# XIII. СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

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

А. ШУСТЕР, 1882

## XIII.1. Принцип минимакса

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

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

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

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

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

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

или, эквивалентным образом,

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

где

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

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

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

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

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

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

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

где

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

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

Тогда для каждого фиксированного $n$ *либо*:

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

*либо*

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

*Доказательство.* Пусть $P_\Omega$ — проекторнозначная мера для $H$. Мы сначала докажем, что

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Применения принципа минимакса мы рассмотрим в следующих трех разделах. Пока же сделаем несколько общих замечаний.

(1) Как мы видели в наводящем примере, принцип минимакса — идеальное средство для сравнения собственных значений операторов. Из него можно выводить и количественные, и качественные следствия.

(2) Этот метод может быть полезен для определения места, где начинается $\sigma_{\text{ess}}$. В частности, как мы увидим, в некоторых случаях он позволяет установить, что $\sigma_{\text{ess}}$ пуст (см. § 4 и 14).

(3) В § 4 и 5 мы докажем, что в некоторых случаях $\sigma_{\text{ess}}(H) = [a, \infty)$ с некоторым определенным $a$. Допустим, нам, кроме того, известно, что $\mu_n < a$. Тогда мы можем заключить, что $H$

имеет по крайней мере $n$ собственных значений! Значит, принцип минимакса позволяет в некоторых случаях установить существование дискретного спектра.

Следующее предложение показывает, как применяется принцип минимакса.

***Предложение.*** Пусть $A \geqslant 0$ и $B$ — самосопряженные операторы. Предположим, что $Q(A) \cap Q(B)$ плотно и что $B_-$ — отрицательная часть $B$ — относительно ограничена как форма по отношению к $A$ с нулевой относительной гранью. Пусть $A+\beta B$ при $\beta \geqslant 0$ определяет оператор, отвечающий очевидной сумме форм. Предположим, что $\sigma_{ess}(A+\beta B) = [0, \infty)$ при всех $\beta \geqslant 0$. Тогда $\mu_n(A+\beta B)$ — монотонно невозрастающая функция на $[0, \infty)$.

*Доказательство.* Поскольку $\mu_n(A+\beta B) \leqslant 0$ при всех $n$, по предположению о $\sigma_{ess}(A+\beta B)$ имеем

$$\mu_n(A+\beta B) = \max_{\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}} \min_{\substack{\psi \in Q(A) \cap Q(B) \\ \|\psi\|=1:\ \psi \in [\varphi_1, \ldots, \varphi_{n-1}]^\perp}} [\min\{0, (\psi, (A+\beta B)\psi)\}].$$

Так как $A \geqslant 0$, легко видеть, что $\min\{0, (\psi, (A+\beta B)\psi)\}$ монотонно не возрастает с $\beta$. ∎

***Пример.*** В § 4 мы докажем, что $\sigma_{ess}(-\Delta+\beta V) = [0, \infty)$ для широкого класса операторов $V$. Предложение показывает, что для таких $V$ отрицательные собственные значения и, в частности, $\inf \sigma(-\Delta+\beta V)$ монотонно убывают одновременно с $\beta$, а число отрицательных собственных значений монотонно возрастает.

## XIII.2. Связанные состояния операторов Шредингера I: количественные методы

Принцип минимакса оказывается полезным при изучении самых разных аспектов теории точечных спектров. В этом и в следующем разделах мы опишем свойства дискретного спектра операторов вида $-\Delta+V$, т. е. гамильтонианов нерелятивистской квантовой механики. Эти операторы часто называют **операторами Шредингера**, а их собственные векторы, отвечающие точкам дискретного спектра,— **связанными состояниями**. Сами точки дискретного спектра называются **энергиями связанных состояний** (или **энергетическими уровнями**). В этом разделе мы опишем метод Релея — Ритца, позволяющий находить энергии связанных состояний с очень большой точностью. В следующем разделе будут рассмотрены качественные характеристики спектра. Читатель, которого интересует в первую очередь принцип минимакса, должен прочитать этот раздел и первую часть следующего.