Доказательство. Поскольку доказательство получается непосредственно из теоремы XIII.36, мы оставляем детали читателю (задачи 78, 79). Утверждения (а) и (с) вытекают из равенств $U(\varphi)H(\theta)U(\varphi)^{-1}=H(\theta+\varphi)$ и $H(\bar{\theta})=H(\theta)^*$, а включение $\sigma_{\text{ess}}(\theta)\subset\subset\{\mu+e^{-2\theta}\lambda\,|\,\mu\in\Sigma(\theta),\ \lambda\in[0,\infty)\}$ — из предложения 2. Включение $\{\mu+e^{-2\theta}\lambda\,|\,\mu\in\Sigma(\theta),\ \lambda\in[0,\infty)\}\subset\sigma_{\text{ess}}(\theta)$ нуждается в отдельном доказательстве (задача 78). (d1) для N-частичных систем следует из (d2) для $(N-1)$-частичных систем, а потому только (d2) нуждается в доказательстве. Оно проводится, как в теореме XIII.36, в два этапа. Сначала применяется теория возмущений дискретного спектра, чтобы показать, что $\sigma_d(\theta)$ локальио постоянно, что в свою очередь применяется для доказательства всех утверждений (d2), за исключением равенства $[\Sigma_{\min},\infty)\cap\sigma_d(\theta)=\sigma_{pp}(H)\diagdown(\Sigma(0)\cup(-\infty,\Sigma_{\min}))$. Это последнее доказывается аналитическим продолжением матричных элементов $(\psi,(H-z)^{-1}\psi)$ при $\psi\in N_\alpha$. Попутно это рассуждение доказывает (e). ∎

Следствие. Сингулярный спектр N-частичных квантовых гамильтонианов с отделенным движением центра масс и с парными потенциалами Кулона или Юкавы пуст.

Собственные значения $H(\theta)$ в $\sigma_d(\theta)\diagdown\sigma_d(0)$ называются **резонансными собственными значениями** оператора H. Мы уже указывали на их важность в § XII.6. Точки множества $\Sigma(\theta)\diagdown\Sigma$ называются **комплексными порогами** или **порогами резонансов.**

XIII.11. Свойства собственных функций

Не считая доказательства равенства $\sigma_{pp}=\sigma_{\text{disc}}$ (к которому мы вернемся в § 13), намеченное исследование спектров различных типов операторов Шредингера в неограниченном пространстве с парными потенциалами, стремящимися к нулю на бесконечности, завершено. Обратимся теперь к ряду проблем, которые непосредственно не входят в спектральный анализ, но близко к нему примыкают. В этом разделе мы рассмотрим свойства регулярности и убывания на бесконечности собственных функций. Существует тесная связь между двумя этими наборами свойств, поскольку, как мы уже видели (см. § IX.2, 3), гладкость функции ψ непосредственно связана со свойствами убывания ее фурье-образа $\hat{\psi}$. Ниже все теоремы формулируются через $\psi(x)$ — функции в x-пространстве, но в доказательствах часто будут встречаться $\hat{\psi}(p)$ — функции в p-пространстве. Сначала мы обсуждаем гладкость $\psi(x)$, затем убывание ψ в том смысле, что при некоторых обстоятельствах $\psi\in D(\exp(a|x|))$. Наконец, мы комбинируем эти два ряда идей для доказательства поточечных оценок $|\psi(x)|\leqslant\leqslant C\exp(-a|x|)$.

Для формулировки утверждений относительно гладкости введем пространство функций, **равномерно непрерывных по Гёльдеру**.

Определение. Пусть $0<\theta<1$. Тогда говорят, что $f\in C_\theta(\mathbb{R}^n)$, если функция $f\colon \mathbb{R}^n\to\mathbb{C}$ ограничена и удовлетворяет условию

$$|f(x)-f(y)|\leqslant C|x-y|^\theta$$

для некоторого фиксированного C и всех x, $y\in\mathbb{R}^n$. Положим

$$\|f\|_{(\theta)}\equiv\|f\|_\infty+\sup_{x\neq y}|x-y|^{-\theta}|f(x)-f(y)|.$$

Говорят, что $f\in C^1_\theta(\mathbb{R}^n)$, если f ограничена, принадлежит C^1 и $\partial f/\partial x_j\in C_\theta(\mathbb{R}^n)$ для каждого $j=1,\ \ldots,\ n$. Положим

$$\|f\|_{\theta,1}=\|f\|_\infty+\sum_{j=1}^n\|D_jf\|_{(\theta)}.$$

Связь между непрерывностью по Гёльдеру и свойствами фурье-образа демонстрирует следующая

Лемма 1. Пусть $(1+k^2)^{\beta/2}\hat f(k)\in L^1(\mathbb{R}^n)$. Тогда
(a) если $0<\beta<1$, то $f\in C_\beta$ и $\|f\|_{(\beta)}\leqslant c\|(1+k^2)^{\beta/2}\hat f(\cdot)\|_1$;
(b) если $1<\beta<2$, то $f\in C^1_{\beta-1}$ и $\|f\|_{\beta-1,1}\leqslant c_n\|(1+k^2)^{\beta/2}\hat f\|_1$.

Доказательство. (a) При каждом вещественном s имеем $|e^{is}-1|\leqslant 2$ и $|e^{is}-1|\leqslant\left|\int\limits_{0}^{s}e^{it}dt\right|\leqslant s$, так что $|e^{is}-1|\leqslant s^\beta 2^{1-\beta}$. Итак,

$$|e^{ik\cdot x}-e^{ik\cdot y}|=|e^{ik\cdot(x-y)}-1|\leqslant 2^{1-\beta}|k|^\beta|x-y|^\beta,$$

так что

$$\begin{aligned}|f(x)-f(y)|&\leqslant(2\pi)^{-n/2}\int|\hat f(k)||e^{ik\cdot x}-e^{ik\cdot y}|\,dk\leqslant\\&\leqslant\left[2^{1-\beta}(2\pi)^{-n/2}\int|\hat f(k)||k|^\beta dk\right]|x-y|^\beta\leqslant\\&\leqslant 2^{1-\beta}(2\pi)^{-n/2}\|(1+k^2)^{\beta/2}\hat f\|_1|x-y|^\beta.\end{aligned}$$

Поскольку $\|f\|_\infty\leqslant\|\hat f\|_1$, отсюда следует (a).

Доказательство (b) аналогично (a), и мы оставляем его читателю (задача 80). ∎

Теперь понятно, какого типа утверждений о гладкости можно ожидать, рассматривая $H=-\Delta+V$ на $\mathbb{R}^3$, когда $V\in L^2+L^\infty$. Тогда по теореме Като $D(H)=D(-\Delta)$. Но если $\psi\in D(-\Delta)$, то $(1+k^2)\hat\psi\in L^2$, так что для любого $\beta<1/2$ имеем $(1+k^2)^{\beta/2}\hat\psi\in L^1$, поскольку тогда $(1+k^2)^{-(1-\beta/2)}$ принадлежит $L^2(\mathbb{R}^3)$. Итак, приходим к выводу, что $D(H)\subset C_\theta$, если $\theta<1/2$. Естественно ожидать, что для N-частичных гамильтонианов с парным взаимодействием собственные функции имеют особенности не хуже тех, которые порождаются соответствующими парными потенциалами в двухчастичном случае. Для формулировки точного утверждения мы введем специальный класс потенциалов.

Определение. Пусть дано n, и предположим, что $\sigma \geqslant 1$ и $\sigma > n/2$. Говорят, что вещественнозначная измеримая функция V на $\mathbb{R}^n$ принадлежит классу $M_\sigma^{(n)}$, тогда и только тогда, когда $\hat{V} \in L^{\sigma'} + L^1$, где $\sigma' = (1-\sigma^{-1})^{-1}$ — индекс, дуальный к σ.

Пример 1. Пусть $V(r) = |r|^{-1}$ на $\mathbb{R}^3$ — потенциал Кулона. Тогда $\hat{V}(k) = c|k|^{-2} \in L^{\sigma'} + L^1$, если $\sigma' > 3/2$, так что $V \in M_\sigma^{(3)}$, если $\sigma < 3$. То же утверждение справедливо для потенциала Юкавы $V(r) = e^{-\mu|r|}/|r|$.

Предложение. (a) Если $\sigma \geqslant 2$ и $\sigma > n/2$ и если $V \in M_\sigma^{(n)}$, то V ограничен относительно $-\Delta$ с нулевой относительной гранью.

(b) Если $\sigma \geqslant 1$ и $\sigma > n/2$ и если $V \in M_\sigma^{(n)}$, то V ограничен относительно $-\Delta$ в смысле форм с нулевой относительной гранью.

Доказательство. (a) Согласно теореме Планшереля, нужно только доказать, что $\|(p^2+a)^{-1}\hat{V} * \psi\|_2 \leqslant C_a \|\psi\|_2$ для всех $\psi \in L^2$, где константа C_a не зависит от ψ и может быть выбрана произвольно малой за счет увеличения a. Все это следует из неравенств Юнга и Гёльдера. Так же доказывается (b). ∎

Следующая теорема описывает свойства регулярности собственных функций, поскольку любая собственная функция $\tilde{H}$ с очевидностью принадлежит $C^\infty(\tilde{H})$. Поскольку $C^\infty(\tilde{H})$ остается инвариантным под действием $e^{-it\tilde{H}}$, из нее также следуют свойства регулярности решений нестационарного уравнения Шредингера при достаточно регулярных начальных данных.

Теорема XIII.38 (теорема Като—Саймона). Пусть задан

$$\tilde{H} = -\sum_{i=1}^{N} (2\mu_i)^{-1} \Delta_i + \sum_{i<j} V_{ij}(r_i - r_j)$$

как оператор в $L^2(\mathbb{R}^{Nn})$, где точка в $\mathbb{R}^{Nn}$ записывается как $\langle r_1, \ldots, r_N \rangle$, $r_i \in \mathbb{R}^n$. Предположим, что $\sigma \geqslant 1$, $\sigma > n/2$ и каждый V_{ij} принадлежит $M_\sigma^{(n)}$. Тогда

(a) если $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$, то $\psi \in C_\theta$ для любого $\theta < \min\{1, 2-\sigma^{-1}n\}$;

(b) если $\sigma > n$ и $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$, то $\psi \in C_\theta^1$ для любого $\theta < 1 - \sigma^{-1}n$.

Более того, эти вложения непрерывны в том смысле, что для заданного θ существуют такие m и C, что $\|\psi\|_{(\theta)} \leqslant C[\|\tilde{H}^m\psi\| + \|\psi\|]$ для всех $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$. Идентичные результаты справедливы, если $\tilde{H}$

заменяется на H — оператор в $L^2(\mathbb{R}^{(N-1)n})$, получаемый отделением движения центра масс из $\tilde{H}$.

Доказательство. Мы рассматриваем лишь случай $\sigma \geqslant 2$, избегая тем самым обращения к технике квадратичных форм. Общий случай $\sigma \geqslant 1$ исследован в работах, цитированных в Замечаниях. Мы также оставляем читателю доказательство того, что вложения непрерывны (задача 82).

Пусть $H_0 = -\sum_{i=1}^{N} (2\mu_i)^{-1}\Delta_i$, и пусть $t_0(k)$ — функция $\sum_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}k_i^2$ на $\mathbb{R}^{Nn}$. Прежде всего утверждается, что

$$\|(t_0(k)+1)^{-\beta}\hat{V}_{ij} * \eta\|_p \leqslant C\|\eta\|_p \tag{66}$$

для любых $p \in [1, 2]$, $\eta \in L^p(\mathbb{R}^{Nn})$ и β, где $\beta > (2\sigma)^{-1}n$. В (66) константа C не зависит от η и p (она зависит только от V_{ij}, t_0 и β), а $\hat{V}_{ij}$ — фурье-образ по всем Nn переменным, так что

$$(\hat{V}_{ij} * \eta)(k_1, \ldots, k_N) =$$
$$= \int (2\pi)^{(Nn-n)/2} f(l)\, \eta(k_1, \ldots, k_i - l, \ldots, k_j + l, \ldots, k_N)\, d^n l,$$

где f — фурье-образ V_{ij} в $\mathbb{R}^n$. Для доказательства оценки (66) отметим, что, поскольку $p \leqslant 2$ и $\sigma \geqslant 2$, из неравенств Гёльдера и Юнга вытекает оценка

$$\|(k^2+1)^{-\beta} f * \varphi\|_p \leqslant C_2 \|\varphi\|_p, \tag{67}$$

если $\varphi \in L^p(\mathbb{R}^n)$, так как $\beta > (2\sigma)^{-1}n$ означает, что $(k^2+1)^{-\beta} \in L^\sigma$. Из (67) немедленно выводим, что

$$\|[(k_i - k_j)^2 + 1]^{-\beta}\hat{V}_{ij} * \eta\|_p \leqslant C_1\|\eta\|_p$$

для всех $\eta \in L^p(\mathbb{R}^{Nn})$; это доказывается возведением обеих частей (67) в p-ю степень и интегрированием по всем не затронутым в (67) переменным. Поскольку функция $[(k_i - k_j)^2 + 1]^\beta \times [t_0(k)+1]^{-\beta}$ ограничена, то (66) выполняется.

Предположим далее, что $p \in [1, 2]$, $\beta > (2\sigma)^{-1}n$, что $\psi \in D(\tilde{H})$, причем $\hat{\psi}$ и $\mathcal{F}(\tilde{H}\psi)$ лежат в L^p. Тогда утверждается, что $(t_0(k)+1)^{(1-\beta)}\hat{\psi} \in L^p$. Действительно, можно написать

$$\hat{\psi} = \mathcal{F}[(H_0 + I)^{-1}(\tilde{H} + I - V)\psi] =$$
$$= (t_0(k)+1)^{-1}(\mathcal{F}(\tilde{H}\psi) + \hat{\psi}) - (2\pi)^{-Nn/2}(t_0(k)+1)^{-1}\sum_{i<j}\hat{V}_{ij} * \hat{\varphi},$$

так что (66) показывает, что $(t_0(k)+1)^{(1-\beta)}\hat{\psi} \in L^p$.

Теперь можно завершить доказательство. Поскольку $\sigma > n/2$, выберем β так, чтобы выполнялось $(2\sigma)^{-1}n < \beta < 1$. Предположим, что $\psi \in C^\infty(\tilde{H})$. Тогда по предыдущему

$$(k^2+1)^{1-\beta}\mathcal{F}(\tilde{H}^m\psi)\in L^2$$

для всех m. Поскольку $(k^2+1)^{-(1-\beta)}\in L^r$ для всех $r\in(r_0, \infty)$ при некотором $r_0<\infty$, заключаем, что $\mathcal{F}(\tilde{H}^m\psi)\in L^q$, коль скоро $q^{-1}-r_0^{-1}<1/2$ и $q\geqslant 1$. Повторяя этот прием j раз, видим, что $\mathcal{F}(\tilde{H}^m\psi)\in L^q$, коль скоро $q^{-1}-jr_0^{-1}<1/2$. Выбирая подходящее j, заключаем, что $\mathcal{F}(\tilde{H}\psi)$ и $\hat{\psi}$ лежат в L^1. Еще раз прибегая к утверждению из предыдущего абзаца, видим, что $(k^2+1)^{1-\beta}\hat{\psi}\in L^1$, если только $\beta>(2\sigma)^{-1}n$ и $\psi\in C^\infty(\tilde{H})$. Лемма 1 завершает доказательство. ▌

Следствие. Пусть H — гамильтониан атома. Тогда любая $\psi\in C^\infty(H)$ есть C^∞-функция на $\mathbb{R}^{3N-3}\setminus\{\langle r_1, \ldots, r_{N-1}\rangle \mid$ какие-либо $r_i=0$ или какие-либо $r_i=r_j\}$ и равномерно непрерывна по Гёльдеру порядка θ для любого $\theta<1$ на всем $\mathbb{R}^{3N-3}$.

Доказательство. Первое утверждение получается с помощью методов теоремы об эллиптической регулярности (задача 83); второе — из теоремы XIII.38. ▌

* * *

Вторая проблема, рассматриваемая в этом разделе,— экспоненциальное убывание собственных функций дискретного спектра. Сначала мы приводим утверждения для пространств L^2 в различных формах, а затем — поточечные оценки. Начнем с результата в L^2, который легко доказывается, а потом приведем более сильное утверждение для L^2, которое потребует некоторых предварительных сведений из кинематики.

Теорема XIII.39. Пусть $\tilde{H}=-\sum_{i=1}^{N}(2\mu_i)^{-1}\Delta_i+\sum_{i<j}V_{ij}(r_i-r_j)$ в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, и пусть H — оператор в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, полученный из $\tilde{H}$ отделением движения центра масс. Предположим, что каждое V_{ij} — ограниченное в смысле форм возмущение оператора $-\Delta$ на $\mathbb{R}^3$ с нулевой относительной гранью. Пусть $E\in\sigma_{\text{disc}}(H)$, и пусть $H\psi=E\psi$. Тогда $\psi\in D(e^{ar})$ для некоторого $a>0$, где $r=\left(\sum_{j=1}^{3N-3}x_j^2\right)^{1/2}$ в некоторой системе координат на $\mathbb{R}^{3N-3}$.

Доказательство. Поскольку

$$e^{ar}\leqslant\exp\left(a\sqrt{3N-3}\max|x_j|\right)\leqslant\sum_{j=1}^{3N-3}\exp\left(a|x_j|\sqrt{3N-3}\right),$$

нужно только показать, что ψ — аналитический вектор для каждого оператора координаты x_j. Гамильтониан H можно представить в виде H_0+V, причем $H_0=t(p)$, где $t(v)=\sum_{i<j} a_{ij}v_iv_j$, а p есть набор $3N-3$ операторов $p_j=-i\partial/\partial x_j$, и матрица $\{a_{ij}\}$ положительно определена.

Идея состоит в применении метода аналитического продолжения с помощью масштабных преобразований, как в § 10, но с другой группой. Фиксируем j, и пусть $W(\alpha)=e^{i\alpha x_j}$. Тогда

$$H_0(\alpha)\equiv W(\alpha)H_0W(\alpha)^{-1}=t(p_1, \ldots, p_j-\alpha, \ldots, p_{3N-3})$$

и

$$V(\alpha)\equiv W(\alpha)VW(\alpha)^{-1}=V.$$

Как $H_0(\alpha)$, так и $V(\alpha)$ обладают аналитическими продолжениями на всю комплексную плоскость α. Более того, легко видеть, что для каждого фиксированного α: $^1/_2H_0\leqslant \operatorname{Re}H_0(\alpha)+c_\alpha$, где c_α — зависящая от α константа. Отсюда следует, что $H(\alpha)\equiv\equiv H_0(\alpha)+V(\alpha)$ — целое аналитическое семейство типа (B).

Тем самым применима теория, развитая в § XII.2, так что существует константа a и функции $f_1, \ldots, f_k$ на множестве $\{\alpha\mid|\alpha|<a\}$ с не хуже чем алгебраическими особенностями при $\alpha=0$ и такие, что ветви $f_1(\alpha), \ldots, f_k(\alpha)$ дают все собственные значения $H(\alpha)$ вблизи E. Более того, существует такая проекторнозначная аналитическая функция $P(\alpha)$ на $\{\alpha\mid|\alpha|<a\}$, что $\operatorname{Ran}P(\alpha)$ есть множество собственных векторов $H(\alpha)$ с собственными значениями $f_1(\alpha), \ldots, f_k(\alpha)$. Далее, при α вещественных $H(\alpha)=W(\alpha)HW(\alpha)^{-1}$, так что $f_1(a)=\ldots=f_k(\alpha)=E$ и $W(\alpha)P(0)W(\alpha)^{-1}=P(\alpha)$ для таких α. По аналитичности f_i всегда равны E и

$$W(\alpha_0)P(\alpha)W(\alpha_0)^{-1}=P(\alpha+\alpha_0),$$

если α_0 вещественно и $|\alpha|<a$, $|\alpha+\alpha_0|<a$. То, что ψ — аналитический вектор для x_j, следует теперь из приводимого ниже предложения. ▌

Предложение (лемма О'Коннора). Пусть $W(\alpha)=e^{i\alpha A}$ — однопараметрическая унитарная группа, и пусть D — связная область в $\mathbb{C}$, причем $0\in D$. Предположим, что проекторнозначная аналитическая функция $P(\alpha)$ задана на D, причем множество $\operatorname{Ran}P(0)$ конечномерно, так что

$$W(\alpha_0)P(\alpha)W(\alpha_0)^{-1}=P(\alpha+\alpha_0)$$

для всех пар $\langle\alpha, \alpha_0\rangle$ с вещественными α_0 и таким α, что $\alpha+\alpha_0\in D$. Пусть $\psi\in\operatorname{Ran}P(0)$. Тогда функция $\psi(\alpha)\equiv W(\alpha)\psi$ обладает аналитическим продолжением с $D\cap\mathbb{R}$ на D. В частности, ψ — аналитический вектор для A.

Доказательство. Пусть $\mathcal{A}_D$ — множество векторов φ, для которых $\varphi(\alpha) \equiv W(\alpha)\varphi$ обладает аналитическим продолжением с $D \cap \mathbb{R}$ на D. Тогда $\mathcal{A}_D$ плотно в соответствующем гильбертовом пространстве (см. § X.6), так что $P(0)[\mathcal{A}_D]$ плотно в $\operatorname{Ran} P(0)$. Поскольку $\operatorname{Ran} P(0)$ конечномерно, $P(0)[\mathcal{A}_D] = \operatorname{Ran} P(0)$. Итак, следует доказать лишь, что $P(0)[\mathcal{A}_D] \subset \mathcal{A}_D$. Пусть $\varphi \in \mathcal{A}_D$, и пусть $\eta(\alpha) = P(\alpha)\varphi(\alpha)$ при $\alpha \in D$. Очевидно, $\eta(\alpha)$ аналитичен и для $\alpha \in D \cap \mathbb{R}$

$$\eta(\alpha) = P(\alpha) W(\alpha)\varphi = W(\alpha)(P(0)\varphi),$$

так что $P(0)\varphi \in \mathcal{A}_D$. ∎

Чтобы получить более точные результаты о том, сколь велика константа a в утверждении $\psi \in D(e^{ar})$, необходимо ввести некоторые кинематические понятия, связанные с физическим смыслом r.

Определение. Для частиц с массами $\mu_1, \ldots, \mu_N$, расположенных в точках $\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N$, определим **полную массу** $M = \sum \mu_i$, **центр масс** $\mathbf{R} = M^{-1} \sum_{i=1}^{N} \mu_i \mathbf{r}_i$ и **радиус инерции** $r = [M^{-1} \times \times \sum \mu_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{R})^2]^{1/2}$.

Определение. Для заданного N-частичного свободного квантового гамильтониана $\tilde{H}_0$ в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ система координат $\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}$, ортогональных к $\mathbf{R}$, называется **системой нормальных координат** тогда и только тогда, когда

$$\tilde{H}_0 = -(2M)^{-1}\left[\Delta_{\mathbf{R}} + \sum_{i=1}^{N-1} \Delta_{\zeta_i}\right].$$

Чтобы убедиться в существовании нормальных координат, перейдем сначала в систему якобиевых координат $\xi_1, \ldots, \xi_{n-1}$, так что

$$\tilde{H}_0 = -(2M)^{-1}\Delta_{\mathbf{R}} + \sum_j (-2M_j)^{-1} \Delta_{\xi_j},$$

и положим $\zeta_j = (M_j/M)^{1/2}\xi_j$.

Предложение. (a) Радиус инерции r есть функция координат, ортогональных $\mathbf{R}$.

(b) Если $\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}$ — система нормальных координат, то

$$r = \left(\sum_{i=1}^{N-1} |\zeta_i|^2\right)^{1/2}.$$

Доказательство. Заметим сначала, что $Mr^2 + MR^2 = \sum_{i=1}^{N} \mu_i r_i^2$. Пусть

$\eta_i = (\mu_i/M)^{1/2} r_i$, так что

$$\tilde{H}_0 = -(2M)^{-1} \sum_{i=1}^{N} \Delta_{\eta_i}, \tag{68a}$$

$$Mr^2 + MR^2 = M \sum_{i=1}^{N} \eta_i^2. \tag{68b}$$

В силу (68a), преобразование координат от $\langle \eta_1, \ldots, \eta_N \rangle$ к $\langle \mathbf{R}, \zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1} \rangle$ ортогонально, если $\langle \zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1} \rangle$ — система нормальных координат, а тогда, в силу (68b),

$$r^2 + R^2 = R^2 + \sum_{i=1}^{N-1} \zeta_i^2. \quad \blacksquare$$

Теорема XIII.40 (теорема О'Коннора — Комба — Томаса). Пусть $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \sum_{i<j} V_{ij}(r_i - r_j)$ есть N-частичный гамильтониан в $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, где каждое $V_{ij} \in R + (L^\infty)_\varepsilon$. Пусть H — оператор в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, полученный из $\tilde{H}$ отделением движения центра масс. Пусть $\Sigma = \inf \sigma_{\mathrm{ess}}(H)$, и пусть ψ — собственная функция H с собственным значением $E < \Sigma$. Тогда $\psi \in D(e^{ar})$, где r — радиус инерции, во всех случаях, когда $a^2 < 2M(\Sigma - E)$.

Доказательство. Мы даем лишь набросок доказательства, а детали оставляем читателю. Пусть $\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}$ — система нормальных координат; введем $W(\alpha) = \exp(i(\alpha_1 \cdot \zeta_1 + \ldots + \alpha_{N-1} \cdot \zeta_{N-1}))$ для $\alpha = \langle \alpha_1, \ldots, \alpha_{N-1} \rangle \in \mathbb{C}^{3N-3}$. Пусть мы можем доказать, что $\psi \in D(W(\alpha))$, если $|\alpha| \equiv (|\alpha_1|^2 + \ldots + |\alpha_{N-1}|^2)^{1/2} < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$. Тогда простое геометрическое построение (задача 86a) показывает, что $\varphi \in D(e^{ar})$, если $a < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$.

Итак, достаточно доказать, что функция $W(\alpha)\psi$, заданная при $\alpha \in \mathbb{R}^{3N-3}$, имеет продолжение в область $\{\alpha \mid |\operatorname{Im} \alpha|^2 < 2M(\Sigma - E)\}$. Положим

$$H_0(\alpha) = -(2M)^{-1} \sum_{i=1}^{N-1} (\nabla_{\zeta_i} - i\alpha_i)^2$$

и $H(\alpha) = H_0(\alpha) + V$ Тогда анализ, аналогичный проведенному в § 10 (задача 86b), показывает, что

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(H(\alpha)) = \bigcup_D \{\lambda + \mu \mid \lambda \in \Sigma_D(\alpha),\ \mu \in K_D\},$$

где $\Sigma_D(\alpha)$ — пороги, ассоциированные с кластерным разложением D, а $K_D = \{t_D(p - \alpha) \mid p \in \mathbb{R}^{3N-3}\}$, где t_D — кинетическая энергия взаимного движения кластеров в D. По индукции легко показать (задача 86c), что

$$\sigma_{ess}(H(\alpha)) \subset \{\lambda \mid \operatorname{Re}\lambda \geqslant \Sigma - (2M)^{-1}(\operatorname{Im}\alpha)^2\}.$$

Итак, если $(\operatorname{Im}\alpha)^2 < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$, то E отделено от $\sigma_{ess}(H(\alpha))$. Следуя аргументации § 10, видим, что T — собственное значение $H(\alpha)$ при всех таких α. Доказательство завершается (задача 86d) повторением доказательства теоремы XIII.39 и применением леммы О'Коннора. ∎

Если потенциалы аналитичны относительно масштабиых преобразований, то можно доказать также и экспоненциальное убывание собственных функций, отвечающих собственным значениям в непрерывном спектре. Этот результат найдет свои применения в § 13.

Теорема XIII.41. Пусть $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \sum_{i<j} V_{ij}$, где каждый оператор умножения V_{ij} — потенциал, аналитический относительно масштабных преобразований, из некоторого $\mathcal{F}_\beta$. Пусть E — непороговое собственное значение H с собственной функцией ψ. Тогда

(a) $\psi \in D(e^{ar})$ для некоторого $a > 0$;

(b) если $U(\theta)$ — семейство операторов растяжения и $\beta_0 = \min\{\beta, \pi/2\}$, то $U(\theta)\psi \equiv \psi(\theta)$ обладает продолжением в полосу $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$ и для каждого θ в этой полосе $\psi(\theta) \in D(e^{ar})$ при некотором $a > 0$;

(c) если E больше наибольшего порога, то β_0 в (b) можно выбрать равным $\min\{\beta, \pi\}$;

(d) если каждое V_{ij} обладает тем свойством, что $V_{ij}(\theta)$ допускает продолжение в полосу $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| \leqslant \beta\}$, аналитическое внутри нее и непрерывное на всей полосе, и если $\beta < \pi/2$ (или, когда E больше наибольшего порога, если $\beta < \pi$), то $\psi(\theta)$ допускает продолжение в ту же полосу, аналитическое внутри нее и непрерывное на всей полосе, причем $\psi(\theta) \in D(e^{ar})$ для некоторого $a > 0$.

Доказательство. В соответствии с исследованием в § 10 E — собственное значение $H(\theta)$ для всех θ в полосе $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$ или, в случае (d), в $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| \leqslant \beta_0\}$. Пусть $P(\theta)$ — соответствующий проектор, определенный как спектральный проектор, если θ вещественно, и по методу § XII.2, если $\operatorname{Im}\theta \neq 0$. Очевидно, $P(\theta)$ аналитичен в областях $\{\theta \mid 0 < |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$, и, в силу аргументации из § 10, непрерывен в $\{\theta \mid 0 \leqslant |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$. Далее, $P(\theta)$ самосопряжен, если θ вещественно. По принципу симметрии Шварца $P(\theta)$ аналитичен во всей полосе $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < \beta_0\}$. Свойство аналитичности $\psi(\theta)$ следует теперь из леммы О'Коннора.

Если $\operatorname{Im}\theta \neq 0$, то E — дискретиое собствеииое зиачеиие, поэтому можио доказать, что $\psi(\theta) \in D(e^{ar})$ для иекоторого $a > 0$, следуя методу доказательства теоремы XIII.39. Предположим, что $\psi(\theta_0) \in D(\exp(a_0 e^{\theta_0} r))$, где $|\operatorname{Im}\theta_0| < \pi/4$. Покажем, что $\psi \in D(e^{a_0 r})$. Пусть дано $\varepsilon > 0$, пусть $\eta \in L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$, и введем

$$F(\theta) = (\eta, \exp(-\varepsilon r^2 e^{2\theta}) \exp(a_0 e^{\theta} r)\, \psi(\theta)).$$

Очевидно, функция $F(\theta)$ аиалитичиа в полосе $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta| < |\operatorname{Im}\theta_0| + \delta\}$ при подходящем δ. Более того, $F(\theta)$ равиомерно ограиичеиа иа этой полосе, а для $\operatorname{Im}\theta = \pm|\operatorname{Im}\theta_0|$ имеем $|F(\theta)| \leqslant \|\eta\| \|\exp(a_0 e^{\theta_0} r)\, \psi(\theta_0)\|$. По прииципу максимума это последиее иеравенство выполняется для всех θ, в частности

$$|(\eta, e^{-\varepsilon r^2} e^{a_0 r} \psi)| \leqslant C\|\eta\|$$

для всех η и ε. Отсюда следует, что $\psi \in D \exp(a_0 r))$. ∎

Подобио теореме XIII.39, теорема XIII.41 справедлива и в более сильиой форме, содержащей оценку величииы a_0 (см. Замечаиия).

В заключение обратимся к доказательству поточечных экспоненциальных оценок.

Теорема XIII.42. Пусть H есть N-частичный гамильтониан в $L^2(\mathbb{R}^{3N-3})$ с потенциалами из $M_\sigma^{(3)}$ для некоторого $\sigma > 3/2$. Предположим, что $\psi \in C^\infty(H)$ и $H^n\psi \in D(e^{ar})$ для некоторого a и всех n, где r — радиус инерции. Тогда для каждого ε существует коистанта C_ε, такая, что при всех ζ

$$|\psi(\zeta)| \leqslant C_\varepsilon e^{-(a-\varepsilon) r}.$$

В частиости, если выполияются условия теоремы XIII.40 и, кроме того, каждое $V_{ij} \in M_\sigma^{(3)}$, то

$$|\psi(\zeta)| \leqslant C_\alpha e^{-ar}$$

для любого $a < \sqrt{2M(\Sigma - E)}$.

Доказательство. Мы воспользуемся теорией преобразования Фурье, особенно идеями, лежащими в основе теоремы Пэли — Винера. Перейдем к нормальным координатам, так что $r = \left(\sum_{i=1}^{N-1} |\zeta_i|^2\right)^{1/2}$. Если $\varphi \in D(e^{ar})$, то для любого $k \in \mathbb{C}^{3N-3}$ с $|\operatorname{Im} k| < a$ функция $\varphi_k \equiv e^{-ik\cdot\zeta}\varphi(\zeta)$ лежит в $L^1(\mathbb{R}^{3N-3})$, поскольку $\exp(-br) \in L^2$ для любого $b > 0$. Более того, отображение $k \mapsto \varphi_k$ аналитично по k как L^1-значная функция. Итак, функция

$$\hat{\varphi}(k) = (2\pi)^{-(3N-3)/2} \int \varphi_k(\zeta)\, d\zeta$$

аналитична в трубе $\{k \mid |\operatorname{Im} k| < a\}$. По теореме Планшереля для любого $b < a$ существует константа C_b, такая, что

$$\int\limits_{k \in \mathbb{R}^{3N-3}} |\hat{\varphi}(k+i\varkappa)|^2 d^{3N-3}k < C_b, \tag{69}$$

если $|\varkappa| \leqslant b$. Далее мы следуем доказательству теоремы XIII.38. Выполнив аналитическое продолжение, видим, что $\hat{\varphi}(k)$ удовлетворяет уравнению

$$(2M)^{-1}k^2\hat{\varphi}(k)+(2\pi)^{-(3N-3)/2}\int \hat{V}(l)\,\hat{\varphi}(k-l)\,d^{3N-3}l=\widehat{H\varphi}(k)$$

для всех k с $|\operatorname{Im} k| < a$, как только φ и $H\varphi$ лежат в $D(e^{ar})$. Следуя доказательству теоремы XIII.38 и пользуясь неравенством (69), можно показать (задача 88), что для любого $b < a$ существует константа D_b, такая, что

$$\int |\hat{\psi}(k+i\varkappa)|\, d^{3N-3}\varkappa < D_b, \tag{70}$$

если $|\varkappa| \leqslant b$ и $\psi, H\psi, \ldots, H^m\psi \in D(\exp(ar))$ для подходящего m. Поскольку $\hat{\psi}(\cdot+i\varkappa)$ — преобразование Фурье от $e^{\varkappa\cdot\zeta}\psi(\zeta)$, оценка (70) влечет за собой неравенство

$$|e^{\varkappa\cdot\zeta}\psi(\zeta)| \leqslant D_b(2\pi)^{-(3N-3)/2},$$

если $|\varkappa| \leqslant b$. Взяв точную верхнюю грань по таким $\varkappa$, видим, что

$$|e^{br}\psi(\zeta)| \leqslant D_b\,(2\pi)^{-(3N-3)/2}. \ \blacksquare$$

Следствие. Пусть H — гамильтониан атома. Тогда любая собственная функция ψ, отвечающая точке дискретного спектра, удовлетворяет оценке вида

$$|\psi(\zeta)| \leqslant C_a e^{-ar}$$

для некоторого положительного a.

XIII.12. Невырожденность основного состояния

Основной результат этого раздела относится к самосопряженному оператору H, который ограничен снизу и имеет собственное значение в качестве низшей точки своего спектра. Мы покажем, что при определенных условиях собственное пространство, отвечающее этому собственному значению, одномерно и что соответствующий собственный вектор есть строго положительная функция при некоторой специальной реализации рассматриваемого гильбертова пространства L^2. Это собственное значение называется **энергией основного состояния**, а собственный вектор —