в точном вычислении $\mu_1(H)$ для проверки лембова сдвига способствовали проведению гораздо более изощренных вычислений. Киносита проделал вычисления, потребовавшие диагонализации матрицы размера 39×39, а позже Перкерис провел вычисления с 1078 параметрами! Результаты Перкериса приведены в следующей таблице:

Вклад в энергию ионизации (в см$^{-1}$)	
ΔE (чисто кулонова модель)	198 317,374
Сдвиг Юза—Эккарта	—4,785
Релятивистские поправки	—0,562
Лембов сдвиг (теория)	—1,351 $\pm$0,02
Теоретическое значение	198 310,676$\pm$0,02
Экспериментальное значение	198 310,82 $\pm$0,15

Ошибка, указанная для лембова сдвига, отражает неопределенности счета и небольшие расхождения в вычислениях разных авторов. Отметим, что неравенство Темпля в качестве оценки сверху для $\Delta E = E_{\rm ion} - E_{\rm atom}$ дает 198 317,866.

Итак, мы видим, что в пределах ошибки эксперимента лембов сдвиг совпадает с экспериментом с точностью до 1%. Эта проверка предсказаний квантовой электродинамики была бы невозможна без точных вычислений низшего собственного значения, которые позволяет проделать метод Релея—Ритца.

XIII.3. Связанные состояния операторов Шредингера II: качественная теория

В этом разделе мы рассмотрим некоторые качественные характеристики $N(V)$—числа связанных состояний оператора $-\Delta+V$ с учетом кратностей. В первой части мы обсудим, конечно или бесконечно число $N(V)$. В следующих частях будут получены оценки величины $N(V)$. Везде используется принцип минимакса, но для нахождения оценок потребуются и другие аналитические методы.

A. Конечен или бесконечен $\sigma_{\rm disc}(H)$?

Принцип минимакса полезен при доказательстве существования собственных значений и, в частности, для демонстрации того, что в некоторых случаях дискретный спектр H_0+V бесконечен. Мы сначала докажем один результат для двух частиц. Интуитивно кажется, что при наличии бесконечного числа связанных состояний те из них, для которых энергия связи мала, должны быть пространственно растянуты и потому более чувствительны к поведению $V(x)$ при больших x, а не при малых. Поэтому мы ожидаем, что ответ на вопрос, имеет ли H_0+V бесконечное число связанных состояний, зависит от поведения V при больших x. Мы увидим, что пограничное поведение отвечает функции $|x|^{-2}$. Доказательство будет опираться помимо принципа минимакса на следующие три факта: (1) лемму (принцип неопределенности) из § X.2, т. е. неравенство $-\Delta-{}^1/_4 r^{-2}\geqslant 0$; (2) соотношение $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0, \infty)$ для $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$, где R обозначает класс Рольника (мы докажем его в следующем разделе); (3) то, что $-\Delta+V$ имеет лишь конечное число связанных состояний, если $V\in R$ (это будет доказано ниже в части С).

Теорема XIII.6. Рассмотрим оператор $-\Delta+V$ в $L^2(\mathbb{R}^3)$.

(a) Предположим, что $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$ и что V удовлетворяет условию

$$V(x)\leqslant -ar^{-2+\varepsilon}, \quad \text{если } r\equiv|x|>R_0,$$

с некоторым R_0 и некоторыми $a>0$, $\varepsilon>0$. Тогда $\sigma_{\text{disc}}(-\Delta+V)$ бесконечен.

(b) Предположим, что $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$ и что V удовлетворяет условию

$$V(x)\geqslant -{}^1/_4 br^{-2}, \quad \text{если } r>R_0,$$

с некоторым R_0 и некоторым $b<1$. Тогда $\sigma_{\text{disc}}(-\Delta+V)$ конечен.

Доказательство. (a) Так как $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0, \infty)$, достаточно показать, что $\mu_n<0$ при каждом n. Выберем неотрицательную C^∞-функцию ψ с носителем в $\{x \mid 1<|x|<2\}$ и нормой $\|\psi\|=1$. Пусть $\psi_R(x)=R^{-3/2}\psi(xR^{-1})$, так что $\|\psi_R\|=1$ и $\operatorname{supp}\psi_R\subset$ $\subset\{x \mid R<r<2R\}$. Если $R>R_0$, то заключаем, что

$$\begin{aligned}(\psi_R, H\psi_R)&=(\psi_R, -\Delta\psi_R)+(\psi_R, V\psi_R)\leqslant\\ &\leqslant(\psi_R, -\Delta\psi_R)-a(\psi_R, r^{-2+\varepsilon}\psi_R)=\\ &=R^{-2}(\psi, -\Delta\psi)-aR^{-2+\varepsilon}(\psi, r^{-2+\varepsilon}\psi).\end{aligned}$$

Так как $\varepsilon>0$, последнее выражение при больших R отрицательно. Значит, можно найти такое Q, что $(\psi_R, H\psi_R)<0$, если $R>Q$. Положим теперь $\varphi_n=\psi_{2^nQ}$, $n=1, 2, \ldots$. Векторы φ_n ортонормальны и $(\varphi_n, H\varphi_m)=0$, если $n\neq m$, так как φ_n и φ_m имеют непересекающиеся носители, если $n\neq m$. Поэтому, полагая (при данном N) $V_N=\operatorname{span}\{\varphi_1, \ldots, \varphi_N\}$, мы видим, что $P_NHP_N\restriction V_N$ имеет собственные значения $\{(\varphi_n, H\varphi_n)\}_{n=1}^N$. В силу принципа Релея—Ритца

$$\mu_N(H)\leqslant\sup_{1\leqslant m\leqslant N}\{(\varphi_m, H\varphi_m)\}<0.$$

Так как N произвольно и $\sigma_{\text{ess}}=[0, \infty)$, то $-\Delta+V$ имеет бесконечно много собственных значений.

(b) Пусть $W = V + {}^1/_4 br^{-2}$. Тогда в смысле форм на $Q(H_0)$

$$-\Delta + V = -(1-b)\Delta + W + b(-\Delta - {}^1/_4 r^{-2}) \geqslant$$
$$\geqslant -(1-b)\Delta + W \geqslant -(1-b)\Delta + \tilde{W},$$

где $\tilde{W} = \min(W, 0)$. Следовательно, по принципу минимакса
$\mu_n(-\Delta+V) \geqslant \mu_n(-(1-b)\Delta + \tilde{W}) = (1-b)\mu_n(-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W})$.
По предположению, $\tilde{W}$ обладает компактным носителем и принадлежит $R + (L^\infty)_\varepsilon$. Простое упражнение (задача 70 к гл. XI) показывает, что если потенциал из $R + (L^\infty)_\varepsilon$ имеет компактный носитель, то он принадлежит R. Следовательно, $-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W}$ имеет лишь конечное число связанных состояний, так что $\mu_n(-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W}) = 0$ при $n \geqslant N_0$ для некоторого N_0. Значит,

$$0 \geqslant \mu_n(-\Delta+V) \geqslant (1-b)\mu_n(-\Delta + (1-b)^{-1}\tilde{W}) = 0,$$

если $n \geqslant N_0$. Следовательно, $-\Delta + V$ имеет не более N_0 собственных значений в $(-\infty, 0)$. ∎

Возвращаясь к этому доказательству, можно понять, почему именно r^{-2} характеризует критическое пограничное поведение потенциала. При масштабном преобразовании $\psi \mapsto \psi_R$ оператор $-\Delta$ преобразуется как однородная функция степени -2. Стало быть, если степень однородности V на больших расстояниях равна $-2+\varepsilon$, то он пересиливает; если же она равна $-2-\varepsilon$, пересиливает кинетическая энергия и состояния с большими расстояниями между составляющими их частицами не могут иметь отрицательных энергий.

Для систем из N частиц положение более сложное и зависит уже не только от поведения V на больших расстояниях. Например, существует система из трех частиц с парными потенциалами: $V = V_{01}(r_1) + V_{02}(r_2) + V_{12}(r_1 - r_2)$, такая, что число $N(\lambda)$ связанных состояний гамильтониана $H_\lambda = -\Delta_1 - \Delta_2 + \lambda V$ ведет себя следующим образом. При $\lambda = 0$ оно равно 0; затем, когда λ возрастает от нуля, $N(\lambda)$ тоже растет, становясь равным $1, 2, \ldots$, пока вдруг при $\lambda = \lambda_1$ оно не становится бесконечным: $N(\lambda) = \infty$. При дальнейшем возрастании λ появляется следующее критическое значение λ_2: $N(\lambda) = \infty$ при $\lambda_1 \leqslant \lambda \leqslant \lambda_2$. Затем появляются новые критические значения $\lambda_3, \lambda_4, \ldots$, так что в результате $N(\lambda) = \infty$, если $\lambda \in [\lambda_1, \lambda_2] \cup [\lambda_3, \lambda_4] \cup [\lambda_5, \lambda_6] \cup \ldots$, и $N(\lambda) < \infty$, если $\lambda \in [0, \lambda_1) \cup (\lambda_2, \lambda_3) \cup (\lambda_4, \lambda_5) \cup \ldots$. Ссылки, касающиеся этого примера, можно найти в Замечаниях.

Усложняющее обстоятельство в системах N частиц состоит в том, что их существенный спектр есть $[\Sigma, \infty)$, где, возможно, $\Sigma < 0$ (см. § 5). Так, в указанном выше примере $\mu_n(H_{\lambda_2}) < \Sigma_{\lambda_2}$ при всех n. Когда λ, возрастая, проходит λ_2, $\mu_n(H_\lambda)$ убывает и становится меньше $\mu_n(H_{\lambda_2})$; но Σ_λ тоже убывает и может обогнать $\mu_n(H_\lambda)$, так что $\mu_n(H_\lambda) = \Sigma_\lambda$ при $\lambda > \lambda_2$ для больших n.

Рассмотрим гамильтониан атома гелия. Эвристически состояния существенного спектра не обязаны быть связанными, и потому должны описывать конфигурации частиц, находящихся вдали друг от друга. Например, первый электрон остается связанным, а второй удаляется на ∞. Спектр энергии этих состояний начинается от -1 — энергии основного состояния оператора $-\Delta_1 - 2|r_1|^{-1}$. Рассматривая другие возможности, мы видим, что с физической точки зрения следует ожидать, что $\sigma_{ess}(H) = [-1, \infty)$. И в самом деле, мы докажем это в § 5. Зная это, можно показать, как применяется принцип минимакса в многочастичном случае:

Предложение (Като).

$$H = -\Delta_1 - 2|r_1|^{-1} - \Delta_2 - 2|r_2|^{-1} + |r_1 - r_2|^{-1}$$

имеет бесконечный дискретный спектр.

Доказательство. Мы должны установить только, что $\mu_n(H) < -1$ при всех n, поскольку $\sigma_{ess}(H) = [-1, \infty)$. По методу Релея — Ритца следует лишь найти для каждого n некоторое n-мерное пространство V_n со свойством $\sup(\psi, H\psi) < -\|\psi\|^2$ для всех $\psi \in V_n$. Интуитивно кажется, что для построения V_n нужно поместить первый электрон в его основное состояние, а второй электрон брать в другом подходящем состоянии. Пусть $\psi_1(r_1)$ — нормированное основное состояние оператора $-\Delta_1 - 2|r_1|^{-1}$, т. е. $(-\Delta_1 - 2|r_1|^{-1})\psi_1 = -\psi_1$, и пусть $\varphi_n(r_2)$ — нормированная n-я собственная функция оператора $-\Delta_2 - |r_2|^{-1}$, т. е. $(-\Delta_2 - |r_2|^{-1})\varphi_n = E_n\varphi_n$, где $E_1, E_2, \ldots = -{}^1/_4, -{}^1/_{16}, -{}^1/_{16}, \ldots$, причем значение $-(4n^2)^{-1}$ повторяется n^2 раз. Пусть, далее, $\psi = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \psi_1(r_1)\varphi_i(r_2)$, причем $\sum_{i=1}^{n} |\alpha_i|^2 = 1$. Тогда $(\psi, H\psi) = t_1 + t_2 + t_3$, где

$$t_1 = (\psi, (-\Delta_1 - 2|r_1|^{-1})\psi) = (\psi, -\psi) = -1,$$

$$t_2 = (\psi, (-\Delta_2 - |r_2|^{-1})\psi) = \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i|^2 E_i \leqslant E_n,$$

$$t_3 = (\psi, (|r_1 - r_2|^{-1} - |r_2|^{-1})\psi) \leqslant 0.$$

Последнее неравенство $t_3 \leqslant 0$ следует из того, что $\psi_1(r_1)$ сферически симметрична, и потому

$$\int |r_1 - r_2|^{-1} |\psi_1(r_1)|^2 dr_1 = \int \min\{|r_1|^{-1}, |r_2|^{-1}\} |\psi_1(r_1)|^2 dr_1 \leqslant \leqslant |r_2|^{-1}.$$

Таким образом, положив $V_n = \mathrm{span}\{\psi_1\varphi_1, \ldots, \psi_1\varphi_n\}$, мы видим, что

$$(\psi, H\psi) \leqslant -1 + E_n,$$

если $\psi \in V_n$. Следовательно, $\mu_n(H) \leqslant -1 + E_n < -1$. Это показывает, что $\sigma_{\mathrm{disc}}(H)$ есть бесконечное множество. ∎

Эта аргументация была обобщена в разных направлениях. Вот один из типичных результатов:

Теорема XIII.7 (Жислин). Пусть H — гамильтониан атома — имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{\Delta_i}{2\mu_i} - \frac{n}{|r_i|}\right) + \sum_{i<j} \left(\frac{\nabla_i \cdot \nabla_j}{M} + \frac{1}{|r_i - r_j|}\right)$$

и рассматривается как оператор в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, где M и $\{\mu_i\}_{i=1}^{n}$ — произвольные положительные числа. Тогда $\sigma_{\mathrm{disc}}(H)$ бесконечен.

Такой вид приобретает гамильтониан системы, состоящей из ядра с массой M и n электронов с массами $\mu_1, \ldots, \mu_n$, после отделения движения центра масс.

В. Оценки $N(V)$ в центрально-симметричном случае

Напомним, что **центрально-симметричный** (или **центральный**) **потенциал** — это вещественнозначная функция, зависящая только от $r = |x|$. В этом случае, если E — собственное значение оператора $H = -\Delta + V$, то $\{\psi \mid H\psi = E\psi\}$ есть подпространство $L^2(\mathbb{R}^3)$, инвариантное относительно вращений, и потому оно порождается функциями вида $\psi(x) = r^{-1} f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где Y_{lm} — сферические гармоники и $\int_0^\infty |f(r)|^2 dr < \infty$. Квантовое число l называется **угловым моментом** функции ψ. Если $\psi \in D(H_0)$, то она ограничена и непрерывна, поэтому $f(r)$ непрерывна и $f(0) = 0$. Далее, f удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right) f(r) = Ef(r), \tag{4}$$

причем (4) выполняется в смысле дифференциального оператора на $L^2(0, \infty)$ с граничным условием $f(0) = 0$, а не в смысле классического дифференциального уравнения. Чтобы избежать связанных с этим трудностей, мы будем предполагать, что V принадлежит классу C^∞ и имеет компактный носитель. Тогда из теоремы о регулярности решения эллиптических уравнений следует, что решения (4) тоже принадлежат C^∞. Как отказаться от условия принадлежности C_0^∞, мы увидим позднее, когда перейдем к различным оценкам. С другой стороны, можно исходить из аппарата функций Йоста, изложенного в § XI.8, и допустить V достаточно общего вида.

Для каждого целого l и $E \leqslant 0$ пусть $u_l(r; E)$ — решение уравнения (4), удовлетворяющее условиям $u_l(0; E) = 0$ и $\lim\limits_{r \downarrow 0} r^{-l-1} u_l(r; E) = 1$. Существование и единственность таких решений в случае $V \in C_0^\infty$ довольно очевидны (см. § XI.8). Нас интересует число уровней $E < 0$, для которых $u_l(r; E)$ квадратично интегрируема. Оно в точности равно $n_l(V)$ — «числу» дискретных связанных состояний оператора $-\Delta + V$ с угловым моментом l, в том смысле, что при фиксированных l и m это число дискретных связанных состояний вида $r^{-1} f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Так как m может быть равно $-l, -l+1, \ldots, l$, это означает, что есть $(2l+1) n_l(V)$ дискретных собственных функций с угловым моментом l, так что $N(V) = \sum\limits_l (2l+1) n_l(V)$. Существует классическая теорема о $n_l(V)$:

Теорема XIII.8. Предположим, что $V \in C_0^\infty(0, \infty)$, и пусть $N_l(E; V)$ есть число нулей функции $u_l(r; E)$, отличных от нуля в $r = 0$. Тогда:

(a) Если $E < 0$, то $N_l(E; V) < \infty$.

(b) $N_l(E; V)$ есть монотонно возрастающая функция E и монотонно убывающая функция l.

(c) Если $E_0 \leqslant 0$, то $N_l(E_0; V)$ совпадает с числом квадратично интегрируемых решений уравнения (4) с $E < E_0$. В частности,

$$n_l(V) = N_l(0; V) \text{ и } \dim P_{(-\infty, E)} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) N_l(E; V) \text{ с } E \leqslant 0,$$

где $\{P_\Omega\}$ — спектральные проекторы оператора $-\Delta + V(|x|)$.

Мы докажем эту теорему с помощью последовательности лемм. В то время как классическое доказательство опирается на понятия теории дифференциальных уравнений, нам удается по большей части избежать этого аппарата, привлекая несколько раз принцип минимакса. Прежде чем перейти к доказательству, поясним, почему между N_l и n_l должна существовать связь. Допустим, что E настолько отрицательно, что разность $E - V$ всюду отрицательна. В силу дифференциального уравнения, u и u'' имеют одинаковый знак. Поэтому, если u и u' вначале положительны, они и останутся положительными. Таким образом, $N_l(E; V) = 0$, если E «очень отрицательно». Мы увидим, что, когда E убывает от $E = 0$, нули $u_l(r; E)$ двигаются в направлении больших r и исчезают, уходя к $r = \infty$. Так как $N_l(E; V) = 0$ для очень отрицательных E, то $N_l(0; V)$ есть число тех нулей, которые ушли на бесконечность. Суть в том, что те энергии, при которых нули уходят на бесконечность, это, интуитивно, как раз те самые энергии, для которых $\lim_{r\to\infty} u_l(r; E)=0$. Так как V имеет компактный носитель, то $u_l(r; E) \sim a \exp(-\sqrt{-E}r)+ +b\exp(+\sqrt{-E}r)$ при больших r. Если

$$\lim_{r\to\infty} u_l(r; E)=0,$$

то $u_l(r; E) \sim a\exp(-\sqrt{-E}r)$ при больших r, так что u_l квадратично интегрируема. Поэтому число собственных значений должно быть равно числу нулей.

Лемма 1. Пусть $E_0 \leqslant 0$. Если $N_l(E_0; V) \geqslant m_0$, то (4) имеет по меньшей мере m_0 квадратично интегрируемых решений с $E < E_0$. В частности, поскольку $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta+V)=[0, \infty)$, то $N_l(E_0; V)<\infty$, если $E_0 < 0$.

Доказательство. Пусть

$$H_l = -\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)$$

— оператор на $L^2(0, \infty)$. Этот оператор самосопряжен в существенном на области определения $\{u \mid u \in C_0^\infty[0, \infty),\ u(0)=0\}$, если $l=0$ и на $\{u \mid u\in C_0^\infty(0, \infty)\}$, если $l \neq 0$ (задача 16). Мы покажем сначала, что если $N_l(E_0; V) \geqslant m_0$, то $\mu_{m_0}(H_l) \leqslant E_0$. В самом деле, пусть $r_0=0<r_1<r_2<\ldots<r_{m_0}<\infty$ суть нули $u_l(r; E_0)$. Определим ψ_i, полагая

$$\psi_i(r)=\begin{cases} u_l(r; E_0) & \text{при } r_{i-1}\leqslant r\leqslant r_i, \\ 0 & \text{в противном случае.}\end{cases}$$

Тогда ψ_i непрерывны и кусочно принадлежат C^1. Хотя $\psi_i \notin D(-d^2/dr^2)$, но она принадлежит $Q(-d^2/dr^2)$, а значит, и $Q(H_l)$ (см. задачу 17). Более того,

$$\begin{aligned}\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i,\ H_l\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right) &= \left(\frac{d}{dr}\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right),\ \frac{d}{dr}\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right)\right)+ \\ &\quad +\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i,\ \left(\frac{l(l+1)}{r^2}+V\right)\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right)= \\ &= \sum_{i=1}^{m_0}|a_i|^2\int_{r_{i-1}}^{r_i}\left[|\psi_i'|^2+\left(\frac{l(l+1)}{r^2}+V\right)|\psi_i|^2\right]dr= \\ &= \sum_{i=1}^{m_0}|a_i|^2\int_{r_{i-1}}^{r_i}\bar\psi_i\left[-\psi_i''+\left(\frac{l(l+1)}{r^2}+V\right)\psi_i\right]dr= \\ &= E_0\left(\sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i,\ \sum_{i=1}^{m_0} a_i\psi_i\right).\end{aligned}$$

Таким образом, мы имеем m_0-мерное подпространство в $Q(H_l)$, на котором среднее значение H_l меньше или равно E_0, так что $\mu_{m_0}(H_l) \leqslant E_0$ согласно теореме XIII.2.

Затем мы замечаем, что если $E_n \to E_\infty$, то $u_l(r; E_n)$ сходится к $u_l(r; E_\infty)$ равномерно на компактных подмножествах из $[0, \infty)$. Это следствие непрерывной зависимости решений обыкновенного дифференциального уравнения от коэффициентов. Значит, $u_l(r; E_0 - 1/n)$ равномерно сходится на компактах к $u_l(r; E_0)$. Отсюда следует, что если $u_l(r; E_0)$ имеет по меньшей мере m_0 нулей, то $u_l(r; E_0 - 1/n)$ при некотором n имеет по меньшей мере m_0 нулей, так что $\mu_{m_0}(H_l) \leqslant E_0 - 1/n < E_0$. Так как $\sigma_{\text{ess}}(H_l) \subset \sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, \infty)$, то утверждение леммы следует из принципа минимакса. ∎

Лемма 2 (осцилляционная теорема Штурма). $N_l(E; V)$ есть монотонно возрастающая функция E. Если $E_0 < 0$ — собственное значение H_l, то $N_l(E; V) \geqslant N_l(E_0; V) + 1$ при $E > E_0$.

Доказательство. Пусть $V_l = l(l+1)r^{-2} + V$, и пусть $r_0 = 0 < < r_1 < \ldots < r_n < \infty$ суть нули $u_l(r; E_0)$. Пусть $E > E_0$. Мы покажем, что $u_l(r; E)$ имеет по меньшей мере по одному нулю в каждом из интервалов $(0, r_1)$, (r_1, r_2), ..., (r_{n-1}, r_n), а если E_0 есть собственное значение, то также и в интервале (r_n, ∞). Действительно, допустим, что $u_l(r; E)$ не имеет нуля в интервале (r_i, r_{i+1}). Заменяя, если надо, u_l на $-u_l$, мы можем предположить, что и $u_l(r; E)$ и $u_l(r; E_0)$ неотрицательны в (r_i, r_{i+1}). В частности, $u_l'(r_i; E_0) \geqslant 0$ и $u_l'(r_{i+1}; E_0) \leqslant 0$. Вычислим

$$I = \int_{r_i}^{r_{i+1}} [u_l'(r; E_0) u_l(r; E) - u_l(r; E_0) u_l'(r; E)]' \, dr.$$

С одной стороны,

$$\begin{aligned} I &= [u_l'(r; E_0) u_l(r; E) - u_l(r; E_0) u_l'(r; E)] \Big|_{r_i}^{r_{i+1}} = \\ &= u_l'(r_{i+1}; E_0) u_l(r_{i+1}; E) - u_l(r_i; E_0) u_l'(r_i; E) \leqslant 0. \end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} I &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} [u_l''(r; E_0) u_l(r; E) - u_l(r; E_0) u_l''(r; E)] \, dr = \\ &= \int_{r_i}^{r_{i+1}} u_l(r; E_0) u_l(r; E) [(V_l - E_0) - (V_l - E)] \, dr = \\ &= (E - E_0) \int_{r_i}^{r_{i+1}} u_l(r; E_0) u_l(r; E) \, dr > 0. \end{aligned}$$

Полученное противоречие доказывает, что $u_l(r; E)$ обязана иметь нуль в (r_i, r_{i+1}). Допустим теперь, что E_0 есть собственное значение и $l=0$. Так как V имеет компактный носитель, то $u_0(r; E_0)=a\exp(-\sqrt{-E_0}r)$ при больших r и $|u_0(r; E)|+|u_0'(r; E)|\leqslant b\exp(+\sqrt{-E}r)$ при больших r. Следовательно, I и остальные интегралы, которые мы выписали, сходятся, если заменить r_{i+1} на ∞, а r_i на r_n. Значит, в силу тех же аргументов, $u_0(r; E)$ имеет нуль в (r_n, ∞). Подобное рассуждение справедливо и для общего l, если мы заменим экспоненту подходящими функциями Бесселя. Таким образом, лемма справедлива. ∎

Лемма 3. $N_l(\mu_n(H_l); V)=n-1$, если $\mu_n(H_l)<0$.

Доказательство. Если $N_l(\mu_n(H_l); V)>n-1$, по то лемме 1 в $(-\infty, \mu_n)$ лежат по крайней мере n собственных значений, так что $N_l(\mu_n(H_l); V)\leqslant n-1$ в силу принципа минимакса. С другой стороны, докажем по индукции, что $N_l(\mu_n(H_l); V)\geqslant n-1$. Очевидно, что $N_l(\mu_1(H_l))\geqslant 0$. Допустим, что $\mu_n<0$ и $N_l(\mu_{n-1}(H_l))\geqslant n-2$. Так как $\mu_{n-1}\leqslant\mu_n<0$, μ_{n-1} — собственное значение и μ_n тоже собственное значение, то $\mu_n>\mu_{n-1}$, ибо уравнение (4) может иметь не более одного решения с $f(0)=0$. Следовательно, по лемме 2

$$N_l(\mu_n(H_l))\geqslant N_l(\mu_{n-1}(H_l))+1=n-1. \quad ∎$$

Теперь мы готовы к доказательству теоремы.

Доказательство теоремы XIII.8. Мы доказали уже пункт (a) и то, что $N_l(E; V)$ монотонно по E. С одной стороны, по лемме 1 число связанных состояний с энергией $<E$ не меньше $N_l(E; V)$. Допустим, с другой стороны, что оно больше $N_l(E; V)$. Если $E=0$ и $N_l=\infty$, то это невозможно, поэтому предположим, что $N_l(E; V)=n<\infty$. Мы предполагаем, что существует $n+1$ собственных значений ниже E, так что $\mu_{n+1}(H_l)<E$. Но $N_l(\mu_{n+1}(H_l))=n$ и μ_{n+1} есть собственное значение, так что, по лемме 2, $N_l(E; V)\geqslant n+1$. Это противоречие доказывает, что $N_l(E; V)$ есть число собственных значений H_l в $(-\infty, E)$. Так как $H_{l+1}\geqslant H_l$, то мы заключаем, что $N_l(E; V)\geqslant N_{l+1}(E; V)$. ∎

С помощью теоремы XIII.8 можно вывести большое число оценок для $n_l(V)$ и $l_{\max}(V)=\max\{l\mid n_l(V)>0\}$ — наибольшего углового момента, для которого существуют связанные состояния.

Теорема XIII.9. Пусть V — центрально-симметричный потенциал и $V\in R+L^\infty(\mathbb{R}^3)_\varepsilon$. Тогда:

(a) (оценка Баргмана)

$$n_l(V) \leqslant (2l+1)^{-1} \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr;$$

(b) (оценка Калоджеро) если V монотонно убывает и отрицателен, то

$$n_l(V) \leqslant \frac{2}{\pi} \int_0^\infty |V(r)|^{1/2}\,dr;$$

(c) (оценка ГМГТ) для любого $p \geqslant 1$

$$n_l(V) \leqslant c_p (2l+1)^{-(2p-1)} \int_0^\infty r^{2p-1} |V(r)|^p\,dr,$$

где $c_p = (p-1)^{p-1}\,\Gamma(2p)/p^p\,\Gamma(p)^2$, а Γ — гамма-функция Эйлера;

(d) если $\int_0^\infty |V(r)|^{1/2} dr < \infty$ и $V(r) < 0$ на некотором открытом множестве, то для каждого l существуют такие Λ, a и b, что $0 < a < b < \infty$ и при $\lambda > \Lambda$

$$a\lambda^{1/2} \leqslant n_l(\lambda V) \leqslant b\lambda^{1/2};$$

(e) если $\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr < \infty$ и $V(r) < 0$ на некотором открытом множестве, то существуют такие c, d и Λ, что $0 < c < d < \infty$ и при $\lambda > \Lambda$

$$c\lambda^{1/2} \leqslant l_{\max}(\lambda V) \leqslant d\lambda^{1/2}.$$

Доказательство. Мы выведем лишь оценку Баргмана, причем для случая $l=0$ (по поводу остальных доказательств см. задачу 19 и литературные указания в Замечаниях). Отметим прежде всего, что нужную оценку достаточно доказать при $V \leqslant 0$. В самом деле, пусть V произвольно, и пусть $V_- = \min\{V, 0\}$. Тогда, по принципу минимакса, $n_l(V_-) \geqslant n_l(V)$, так как $-\Delta + V_- \leqslant -\Delta + V$. Следовательно, если мы знаем, что $n_0(V_-) \leqslant \int_0^\infty r\,|V_-(r)|\,dr$, то можем заключить, что

$$n_0(V) \leqslant n_0(V_-) \leqslant \int_0^\infty r\,|V_-(r)|\,dr \leqslant \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr. \tag{5}$$

Заметим далее, что достаточно доказать это предложение для неположительного $V \in C_0^\infty$, так как произвольный $V \in R + (L^\infty)_\varepsilon$, для которого $V \leqslant 0$ и $\int\limits_0^\infty r\,|V(r)|\,dr < \infty$, может быть аппроксимирован неположительным $V_n \in C_0^\infty$ таким образом, что $\int\limits_0^\infty r\,|V_n(r)|\,dr \uparrow$ $\uparrow \int\limits_0^\infty r\,|V(r)|\,dr$ и $V_n - V \to 0$ в $R + L^\infty$. Так как $V_n - V \to 0$ в $R + L^\infty$, то $-\Delta + V_n \to -\Delta + V$ в равномерном резольвентном смысле. Таким образом, $P^{(n)}_{(-\infty,\,E)} \to P_{(-\infty,\,E)}$ при любом $E < 0$, не являющемся собственным значением $-\Delta + V$. Вводя $P^{(l)}$ — проектор на состояния с угловым моментом l, мы заключаем, что

$$\lim_{E \uparrow 0} \operatorname{Tr}\left[P^{(n)}_{(-\infty,\,E)} P^{(l)}\right] = (2l+1)\,n_l(V_n),$$

где левая часть монотонно сходится и

$$\lim_{E \uparrow 0} \operatorname{Tr}\left[P_{(-\infty,\,E)} P^{(l)}\right] = (2l+1)\,n_l(V_n).$$

Если мы знаем, что $n_0(V_n) \leqslant \int\limits_0^\infty r\,|V_n(r)|\,dr$, то можем заключить, что

$$n_0(V) = \lim_{E \uparrow 0} \operatorname{Tr}\left[P_{(-\infty,\,E)} P^{(0)}\right] \leqslant \sup_{n,\,E<0} \operatorname{Tr}\left[P^{(n)}_{(-\infty,\,E)} P^{(0)}\right] \leqslant$$

$$\leqslant \sup_n n_0(V_n) \leqslant \sup_n \int\limits_0^\infty r\,|V_n(r)|\,dr = \int\limits_0^\infty r\,|V(r)|\,dr.$$

Именно эти рассуждения позволяют нам ограничиться $V \in C_0^\infty$ в теореме XIII.8. Итак, мы предполагаем, что $V \in C_0^\infty$ и $V \leqslant 0$.

Пусть u — решение уравнения $-u'' + Vu = 0$ с $u(0) = 0$. Определим

$$a(r) = \frac{u(r)}{u'(r)} - r,$$

где $u'(r) \neq 0$. Тогда $u(r) = (a(r) + r)\,u'(r)$, так что

$$\begin{aligned} u'(r) &= (a'(r)+1)\,u'(r) + (a(r)+r)\,u''(r) = \\ &= u'(r) + a'(r)\,u'(r) + V(r)\,(a(r)+r)\,u(r) = \\ &= u'(r) + a'(r)\,u'(r) + V(r)\,(a(r)+r)^2\,u'(r). \end{aligned}$$

Следовательно, когда $u'(r) \neq 0$, имеем

$$a'(r) = -V(r)\,(a(r)+r)^2, \tag{6}$$

так называемое **уравнение Риккати**. Переход от линейного уравнения второго порядка $-u'' + Vu = 0$ к нелинейному дифферен-

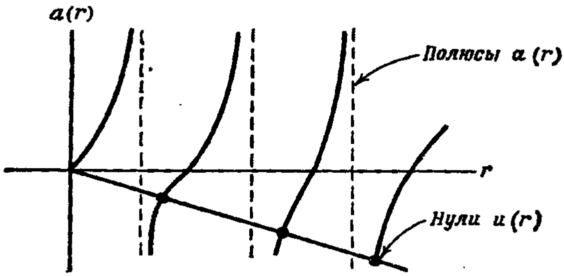

Рис. XIII.1. Функция Риккати $a(r)$.

циальному уравнению первого порядка, подобному (6),— это первый важный элемент доказательства. Ценность таких уравнений в том, что, если отбросить положительные члены, они становятся дифференциальными неравенствами первого порядка. Эти неравенства можно проинтегрировать и получить оценку числа нулей функции $u(r)$.

Так как $V \leqslant 0$, то вследствие (6) a монотонно возрастает и обращается в бесконечность в каждом нуле $u'(r)$. А так как a монотонна, то число полюсов $a(r)$ в точности равно числу нулей $a(r)+r$ (см. рис. XIII.1). По теореме XIII.8 число нулей $u(r)$, равное числу нулей $a(r)+r$, есть в точности $n_0(V)$. Мы воспользовались тем, что u удовлетворяет уравнению второго порядка, так что u и u' не могут одновременно обращаться в нуль в точке $r \neq 0$.

Прием, с помощью которого доказываются обе оценки — Баргмана и Калоджеро, сводится к введению вспомогательной функции от переменной a; для нее записывается соответствующее дифференциальное уравнение, которое затем переделывается в интегрируемое дифференциальное неравенство (см. задачу 18, относящуюся к оценке Калоджеро). Пусть $b(r)=a(r)/r$. Тогда из (6) следует, что

$$b'(r) = -rV(r)(b(r)+1)^2 - r^{-1}b(r).$$

Далее, $b(0)=0$, так как $a(0)=\lim\limits_{r\to 0}(u(r)/u'(r)-r)=0$, и поэтому $\lim\limits_{r\to 0} b(r)=\lim\limits_{r\to 0} a'(r)=0$ в силу (6). Наконец, полюсы $b(r)$ совпадают в точности с полюсами $a(r)$, так что число полюсов b есть $n_0(V)$. Предположим, что b имеет нули $z_1=0<z_2<\ldots<z_n$ и полюсы $p_1<p_2<\ldots<p_n$, причем $z_i<p_i<z_{i+1}$. Тогда $b(r)>0$ в каждом интервале (z_i, p_i), так что $b'(r) \leqslant -rV(r)(b(r)+1)^2$, или

$$-[(1+b(r))^{-1}]' \leqslant -rV(r) = r\,|V(r)|,$$

так как $V \leqslant 0$. Интегрируя от z_i до p_i, получим

$$1 = \int_{z_i}^{p_i} -\frac{d}{dr}\left(\frac{1}{1+b(r)}\right) dr \leqslant \int_{z_i}^{p_i} r\,|V(r)|\,dr.$$

Суммируя далее по i, найдем

$$n_0(V) \leqslant \sum_{i=1}^{n} \int_{z_i}^{p_i} r\,|V(r)|\,dr \leqslant \int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr,$$

что и доказывает нужную оценку. ∎

Остается сделать еще несколько замечаний об оценках теоремы XIII.9. Во-первых, то же рассуждение, с помощью которого было получено неравенство (5), приводит к оценкам

$$n_l(V) \leqslant (2l+1)^{-1} \int_0^\infty r\,|V_-(r)|\,dr,$$

$$n_l(V) \leqslant \frac{2}{\pi} \int_0^\infty |V_-(r)|^{1/2}\,dr.$$

Во-вторых, из оценки Баргмана можно получить, что если $\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr < \infty$, то $n_l(V) = 0$ для больших l, так как $n_l(V) = 0$, если оно меньше единицы. Точнее, из оценки Баргмана следует, что

$$l_{\max}(V) \leqslant \frac{1}{2}\left[\int_0^\infty r\,|V(r)|\,dr - 1\right]. \tag{7}$$

Заметим далее, что оценки Баргмана, Калоджеро и (7) суть «наилучшие» в том смысле, что существуют потенциалы, для которых $n_l(V)$ (или $l_{\max}(V)$) принимают любые наперед заданные целые значения, а интегралы в правой части произвольно близки к $n_l(V)$ (или $l_{\max}(V)$). Таким образом, константы $(2l+1)^{-1}$, $2/\pi$ и $1/2$ нельзя заменить никакими меньшими константами. С другой стороны, оценки Баргмана и (7) очень слабы для сильных потенциалов в том смысле, что их правые части растут как λ, когда $\lambda \to \infty$, в то время как $n_l(\lambda V)$ и $l_{\max}(\lambda V)$ растут лишь как $\lambda^{1/2}$. Наконец, еще заметим, что (d) и (e) для ограниченных классов потенциалов могут быть усилены:

$$\lim_{\lambda\to\infty} \frac{n_l(\lambda V)}{\lambda^{1/2}} = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty |V_-(r)|^{1/2}\,dr \tag{8}$$

при любом l;

$$\lim_{\lambda\to\infty}\frac{l_{\max}(\lambda V)}{\lambda^{1/2}}=-\min_r\{r^2V(r)\}$$

и

$$\lim_{\lambda\to\infty}\frac{N(\lambda V)}{\lambda^{3/2}}=\frac{1}{6\pi^2}\int|V_-(r)|^{3/2}d^3r. \tag{9}$$

Мы докажем (8) и (9) при весьма общих предположениях в § 15.

С. Оценки $N(V)$ в общем двухчастичном случае

Обратимся теперь к нахождению оценок $N(V)$ — полного числа связанных состояний — без предположения о центральной симметричности V. Отметим сначала два полезных факта:

Лемма. Пусть H_0 самосопряжен и положителен. Пусть V — ограниченное в смысле форм возмущение H_0 с нулевой относительной гранью. Пусть $H_0+\lambda V$ определен как оператор, возникающий из суммы форм $(\lambda\in\mathbb{R})$. Предположим, что $[0, \infty)\subset\sigma(H_0+\lambda V)$ при всех $\lambda\in\mathbb{R}$. Тогда:

(a) $\mu_n(H_0+\lambda V)$ непрерывна по λ при $\lambda\in\mathbb{R}$;

(b) $\mu_n(H_0+\lambda V)$ монотонно убывает по λ при $\lambda\in[0, \infty)$ и строго монотонна, если μ_n отрицательно.

Эта лемма вытекает из принципа минимакса (задача 25a). В интересном случае, когда $H_0=-\Delta$, $V\in R+(L^\infty)_\varepsilon$, можно воспользоваться также теорией возмущений гл. XII (задача 25b). Здесь R — класс Рольника, определенный в т. 2.

Теорема XIII.10 (оценка Бирмана — Швингера). Пусть $V\in R$. Тогда

$$N(V)\leqslant\left(\frac{1}{4\pi}\right)^2\int\frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2}d^3x\,d^3y.$$

В частности, $N(V)<\infty$.

Доказательство. Как и при доказательстве теоремы XIII.9, достаточно доказать эту оценку, когда V принадлежит C_0^∞ и $V\leqslant 0$. Пусть $E<0$, и пусть $N_E(V)=\dim(\operatorname{Ran}P_{(-\infty,\,E)})$. Для упрощения обозначений будем писать $\mu_n(\lambda)$ вместо $\mu_n(-\Delta+\lambda V)$. Тогда

$$N_E(V)=\#\{n\mid\mu_n(1)<E\},$$

где $\#(A)$ — мощность множества A. Так как $\mu_n(\lambda)$ монотонна и непрерывна и $\mu_n(0)=0$, то $\mu_n(1)<E$ тогда и только тогда, когда $\mu_n(\lambda)=E$ для некоторого $0<\lambda<1$, и в этом случае $\mu_n(\lambda)=E$

в точности для одного λ. Следовательно,

$$N_E(V) = \#\{n \mid \mu_n(\lambda) = E \text{ для некоторого } \lambda \in (0, 1)\} \leqslant$$
$$\leqslant \sum_{\{\lambda \mid \mu_k(\lambda) = E;\ k=1, \ldots, N_E(V)\}} \lambda^{-2} \leqslant \sum_{\{\lambda \mid \mu_k(\lambda) = E;\ k=1, 2, \ldots\}} \lambda^{-2}.$$

Заметим далее, что $(H_0 + \lambda V - E)\psi = 0$ тогда и только тогда, когда (задача 26)

$$\lambda (|V|^{1/2} (H_0 - E)^{-1} |V|^{1/2}) (|V|^{1/2}\psi) = (|V|^{1/2}\psi),$$

а это верно тогда и только тогда, когда уравнение

$$\lambda \int \frac{|V(x)|^{1/2} e^{-\sqrt{-E}\,|x-y|} |V(y)|^{1/2}}{4\pi |x-y|} \varphi(y)\, dy = \varphi(x)$$

имеет ненулевое решение $\varphi \in L^2$. Пусть K — оператор с интегральным ядром $|V(x)|^{1/2} \exp\left(-\sqrt{-E}\,|x-y|\right) |V(y)|^{1/2}/4\pi |x-y|$. Так как $V \in R$, то K — оператор Гильберта — Шмидта, причем он самосопряжен, поскольку его ядро вещественно и симметрично. В результате

$$\sum_{\{\mu \mid \mu - \text{собственное значение } K\}} \mu^2 = \operatorname{Tr}(K^*K) =$$
$$= \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int e^{-2\sqrt{-E}\,|x-y|} \frac{|V(x)|\,|V(y)|}{|x-y|^2}\, dx\, dy.$$

Однако ненулевое μ будет собственным значением K в том и только том случае, если $\mu^{-1}K\varphi = \varphi$ имеет решение, что, в силу предыдущего, верно тогда и только тогда, когда $\mu_n(\lambda) = E$, причем $\lambda = \mu^{-1}$. Следовательно,

$$\sum_{\{\lambda \mid \mu_k(\lambda) = E\}} \lambda^{-2} = \sum_{\{\mu \mid \mu - \text{собственное значение } K\}} \mu^2,$$

так что

$$N_E(V) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int e^{-2\sqrt{-E}\,|x-y|} \frac{|V(x)|\,|V(y)|}{|x-y|^2}\, dx\, dy.$$

Так как $N(V) = \lim_{E \uparrow 0} N_E(V)$, то теорема доказана. ∎

Так же как в центрально-симметричном случае, если мы определим $V_- = \min(V, 0)$, то получим

$$N(V) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int \frac{V_-(x)\, V_-(y)}{|x-y|^2}\, dx\, dy.$$

Заметим еще, что неравенство Бирмана — Швингера можно обобщить так, чтобы включить и связанные состояния с нулевой энергией. т. е. можно доказать (см. задачу 28), что

$$\dim(\operatorname{Ran} P_{(-\infty,\,0]}) \leqslant \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int \frac{|V(x)|\,|V(y)|}{|x-y|^2}\,dx\,dy.$$

Использованный выше метод доказательства можно применить и для доказательства оценки Баргмана.

Одно из следствий оценки Бирмана — Швингера состоит в том, что если $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ то $N(\lambda V) = 0$ при достаточно малом λ. Скоро мы увидим, что это справедливо также и при $n > 3$. Фактически мы докажем в § 7, что если $V \in L^{1/2n-\varepsilon}(\mathbb{R}^n) \cap L^{1/2n+\varepsilon}(\mathbb{R}^n)$, то $-\Delta+\lambda V$ и $-\Delta$ унитарно эквивалентны при малых λ. Однако если $n = 1, 2$, то положение меняется.

Теорема XIII.11. Пусть V — всюду неположительная функция из $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ при $n=1$ или 2, не равная тождественно нулю. Тогда $-\Delta+\lambda V$ имеет отрицательное собственное значение при всех $\lambda > 0$.

Доказательство. Как видно из доказательства теоремы XIII.10, достаточно убедиться, что для любого $\lambda > 0$ существует такое $\varkappa$, для которого $|V|^{1/2}(-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}$ имеет собственное значение, большее чем λ^{-1}. Так как $|V|^{1/2}(-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}$ — компактный оператор (на самом деле даже оператор Гильберта — Шмидта), положительный и самосопряженный то достаточно доказать, что

$$\lim_{\varkappa^2 \to 0} \| |V|^{1/2}(-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2} \| = \infty.$$

Для этого надо только найти такое $\eta \in L^2(\mathbb{R}^n)$, что

$$\lim_{\varkappa^2 \downarrow 0} (|V|^{1/2}\eta,\ (-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}\eta) = \infty.$$

Выберем любое ненулевое η в L^2, такое, что $\varphi(x) \equiv |V(x)|^{1/2} \times \eta(x) \geqslant 0$ и не обращается в нуль почти всюду. Тогда

$$(|V|^{1/2}\eta,\ (-\Delta+\varkappa^2)^{-1}|V|^{1/2}\eta) = \int |\hat{\varphi}(p)|^2 (p^2+\varkappa^2)^{-1} d^n p.$$

Так как $\hat{\varphi}(p) \neq 0$ вблизи нулевого p и так как $n=1$ или 2, то этот интеграл расходится при $\varkappa^2 \to 0$. ∎

Мы обсудим снова это явление в § 17. Подробнее об этом см. задачи 20—22. В частности, для только что рассмотренного случая можно показать, что оператор $-\Delta+\lambda V$ имеет при малых λ одно отрицательное собственное значение.

Мы уже отмечали, что оценка Баргмана имеет неправильное поведение при больших константах связи в том смысле, что $n_l(\lambda V)$ растет как $c\lambda^{1/2}$, а оценка растет как $c\lambda$. То же самое относится и к оценке Бирмана — Швингера: $N(V)$ растет как $c\lambda^{3/2}$, а граница растет как $c\lambda^2$. Этот дефект исправляется следующим результатом, который особенно интересен в связи с классической картиной фазового пространства, которая будет рассмотрена в § 15.

Теорема XIII.12 (оценка Цвикеля — Либа — Розенблюма). Пусть $n \geqslant 3$, и пусть $N(V)$ — число связанных состояний оператора $-\Delta + V$ на $L^2(\mathbb{R}^n)$. Тогда

$$N(V) \leqslant c_n \int |V_-(x)|^{n/2} d^n x \tag{10}$$

с подходящей константой c_n.

Доказательство. Мы рассмотрим случай $n = 3$, а затем опишем модификации, необходимые для $n \geqslant 4$. Первое замечание состоит в том, что, как и при доказательстве неравенства Бирмана — Швингера, мы можем предположить, что $V \leqslant 0$ и что $V \in C_0^\infty$. Поэтому положим $W = -V \geqslant 0$.

При $E < 0$ пусть $N_E(V)$ есть число собственных значений оператора $-\Delta - W = -\Delta + V$, меньших E. Пусть $H_0 = -\Delta$ и $E = -\varkappa^2$. Утверждается, что

$$N_E(V) \leqslant 2\operatorname{Tr}(W[(H_0 + \varkappa^2)^{-1} - (H_0 + W + \varkappa^2)^{-1}]). \tag{11}$$

В самом деле, предположим, что φ удовлетворяет равенству $(H_0 - \lambda W)\varphi = E\varphi$; тогда $\psi = W^{1/2}\varphi$ удовлетворяет условиям

$$W^{1/2}(H_0 + \varkappa^2)^{-1} W^{1/2}\psi = \lambda^{-1}\psi,$$
$$W^{1/2}(H_0 + W + \varkappa^2)^{-1} W^{1/2}\psi = (1 + \lambda)^{-1}\psi,$$

и потому, положив $K = W^{1/2}[(H_0 + \varkappa^2)^{-1} - (H_0 + W + \varkappa^2)^{-1}] W^{1/2}$, получим

$$K\psi = [\lambda^{-1} - (1 + \lambda)^{-1}]\psi.$$

Как и при выводе оценки Бирмана — Швингера, мы видим, что $N_E(V)$ — число значений λ в $(0, 1]$, при которых $(H_0 - \lambda W)\varphi = E\varphi$ имеет решение (с учетом кратностей),— ограничено числом собственных значений K, бо́льших $1/2$. Так как K — положительный оператор, это число ограничено величиной $2\operatorname{Tr} K$, которую можно получить из (11), пользуясь цикличностью следа.

Воспользовавшись соотношением (X.98), связывающим резольвенты с полугруппами, мы видим, что

$$N_E(V) \leqslant 2 \int_0^\infty \operatorname{Tr}(W[e^{-tH_0} - e^{-t(H_0 + W)}]) e^{Et} dt,$$

где перемена порядка интегрирования и взятия следа может быть обоснована при помощи оценок, которые мы докажем ниже. Мы убедимся также, что $\operatorname{Tr}(W[e^{-tH_0} - e^{-t(H_0+W)}])$ положителен, и поскольку $N(V)=\lim\limits_{E\uparrow 0} N_E(V)$, то

$$N(V)\leqslant 2\int_0^\infty \operatorname{Tr}\left(W\left[e^{-tH_0}-e^{-t(H_0+W)}\right]\right)dt \tag{12}$$

в силу теоремы о монотонной сходимости.

Ключевая идея доказательства состоит в том, чтобы представить $e^{-tH_0}-e^{-t(H_0+W)}$ в виде интегрального оператора, воспользовавшись интегралами Винера. Для этого мы должны слегка расширить то рассмотрение интегралов Винера, которое было проведено в § X.11. Сделаем это для произвольного n, а не только для $n=3$. Основу конструкции составляет ядро

$$p(x,\ y;\ t)=(4\pi t)^{-n/2}\, e^{-(x-y)^2/4t}$$

интегрального оператора e^{-tH_0}. В § X.11 мы построили меру μ_x на непрерывных путях ω на $[0,\ \infty)$ с $\omega(0)=x$, такую, что при $0<t_1<\ldots<t_m$

$$\mu_x\{\omega \mid \omega(t_1)\in A_1,\ \ldots,\ \omega(t_m)\in A_m\}=$$
$$=\int \prod_{i=1}^{m} p(x_{i-1},\ x_i;\ t_i-t_{i-1})\,\chi_{A_i}(x_i)\,d^n x_i,$$

где χ_A — характеристическая функция A и $x_0=x$, $t_0=0$. Вследствие полугруппового свойства μ_x оказывается мерой с полной массой 1. Тем же методом, что в § X.11, можно построить меру $\mu_{x,\ y;\ t}$ на непрерывных путях на $[0,\ t]$ с $\omega(0)=x$, $\omega(t)=y$, так что при $0<t_1<\ldots<t_m<t$

$$\mu_{x,\ y;\ t}\{\omega \mid \omega(t_1)\in A_1,\ \ldots,\ \omega(t_m)\in A_m\}=$$
$$=\int\left(\prod_{i=1}^{m} p(x_{i-1},\ x_i;\ t_i-t_{i-1})\,\chi_{A_i}(x_i)\right)p(x_m,\ y;\ t-t_m)\,d^n x_i.$$

Эта мера $\mu_{x,\ y;\ t}$ называется **условной мерой Винера**. Она связана с μ_x. Действительно, если $f(\omega)$ есть функция значений, которые путь принимает на интервале $[0,\ t]$, то

$$\int f(\omega)\,d\mu_x=\int dy\left[\int f(\omega)\,d\mu_{x,\ y;\ t}\right],$$

что очевидно для функций от $\omega(t_1),\ \ldots,\ \omega(t_n)$. Полная масса $d\mu_{x,\ y;\ t}$ есть $p(x,\ y;\ t)$.

Смысл условной меры Винера в том, что теперь формула Фейнмана — Каца утверждает, что $e^{-t(H_0+W)}$ есть интегральный оператор с ядром

$$e^{-t(H_0+W)}(x,\ y)=\int d\mu_{x,\ y;\ t}\exp\left(-\int_0^t W(\omega(s))\,ds\right). \tag{13}$$

A priori (13) выполнено лишь почти всюду по x, y; однако если $W \in C_0^\infty$, то нетрудно показать, что правая часть (13) непрерывна по x и по y (см. задачу 29). С помощью основного метода, которым доказывалась формула Фейнмана—Каца, легко показать, что

$$(e^{-s(H_0+W)}We^{-(t-s)(H_0+W)})(x, y) =$$
$$= \int d\mu_{x,\, y;\, t} W(\omega(s)) \exp\left(-\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right).$$

Пользуясь тем, что ядро в правой части этого выражения непрерывно, и тем, что оператор имеет след, можно показать (см. задачу 30), что

$$\mathrm{Tr}\,(e^{-s(H_0+W)}\, We^{-(t-s)(H_0+W)}) =$$
$$= \int dx \int d\mu_{x,\, x;\, t} W(\omega(s)) \exp\left(-\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right).$$

Но $\mathrm{Tr}\,(e^{-s(H_0+W)}We^{-(t-s)(H_0+W)})$ не зависит от s вследствие цикличности следа, так что мы имеем

$$\mathrm{Tr}\,(We^{-t(H_0+W)}) = \frac{1}{t}\int_0^t \mathrm{Tr}\,(e^{-s(H_0+W)}\, We^{-(t-s)(H_0+W)})\, ds =$$
$$= \frac{1}{t}\int dx \int d\mu_{x,\, x;\, t} F\left(\int_0^t W(\omega(s))\, ds\right), \tag{14}$$

где $F(u) = ue^{-u}$.

Вооружившись формулой (14), мы можем переписать неравенство (12) в виде

$$N(V) \leqslant 2\int_0^\infty dt \int dx \int d\mu_{0,\, 0;\, t}\, t^{-1} G\left(\int_0^t W(x + \omega(s))\, ds\right), \tag{15}$$

где $G(u) = u(1 - e^{-u})$ и где мы воспользовались ковариантностью относительно сдвигов:

$$\int d\mu_{x+a,\, y+a;\, t} f(\omega(s)) = \int d\mu_{x,\, y;\, t} f(\omega(s) + a).$$

Теперь легко видеть, что G'' положительна на (0, 2) и отрицательна на (2, ∞). Поэтому если функция φ задана посредством

$$\varphi(u) = \begin{cases} u(1 - e^{-u}), & 0 < u \leqslant 2, \\ G(2) + (u-2)\, G'(2), & 2 \leqslant u < \infty, \end{cases}$$

то она удовлетворяет условиям

$$G(u) \leqslant \varphi(u); \tag{16a}$$

$$\varphi(u) \sim \begin{cases} u^2 & \text{при} \quad u = 0, \\ u & \text{при} \quad u = \infty; \end{cases} \tag{16b}$$

$$\varphi(u) \text{ выпукла.} \tag{16c}$$

Функция $\varphi(u)$ называется **выпуклой**, если $\varphi(tu + (1-t)v) \leqslant \leqslant t\varphi(u) + (1-t)\varphi(v)$ для u, $v \geqslant 0$, $0 \leqslant t \leqslant 1$. Выпуклость φ следует из того, что $\varphi'' \geqslant 0$. По индукции

$$\varphi\left(\sum_{i=1}^{n} t_i u_i\right) \leqslant \sum_{i=1}^{n} t_i \varphi(u_i),$$

если $\sum t_i = 1$ и u_i, $t_i \geqslant 0$. С помощью простого предельного перехода находим, что

$$\varphi\left(\int f(x)\, d\mu(x)\right) \leqslant \int \varphi(f(x))\, d\mu(x) \tag{17}$$

для любой положительной функции f и меры $d\mu$ с полной массой 1. Вследствие (16a) и (17)

$$G\left(\int_0^t W(x + \omega(s))\, ds\right) \leqslant t^{-1} \int_0^t ds\, \varphi(tW(x + \omega(s))).$$

С помощью теоремы Фубини мы можем теперь вывести из (15), что

$$\begin{aligned} N(V) &\leqslant 2\int_0^\infty dt\, t^{-2} \int_0^t ds \int d\mu_{0,\,0;\,t} \int dx\, \varphi(tW(x + \omega(s))) = \\ &= 2\int_0^\infty dt\, t^{-2} \int_0^t ds \int d\mu_{0,\,0;\,t} \int dx\, \varphi(tW(x)) = \\ &= 2\int_0^\infty dt\, (4\pi t)^{-3/2}\, t^{-1} \int dx\, \varphi(tW(x)) = c \int W(x)^{3/2}\, dx, \end{aligned}$$

где $c = 2(4\pi)^{-3/2} \int_0^\infty u^{-5/2} \varphi(u)\, du$ конечна вследствие (16b). Первое равенство следует из инвариантности лебеговой меры dx; второе — из того, что подынтегральное выражение не зависит теперь от ω и s и $\int_0^t ds = t$, $\int d\mu_{0,\,0;\,t} = p(0,\ 0;\ t) = (4\pi t)^{-3/2}$; третье — из замены переменных $(t,\ x)$ на $(u,\ x)$, причем $u = tW(x)$.

Итак, результат для $n=3$ доказан. При $n>3$ рассуждение не проходит, так как $\int_0^\infty u^{-5/2}\varphi(u)\,du$ заменяется на $\int_0^\infty u^{-n/2-1}\times$ $\times\varphi(u)\,du$, который расходится при $u=0$. Чтобы преодолеть эту трудность, мы введем следующие изменения. Для каждого m рассмотрим функцию

$$H_m(y)=\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(1+yj)^{-1}.$$

Полезно заметить, что

$$H_m(y)=m!\,y^m/(1+y)(1+2y)\ldots(1+my);$$

это следует из того, что разность этих двух функций есть целая функция y, стремящаяся к нулю на бесконечности. Повторяя рассуждение, которое привело к (11), получим

$$N_E(V)\leqslant(m+1)\operatorname{Tr}\left(W\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(H_0+mW+\varkappa^2)^{-1}\right). \qquad (11')$$

При выводе (11′) мы заменили K на

$$K'=W^{1/2}\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(H_0+mW+\varkappa^2)^{-1}W^{1/2}=$$
$$=W^{1/2}(H_0+\varkappa^2)^{-1/2}H_m(W^{1/2}(H_0+\varkappa^2)^{-1}W^{1/2})(H_0+\varkappa^2)^{-1/2}W^{1/2},$$

который положителен вследствие положительности H_m. Далее, $K\psi=(\lambda^{-1}-(1+\lambda)^{-1})\psi$ заменяется на

$$K'\psi=\left(\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}(j+\lambda)^{-1}\right)\psi=\lambda^{-1}H_m(\lambda^{-1})\,\psi.$$

Так как

$$H_m(y)=\int_0^\infty e^{-t}(1-e^{-yt})^m\,dt,$$

то $H_m(y)$ монотонна по y. Следовательно, когда λ меняется от 0 до 1, $\lambda^{-1}H_m(\lambda^{-1})$ меняется от ∞ до $H(1)=m!/(m+1)!=$ $=1/(m+1)$, так что (11′) выполняется.

Переписав (11′) таким образом, как мы это сделали, чтобы получить (15), мы придем к неравенству

$$N(V)\leqslant(m+1)\int_0^\infty dt\int dx\int d\mu_{0,0;t}\,t^{-1}G_m\left(\int_0^t W(x+\omega(s))\,ds\right),$$

где $G_m(u)=u(1-e^{-u})^m$. Легко видеть, что G_m'' положительна на $(0,\,y_m)$ и отрицательна на $(y_m,\,\infty)$ при соответствующем выборе y_m, поэтому φ_m, заданная как

$$\varphi_m(u)=\begin{cases} G_m(u), & 0<u\leqslant y_m, \\ G_m(y_m)+(u-y_m)\,G'(y_m), & y_m\leqslant u<\infty, \end{cases}$$

удовлетворяет условиям

$$G_m(u)\leqslant\varphi_m(u),\qquad \varphi_m(u)\sim\begin{cases} u^{m+1} & \text{при}\quad u=0, \\ u & \text{при}\quad u=\infty, \end{cases}\qquad \varphi_m(u)\ \text{выпукла}.$$

Тогда находим, что для любых n, m

$$N(V)\leqslant C_{nm}\int W(x)^{m/2}\,d^nx,$$

где $C_{nm}=2(4\pi)^{-n/2}\int\limits_0^\infty u^{-n/2-1}\varphi_m(u)\,du$. До тех пор пока $m>(n/2)-1$, $C_{nm}<\infty$, так что, выбирая соответствующее m, мы убеждаемся в том, что теорема доказана для произвольных $n\geqslant 3$. ∎

Эта теорема может быть доказана также с помощью теоремы XI.22.

XIII.4. Местоположение существенного спектра I: теорема Вейля

В этом и в следующем разделах мы рассмотрим методы определения $\sigma_{\text{ess}}(A)$ для различных операторов A. Сначала мы докажем один общий результат теории возмущений, утверждающий, что $\sigma_{\text{ess}}(A+C)=\sigma_{\text{ess}}(A)$, если C компактен, или, более общо, если он «почти компактен» в смысле, который уточняется ниже. Это позволит нам найти σ_{ess} для двухчастичных операторов Шредингера с исключенным движением центра масс. В следующем разделе мы опишем специальный метод обращения с существенным спектром шредингеровых операторов N частиц.

Нас прежде всего интересует $\sigma_{\text{ess}}(A)$ в случае, когда A самосопряжен, однако в естественной для этих результатов постановке задачи рассматривается общий замкнутый оператор. В § XII.2 был определен $\sigma_{\text{disc}}(A)$, а также σ_{ess} как $\sigma_{\text{ess}}(A)=\sigma(A)\setminus\sigma_{\text{disc}}(A)$. Следует предупредить читателя, что в литературе встречаются и другие определения существенного спектра.

Естественный путь изучения $\sigma_{\text{ess}}(A)$ состоит в рассмотрении $(A-z)^{-1}$ с некоторым $z\notin\sigma(A)$. Для общего самосопряженного оператора надо брать z невещественным, так что мы приходим к необходимости рассматривать несамосопряженные операторы. Если интересоваться только полуограниченными самосопряженными операторами, то можно рассматривать только вещественные z и, таким образом, иметь дело лишь с самосопряженными операто-