть $f \in \varkappa(X)$, и пусть $K_f(x, y) = f(x) K(x, y) f(y)$. Тогда $K_f \in L^2(X \times X, d\mu \otimes d\mu)$, так что существует оператор Гильберта — Шмидта A_f с ядром K_f. Пусть $\{U_1, \ldots, U_n\} = \mathcal{U}$ — конечное семейство непересекающихся бэровых множеств с конечной мерой μ, и пусть $P_{\mathcal{U}}$ — проектор в $\mathcal{H}$ на подпространство, порожденное характеристическими функциями множеств U_i. Тогда

$$\operatorname{Tr}(P_{\mathcal{U}} A_f P_{\mathcal{U}}) = \sum_i \int_{U_i \times U_i} \mu(U_i)^{-1} f(x) K(x, y) f(y) d\mu(x) d\mu(y). \qquad (66)$$

Упорядочим семейства $\mathcal{U}$, полагая $\mathcal{U} < \mathcal{U}'$, если $\cup U_i \subset \cup U'_i$ и всякое U'_i либо не пересекается ни с одним U_i, либо содержится в каком-либо U_i, т. е. в том и только том случае, если $\operatorname{Ran} P_{\mathcal{U}} \subset \subset \operatorname{Ran} P_{\mathcal{U}'}$. С таким упорядочением множество семейств $\mathcal{U}$ представляет собой направленность и: (a) $P_{\mathcal{U}}$ монотонно возрастают с $\mathcal{U}$; (b) $\text{s-lim}\, P_{\mathcal{U}} = 1$; (c) когда $\mathcal{U}$ стремится к «бесконечности», правая часть (66) сходится к $\int f(x)^2 K(x, x) d\mu(x)$. Согласно (i), (a) и (b),

$$\operatorname{Tr}(A_f) = \lim_{\mathcal{U}} \operatorname{Tr}(P_{\mathcal{U}} A_f P_{\mathcal{U}})$$

(обе части равенства могут a priori быть бесконечными), откуда, согласно (c) и (ii), след A_f конечен и

$$\operatorname{Tr}(A_f)=\int f(x)^2 K(x,\ x)\,d\mu(x).$$

Введем частичное упорядочение на множестве всех f, таких, что $0\leqslant f\leqslant 1$ и $f\in\varkappa(X)$, посредством поточечного неравенства. Тогда при всех $\varphi\in\mathscr{H}$

$$(\varphi,\ A_f\varphi)\leqslant\|\varphi\|^2\operatorname{Tr}(A_f)\leqslant\|\varphi\|^2\int K(x,\ x)\,d\mu(x).$$

Более того, для $\varphi\in\varkappa(X)$ тривиально существует $\lim\limits_{f\nearrow 1}(\varphi,\ A_f\varphi)$. Пользуясь плотностью множества $\varkappa(X)$ и поляризационным тождеством, убеждаемся, что существует $\operatorname{w-lim}\limits_{f\nearrow 1}A_f=A$. Далее, для любого оператора B конечного ранга

$$|\operatorname{Tr}(AB)|=\lim_{f\nearrow 1}|\operatorname{Tr}(A_fB)|\leqslant\|B\|\lim_{f\nearrow 1}\operatorname{Tr}(A_f)\leqslant\|B\|\int K(x,\ x)\,d\mu(x).$$

Следовательно, A принадлежит классу операторов со следом. Выбирая $\varphi\in\varkappa(X)$, найдем, что $K(x,\ y)$ есть интегральное ядро оператора A. Наконец, (65) следует из повторного применения аргументации, связанной с $P_{\mathscr{U}}$.

Обратное утверждение также следует из аргументации, связанной с $P_{\mathscr{U}}$. ∎

Пример 1 (рассеяние в магнитном поле). Пусть $H_0=-\Delta$ в L^2 и

$$H=\sum(i\partial_j-a_j(x))^2+V(x),$$

где V, a_j и a_j^2 принадлежат $L^2_\delta(\mathbb{R}^n)$ с $\delta>n/2$. Предположим, кроме того, что $Q(H)=Q(H_0)$, и потому $(H+E)^{-1/2}\partial_j$ ограничены. Тогда для любого ограниченного интервала I четыре оператора

$$E_I(H)\,\partial_ja_j\,E_I(H_0),\qquad E_I(H)\,a_j\partial_j\,E_I(H_0),$$
$$E_I(H)\,a_j^2E_I(H_0)\quad\text{и}\quad E_I(H)\,VE_I(H_0)$$

принадлежат классу операторов со следом. Три последних оператора по теореме XI.21 принадлежат $\mathscr{I}_1$ даже без множителя $E_I(H_0)$. Первый принадлежит $\mathscr{I}_1$, так как $E_I(H)\,\partial_j$ ограничен, а $a_jE_I(H_0)$ имеет конечный след. Значит, $E_I(H)\,(H-H_0)\,E_I(H_0)$ принадлежит $\mathscr{I}_1$, а поскольку $Q(H)=Q(H_0)$, то применима теорема Бирмана. Отсюда заключаем, что $\Omega^\pm(H,\ H_0)$ существуют и полны.

Пример 2. Этот пример не физический, но он показывает мощь теоремы Бирмана. Пусть $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^n)$. Пусть $a\in L^2_\delta(\mathbb{R}^n)\cap\cap L^\infty(\mathbb{R}^n)$ и $\operatorname{grad}a\in L^2_\delta(\mathbb{R}^n)$ с $\delta>n/2$; допустим еще, что $a\geqslant 0$.

Определим

$$H = H_0 + \Delta a \Delta$$

как сумму квадратичных форм. Поскольку $\Delta a \Delta$ — оператор четвертого порядка, то это весьма сингулярное возмущение H_0. Очевидно, $Q(H) = Q(H_0) \cap D(a^{1/2}\Delta) \subset Q(H_0)$. Более того, $D(H_0) \subset Q(H)$. Следовательно, H и H_0 взаимно подчинены Записывая $H - H_0$ в виде $\sum_j (\partial_j)\, a(\partial_j \Delta) + \partial_j (\partial_j a)\,\Delta$ и пользуясь тем, что $E_I(H)\,\partial_j$, как и в примере 1, ограничен, убеждаемся, что

$$E_I(H)(H - H_0)\, E_I(H_0) \in \mathfrak{I}_1,$$

и потому $\Omega^\pm(H, H_0)$ существуют и полны по теореме Бирмана.

Теорема XI.25 утверждает, что локальные особенности V не препятствуют существованию $\Omega^\pm(-\Delta + V, -\Delta)$. Можно задаться вопросом, влияют ли они на полноту; как мы сейчас увидим, ответ на этот вопрос в основном отрицателен.

Определение. Самосопряженный оператор H называется **сильно полуограниченным локальным возмущением оператора $H_0 = -\Delta$** в том и только том случае, если

(i) $Q(H) \subset Q(H_0)$ и $H_0 \leqslant c_1(H + c_2)$ при соответствующих постоянных c_1 и c_2;

(ii) для C^∞-функции $f \in \mathcal{D}_{L^\infty}$ с $D^\alpha f \in L^\infty$ при всех α и для $\varphi \in D(H)$ имеем $f\varphi \in D(H)$ и

$$H(f\varphi) = f(H\varphi) - 2\nabla f \cdot \nabla\varphi - \varphi\,\Delta f. \tag{67}$$

Отметим, что, вследствие (i), если $\varphi \in D(H)$, то $\nabla\varphi \in L^2$. Условие (ii) утверждает, что в каком-то смысле $H - H_0$ есть оператор умножения.

Предложение. (a) Пусть $V = V_1 + V_2$, где $V_1 \geqslant 0$ принадлежит L^1_{loc}, а V_2 как форма $-\Delta$-ограничен с относительной гранью $\alpha < 1$. Тогда $H = -\Delta + V$ как сумма форм на $Q(H_0) \cap Q(V_1)$ есть сильно полуограниченное локальное возмущение оператора H_0.

(b) Допустим, что W также удовлетворяет условиям в (a). Пусть $\tilde{H} = -\Delta + W$. Если $f \in \mathcal{D}_{L^\infty}$ имеет носитель в $\{x \mid V(x) = W(x)\}$, то для всех $\varphi \in D(H)$ имеем $f\varphi \in D(\tilde{H})$ и $\tilde{H}(f\varphi) = H(f\varphi)$.

Доказательство. (a) Условие (i) совсем просто, поэтому проверить надо только условие (ii). Пусть $\varphi \in C_0^\infty$ и $f \in \mathcal{D}_{L^\infty}$. Тогда, очевидно, $f\varphi \in Q(-\Delta)$ и

$$\nabla(f\varphi) = f\,\nabla\varphi + \varphi\nabla f.$$

С помощью простого предельного перехода отсюда следует, что если $\varphi\in Q(-\Delta)$, то $f\varphi\in Q(-\Delta)$. Пусть $\varphi\in Q(-\Delta)$ и $\psi\in C_0^\infty$. Тогда

$$(\varphi,\ (-\Delta)f\psi)=(f\varphi,\ (-\Delta)\psi)-2((\nabla f)\varphi,\ \nabla\psi)-((\Delta f)\varphi,\ \psi).$$

Снова при помощи предельных переходов этот результат распространяется на все $\psi\in Q(H_0)$. Очевидно, если $\int V_1|\varphi|^2dx<\infty$, то $\int V_1|f|^2|\varphi|^2dx<\infty$; таким образом, если $\psi,\ \varphi\in Q(H)$, то $f\varphi\in Q(H)$ и

$$(\psi,\ H(f\varphi))=(f\psi,\ H\varphi)-2((\nabla f)\psi,\ \nabla\varphi)-((\nabla f)\psi,\ \varphi). \tag{68}$$

Напомним, что, по построению форм (§ VIII.6), область определения H состоит из тех $\varphi\in Q(H)$, для каждой из которых существует такое $\eta\in\mathscr{H}$, что $(\psi,\ \eta)=(\psi,\ H\varphi)$ при всех $\psi\in Q(H)$. В таком случае $\eta=H\varphi$. Исходя из этого и из условия (68), заключаем, что если $\varphi\in D(H)$, то $f\varphi\in D(H)$ и выполнено (67).

(b) Так как $\varphi\in D(H)\subset Q(H)$, то $\varphi\in Q(H_0)$ и $\int|\varphi|^2V_1dx<\infty$. Поскольку $V=W$ на $\operatorname{supp} f$, то $\int|f|^2|\varphi|^2W_1dx<\infty$ и, следовательно, $\varphi\in Q(\tilde H)$. В силу (ii), $(\psi,\ H(f\varphi))=(\psi,\ \tilde H(f\varphi))$ для всех $\psi\in Q(H_0)$, так что $f\psi,\ (\nabla f)\psi,\ (-\Delta f)\psi\in Q(V_1)$. Так как всякая $\psi\in Q(W_1)$ обладает этим свойством, то $H=\tilde H$. ∎

Теорема XI.32. Пусть H — сильно полуограниченное локальное возмущение $H_0=-\Delta$ в $L^2(\mathbb{R}^n)$. Пусть W — функция, удовлетворяющая условиям

(i) W H_0-ограничена как форма с относительной гранью $\alpha<1$; $\tilde H=-\Delta+W$ определен как сумма форм;

(ii) H равен $-\Delta+W$ вне сферы радиуса R в том смысле, что если $f\in\mathscr{D}_{L^\infty}$ имеет носитель в $\{x|\ |x|>R\}$ и $\varphi\in D(H)$ или $\varphi\in D(\tilde H)$, то $f\varphi\in D(H)\cap D(\tilde H)$ и $H(f\varphi)=\tilde H(f\varphi)$;

(iii) $\Omega^\pm(\tilde H,\ H_0)$ существуют и полны.

Тогда $\Omega^\pm(H,\ H_0)$ существуют и полны.

Доказательство. В силу цепного правила и предложения 3 § 3, достаточно доказать, что $\Omega^\pm(H,\ \tilde H)$ и $\Omega^\pm(\tilde H,\ H)$ существуют. Пусть J — умножение на функцию из $\mathscr{D}_{L^\infty}$, равную 0 при $|x|<R$ и равную 1 при $|x|>2R$. Поскольку $Q(H)\subset Q(H_0)$ и $Q(\tilde H)\subset Q(H_0)$, то $(H+c)^{-1/2}(H_0+1)^{1/2}$ и $(\tilde H+c)^{-1/2}(H_0+1)^{1/2}$ ограничены при достаточно большом c. По теореме XI.20, $(1-J)(H+c)^{-1/2}$ и $(1-J)(\tilde H+c)^{-1/2}$ принадлежат $\mathscr{I}_p$, если $p>\max\{n,\ 2\}$, и, в частности, компактны. Значит, $\Omega^\pm(H,\ \tilde H;\ 1-J)$ и $\Omega^\pm(\tilde H,\ H;\ 1-J)$

существуют (и фактически обращаются в нуль) в силу леммы 2 § 3 и утверждения задачи 18. Остается только показать, что $\Omega^{\pm}(H, \tilde{H}; J)$ и $\Omega^{\pm}(\tilde{H}, H; J)$ существуют.

Мы утверждаем, что, следуя доказательству теоремы Бирмана, достаточно показать, что для любого ограниченного интервала I

$$E_I(H)(HJ - J\tilde{H})\, E_I(\tilde{H}) \in \mathfrak{I}_1. \tag{69}$$

Действительно, по условию (ii), $JD(H) \subset D(\tilde{H})$, $JD(\tilde{H}) \subset D(H)$, так что необходимое условие подчинения выполнено: $(\tilde{H}+c)^{-1} \times \times J(H+c)$ и $(H+c)^{-1} J(\tilde{H}+c)$ ограничены. В силу равенства (67) и условия (ii), $(HJ - J\tilde{H})\varphi = -2\nabla\cdot(\nabla J)\varphi - (\Delta J)\varphi$ при $\varphi \in D(\tilde{H})$. Поскольку $Q(H_0) \supset Q(H) \supset \operatorname{Ran} E_I(H)$, получаем, что $(E_I(H))\nabla$ ограничен. Следовательно, так как ∇J, $\Delta J \in C_0^\infty$ и $(\tilde{H}+c)^l E_I(\tilde{H})$ ограничен, надо доказать только, что при некотором целом l и любом $g \in C_0^\infty$

$$g(\tilde{H}+c)^{-l} \in \mathfrak{I}_1. \tag{70}$$

По условию (i), $(H_0+c)^{1/2}(\tilde{H}+c)^{-1/2}$ ограничен. По теореме XI.22,

$$g(H_0+c)^{-1/2} \in \mathfrak{I}_q, \tag{71}$$

если только $q > n$. Следовательно,

$$g(\tilde{H}+c)^{-1/2} \in \mathfrak{I}_q, \tag{72}$$

если $q > n$. Пусть $A = (\tilde{H}+c)$ и $D = \partial_i$. Тогда можно утверждать, что

$$gA^{-1} \quad \text{и} \quad DgA^{-1} \quad \text{принадлежат} \quad \mathfrak{I}_q. \tag{73}$$

Первое очевидно вследствие (72), а второе вытекает из ограниченности $DA^{-1/2}$, (72) и простой выкладки:

$$DgA^{-1} = DA^{-1}g + D[A^{-1}, g] = DA^{-1}g + DA^{-1}DhA^{-1} + DA^{-1}fA^{-1},$$

где $h = 2\nabla\cdot g$ и $f = -\Delta g \in C_0^\infty$. Подобная же выкладка показывает, что

$$\begin{aligned} gA^{-j-1} &= A^{-1}gA^{-j} + [g, A^{-1}]A^{-j} = \\ &= A^{-1}gA^{-j} - A^{-1}DhA^{-j-1} - A^{-1}fA^{-j-1}. \end{aligned} \tag{74}$$

Из (73) и (74) следует, что если $gA^{-j} \in \mathfrak{I}_r$ при всех $g \in C_0^\infty$, то $gA^{-j-1} \in \mathfrak{I}_s$ при всех $g \in C_0^\infty$, где $s^{-1} = \min\{1, r^{-1}+q^{-1}\}$. Таким образом, начиная с (73), мы убеждаемся по индукции, что $gA^{-j} \in \mathfrak{I}_{q_j}$, где $q_j = \min\{1, jq^{-1}\}$, при всех $g \in C_0^\infty$. Выбирая $l > q$, добиваемся выполнения (70). ∎

Следствие. Если $V = V_1 + V_2$ имеет компактный носитель, где $V_1 \geqslant 0$, $V_1 \in L^1$ и V_2 —Δ-ограничен как форма с относительной гранью $\alpha < 1$, то $\Omega^{\pm}(-\Delta + V, -\Delta)$ существуют и полны.

Условие $H_0 \leqslant c_1(H + c_2)$ играет решающую роль во всех приведенных результатах, о чем говорит яркий пример, приводимый чуть ниже.

До сих пор в этом разделе мы изложили способ доказательства того, что $\operatorname{Ran}\Omega^+ = \operatorname{Ran}\Omega^-$, который, в частности, пригоден для $-\Delta + V$, когда $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Ниже мы рассмотрим и другие методы доказательства асимптотической полноты. Но чтобы читатель не подумал, что асимптотическая полнота всегда имеет место, укажем некоторые патологические примеры.

Контрпример. Существует потенциал V, ограниченный на компактных подмножествах $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ и такой, что

(i) V имеет компактный носитель в $\mathbb{R}^3$;
(ii) $H = -\Delta + V$ самосопряжен в существенном на $D(-\Delta) \cap D(V)$;
(iii) $-\Delta + V$ — положительный оператор;
(iv) волновые операторы $\Omega^{\pm} = \operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} e^{itH} e^{-itH_0}$ существуют,

однако

(v) $\operatorname{Ran}\Omega^+ \neq \operatorname{Ran}\Omega^-$.

Опишем потенциал V, построенный Д. Пирсоном. Он состоит из основных блоков размера $8(a + a^4)$, из восьми прямоугольных ям и барьеров каждый, как показано на рис. XI.3. Определим a_n

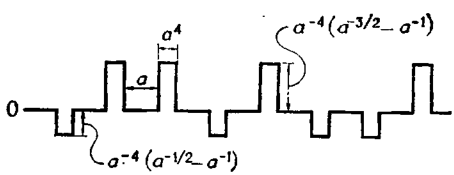

Рис. XI.3. Блоки Пирсона.

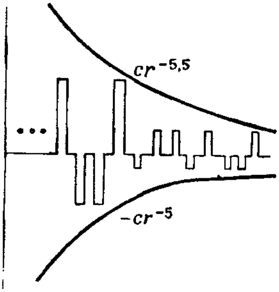

Рис. XI.4. Схематическое изображение потенциала Пирсона.

равенством $8(a_n + a_n^4) = 2^{-n}$. Потенциал V будет некоторой функцией W от $|\mathbf{r}|$, равной 0 на $(1, \infty)$ и равной основному блоку с $a = a_{n+1}$ на $(2^{-n-1}, 2^{-n})$. Такой V показан на рис. XI.4: он нигде не выходит за кривую $cr^{-5,5}$ сверху и за кривую $-cr^{-5}$ снизу, а его максимальные осцилляции почти достигают этих кривых. Заметим также, что при $r \to 0$ он «по большей части» равен нулю.

Физическая причина нарушения асимптотической полноты состоит в том, что есть падающие волны, которые в отдаленном будущем состоят из двух частей, одна из которых рассеивается наружу, а другая остается сосредоточенной вблизи начала координат. Положительные горбы не позволяют частице достичь начала координат за конечное время, и именно по этой причине H в существенном самосопряжен. Отрицательные горбы не позволяют частице просто отразиться. Мы не станем доказывать указанных свойств потенциала V, но отошлем читателя к литературе, приведенной в Замечаниях.

Теперь, чтобы проиллюстрировать широту области применимости описанных методов, рассмотрим два последних примера: один представляет модель рассеяния от тонкой пластинки вещества, а второй — рассеяния на веществе, заполняющем бесконечное полупространство.

Пример 3. Пусть W — функция на $\mathbb{R}^3$, удовлетворяющая неравенству $|W(x)| \leqslant C_1(1+|x|)^{-\alpha}$. Фиксируем некоторое k и положим

$$V(x) = \sum_{\substack{n_1=0,\ \ldots,\ k\\ n_2,\, n_3 \in \mathbb{Z}}} W(x_1-n_1,\ x_2-n_2,\ x_3-n_3).$$

Пока $\alpha > 2$, метод оценки сумм с помощью интегралов легко позволяет заключить, что сумма сходится и

$$|V(x)| \leqslant C(1+|x_1|)^{-(\alpha-2)}.$$

Волновые операторы $\Omega^{\pm}(-\Delta+V,\ -\Delta)$ описывают рассеяние одной частицы на решетке частиц, расположенных в пластинке с $k+1$ плоскостями рассеивающих центров. Если $\hat{u}$ есть C^{∞}-функция с компактным носителем, удаленным от точек, где $k_1=0$, то по методу стационарной фазы легко убедиться, что

$$\|Ve^{it\Delta}u\|_2 \leqslant (1+|t|)^{-(\alpha-2)}.$$

Отсюда следует, что если $\alpha > 3$, то $\Omega^{\pm}(-\Delta+V,\ -\Delta)$ существуют. Далее можно следующим образом доказать, что $\operatorname{Ran}\Omega^{+} = \operatorname{Ran}\Omega^{-}$. Функция V периодична в направлениях 2 и 3; по этой причине $H=-\Delta+V$ — разложимый (в прямой интеграл) оператор в смысле § XIII.16. Положение здесь несколько отлично от того, которое обсуждается в § XIII.16, где рассматриваются потенциалы, периодические во всех трех направлениях. В этом случае операторы слоя имеют чисто дискретный спектр. В рассматриваемом здесь случае операторы слоев $H_0(k)$ для $-\Delta$ имеют только абсолютно непрерывный спектр, а операторы слоев $H(k)$ имеют отчасти абсолютно непрерывный спектр, но, возможно, также и некоторые собственные значения. Можно показать, что $(H(k)+i)^{-1}-(H_0(k)+i)^{-1}$ принадлежит классу операторов со следом при всех k, откуда следует, что $\operatorname{Ran}\Omega^+(H,\ H_0)=\operatorname{Ran}\Omega^-(H,\ H_0)=\int^{\oplus}P_{ac}(H(k))\,dk$. Детали этой конструкции читатель может найти в литературе, указанной в Замечаниях. Иногда $H(k)$ может вносить примесь точечного спектра в абсолютно непрерывную часть спектра H (как в § XIII.16), и в этом случае $\operatorname{Ran}\Omega^+=\operatorname{Ran}\Omega^-\neq\operatorname{Ran}P_{ac}(H)$.

Пример 4. Пусть W — ограниченная периодическая функция на $\mathbb{R}$, и пусть $H_0=-d^2/dx^2$, $H_1=H_0+W$. Как будет разъяснено в § XIII.16, H_1 моделирует движение электрона в твердом теле. Пусть

$$V(x)=\begin{cases} W(x), & x>0,\\ 0, & x\leqslant 0,\end{cases}$$

так что $H=H_0+V$ описывает рассеяние электрона на большом (в нашей идеализированной модели — полубесконечном) куске твердого тела. Мы ожидаем, что при $t\to\infty$ любое решение $e^{-iHt}\varphi$, где $\varphi\in\operatorname{Ran}P_{ac}(H)$, приближается к сумме свободной плоской волны, движущейся влево, и волны $e^{-iH_1t}\psi$, движущейся вправо внутри твердого тела. Докажем это.

Пусть J — умножение на C^∞-функцию φ на $\mathbb{R}$, которая равна нулю на $(-\infty,\ -1)$ и единице на $(1,\ \infty)$. Тогда, как при доказательстве теоремы XI.32, $E_I(A)(AJ-JB)E_I(B)\in\mathfrak{I}_1$ во всех пяти случаях, которые получатся, если в качестве пары $\langle A,\ B\rangle$ взять $\langle H_0,\ H_0\rangle$, $\langle H_1,\ H_1\rangle$, $\langle H,\ H\rangle$, $\langle H,\ H_1\rangle$ и $\langle H_1,\ H\rangle$, и то же самое остается справедливым, если заменить J на $1-J$ и поменять местами H_0 и H_1. Более того, так как $D(H_1)=D(H)=D(H_0)$ и $JD(H_0)\subset D(H_0)$, то все пары операторов взаимно подчинены.

Определим теперь для $B=H,\ H_1,\ H_0$ операторы

$$P_r^{\pm}(B)=\Omega^{\pm}(B,\ B;\ J),\qquad P_l^{\pm}(B)=\Omega^{\pm}(B,\ B;\ 1-J),$$

где все пределы существуют в силу предыдущего результата и теоремы Бирмана. Так как $J^*=J$ и $(J^2-J)(B+1)^{-1}$ компактен, то все $P_{l,\,r}^{\pm}(B)$ суть ортогональные проекторы, причем

$$P_l^{\pm}(B)+P_r^{\pm}(B)=P_{ac}(B)\quad\text{и}\quad P_l^{\pm}(B)\,P_r^{\pm}(B)=0$$

в силу переплетающих соотношений для $\Omega^{\pm}(A,\ B;\ J)$. Более того, $\operatorname{Ran}P_l^{\pm}(B)$ составлено в точности из $\varphi\in\operatorname{Ran}P_{ac}(B)$, так что $e^{-itB}\varphi$ сдвигается к $-\infty$ при $t\to\mp\infty$ в том смысле, что для любого a

$$\lim_{t\to\mp\infty}\int_a^\infty |(e^{-iBt}\varphi)(x)|^2\,dx=0.$$

Положим

$$W_0^\pm=\Omega^\pm(H,\ H_0;\ 1-J),\qquad W_l^\pm=\Omega^\pm(H,\ H_l;\ J).$$

Пользуясь полученными результатами, нетрудно показать, что эти операторы существуют и что $W_0^\pm$ суть частичные изометрии с начальными пространствами $P_l^\pm(H_0)$ и конечными пространствами $P_l^\pm(H)$. То же справедливо и для W_1, если заменить H_0 на H_l, а l на r. Но тогда из $P_{ac}(H)=P_l^\pm(H)+P_r^\pm(H)$ следует, что $P_{ac}(H)=\operatorname{Ran}W_0^\pm\oplus\operatorname{Ran}W_l^\pm$, а это и составляет требуемое утверждение о полноте.

Все изложенное имеет любопытное следствие: если вектор ψ таков, что носитель $\hat\psi$ лежит в (a, b), где $a>0$, и (a^2, b^2) попадает в щель спектра оператора H_l (мы покажем в § XIII.16, что H_l имеет спектр $\bigcup_i[\alpha_i,\ \beta_i]$, причем $\alpha_1<\beta_1\leqslant\alpha_2<\beta_2\leqslant\ldots$, где типичная «щель» $(\beta_i,\ \alpha_{i+1})$ отлична от пустого множества), то $W_0^-\psi\in\operatorname{Ran}W_0^+$; это означает, что частица, посланная с энергией, попадающей в щель спектра, полностью отражается. Объединяя идеи этого примера с идеями примера 3, можно рассмотреть рассеяние на полубесконечном кристалле более высокой размерности или рассеяние на различного рода дефектах кристалла. Эти вопросы, а также детали рассмотренной конструкции содержатся в литературе, приведенной в Замечаниях.

В заключение этого раздела мы дадим формальное определение оператора рассеяния в квантовой механике двух частиц и обсудим его свойства. При интерпретации опытных данных по рассеянию возникает следующий естественный вопрос. Мы приготовили такое состояние, которое в прошлом имело вид состояния $e^{-iH_0t}\varphi$, и хотим знать, как оно будет выглядеть в будущем, т. е. нас интересует $e^{-iHt}\Omega^+\varphi$. Какова вероятность того, что это состояние будет асимптотически в будущем свободным состоянием $e^{-iH_0t}\psi$? По правилам квантовой механики эта вероятность задается соотношением

$$P_{\varphi\to\psi}=|(\Omega^-\psi,\ \Omega^+\varphi)|^2=|(\psi,\ (\Omega^-)^*\Omega^+\varphi)|^2.$$

Определение. Если $\Omega^\pm$ существуют, то **S-матрицу, S-оператор,** или **оператор рассеяния,** мы определяем равенством

$$S=(\Omega^-)^*\Omega^+.$$

Заметим, что это определение имеет смысл даже тогда, когда $\operatorname{Ran}\Omega^+$ не совпадает с $\operatorname{Ran}\Omega^-$. Хотя полнота и не требуется для определения S, но она эквивалентна условию унитарности S.

Подробно S-оператор мы рассмотрим в § 6 и 8. Пока только отметим некоторые его простые свойства (задача 49).

Предложение. (a) $Se^{-iH_0t}=e^{-iH_0t}S$ при всех t; S составляет $D(H_0)$ инвариантной; если $\psi\in D(H_0)$, то $H_0(S\psi)=S(H_0\psi)$.

(b) Если U — любой унитарный оператор, коммутирующий как с H, так и с H_0, то $US=SU$. В частности, если V инвариантен относительно вращений, то и S инвариантен относительно вращений.

(c) $\overline{(S\psi)(x)}=(S^*\bar{\psi})(x)$.

(d) S унитарен тогда и только тогда, когда $\operatorname{Ran}\Omega^+=\operatorname{Ran}\Omega^-$.

По причинам, которые обсуждаются в Замечаниях, условие (c) называется инвариантностью по отношению к отражению времени.

Вследствие свойств непрерывности, доказанных для соответствия $A, B\mapsto\Omega^\pm(A, B)$ в теории Като—Бирмана, S тоже обладает свойствами непрерывности. Следующее свойство характерно.

Предложение. Пусть V_n и V_∞ принадлежат $L^{3/2}(\mathbb{R}^3)\cap L^1(\mathbb{R}^3)$ и $\lim\limits_{n\to\infty}\|V_n-V_\infty\|_1=0$, $\sup\limits_n\|V_n\|_{3/2}<\infty$. Пусть $S(V)$ есть S-матрица для оператора $-\Delta+V$. Тогда

$$\operatorname{s-lim}_{n\to\infty} S(V_n)=S(V_\infty).$$

Доказательство. Копируя доказательство теоремы XI.30, видим (задача 50), что $(H_n+i)^{-1}\to(H_\infty+i)^{-1}$ по Tr-норме. Следовательно (задача 28),

$$\Omega^\pm(H_n, H_0)\to\Omega^\pm_\infty$$

в сильном смысле, так что $S_n\to S$ слабо. Но ввиду полноты все S_n и S унитарны, поэтому $S_n\to S$ сильно. ∎

Есть, наконец, еще одно свойство $\Omega^\pm$ и S, которое мы хотим рассмотреть. Полную физическую интерпретацию этого результата мы отложим до того времени, когда получим аналогичный результат для N-частичных систем. Пока же только заметим, что если мы имеем рассеяние на фиксированном центре, то, взяв некоторое определенное состояние и перенеся его с помощью сдвига на бесконечность, мы получим состояние, описывающее пролет частицы мимо центра рассеяния (см. рис. XI.5).

Теорема XI.33. В предположениях теоремы XI.24

$$\operatorname*{s-lim}_{a\to\infty} U_a^{-1}\Omega^\pm U_a = I, \quad \operatorname*{s-lim}_{a\to\infty} U_a^{-1} S U_a = I,$$

где U_a — операторы, заданные соотношением $(U_a f)(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}-\mathbf{a})$.

Доказательство. Мы докажем, что $\operatorname*{s-lim}_{a\to\infty} U_a^{-1}\Omega^\pm U_a = I$, откуда следует, что $\operatorname*{w-lim}_{a\to\infty} U_a^{-1} S U_a = I$. Поскольку $\|U_a S U_a^{-1}\| \leqslant 1$, из сла-

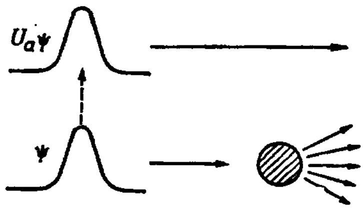

Рис. XI.5. Кластерное свойство.

бой сходимости вытекает сильная сходимость $\operatorname*{s-lim}_{a\to\infty} U_a^{-1} S U_a = I$.

Воспользовавшись $\varepsilon/3$-приемом, убедимся, что нужно только доказать равенство

$$\lim_{a\to\infty} (U_a^{-1}(\Omega^\pm - 1) U_a)\varphi = 0$$

для всех $\varphi \in \mathscr{S}$. Для таких φ

$$U_a^{-1}(\Omega^\pm - 1) U_a\varphi = \mp i \int_0^{\mp\infty} (U_a^{-1} e^{iHt} V e^{-iH_0 t} U_a)\varphi\, dt.$$

Пусть $F_a(t)$ обозначает $\|U_a^{-1} e^{iHt} V e^{-iH_0 t} U_a\varphi\|$. Легко проверить, что $F_a(t) = \|V_a e^{-iH_0 t}\varphi\|$, где $V_a(r) = V(r+a)$. Рассматривая второе доказательство теоремы XI.24, видим, что $F_a(t)$ ограничена L^1-функцией от t равномерно по a, потому что L^p-норма V_a не зависит от a. По теореме о мажорированной сходимости достаточно, таким образом, показать, что $F_a(t) \to 0$ при любом фиксированном t. Так как $e^{-iH_0 t}$ оставляет $\mathscr{S}$ инвариантным, то нужно только показать, что $\lim_{a\to\infty}\|V_a\varphi\| = 0$ при всех $\varphi \in \mathscr{S}$, а это уже совсем просто. ∎

XI.5. Квантовое рассеяние II: случай N частиц

Теория рассеяния для квантовой системы N частиц сложна по двум причинам — кинематической и динамической. Кинематическая причина проявляется уже при $N = 3$. До исключения