Лемма. Пусть G_m — последовательность положительно определенных функций, причем $G_m(0)=1$. Предположим, что, когда $m\to\infty$, $G_m(x)\to 1$ для x в некоторой окрестности нуля. Тогда $G_m(x)\to 1$ для всех x.

Доказательство. По предположению, существуют меры μ_m на $\mathbb{R}^n$, такие, что

$$G_m(x)=\int e^{ixy}\,d\mu_m(y).$$

По предположению же, каждая μ_m имеет единичную массу. Более того, элементарное применение теоремы Фубини показывает, что

$$(2a)^{-n}\int\limits_{|x_i|\leqslant a}[1-G_m(x)]\,dx=\int\left(1-\prod_{i=1}^{n}\frac{\sin ay_i}{ay_i}\right)d\mu_m(y)\geqslant$$

$$\geqslant C\mu_m\{y\,|\,y_i\geqslant a^{-1}\ \text{для некоторого}\ i\},$$

где $C=\min\limits_{y\geqslant 1}(1-y^{-1}\sin y)>0$. Итак, по предположениям о G_m, для некоторого a имеем $\mu_m\{y|\,y_i\geqslant a^{-1}$ для некоторого $i\}\to 0$ при $m\to\infty$. Будем рассматривать μ_m как меры на $\dot{\mathbb{R}}^n$, одноточечной компактификации $\mathbb{R}^n$. Пусть μ_∞ — произвольная слабая предельная точка последовательности μ_m. Такие предельные точки существуют, ибо пространство $\mathcal{M}_{+,1}(\dot{\mathbb{R}}^n)$ компактно. Поскольку $\mu_m\{y\,|\,|y|\geqslant a^{-1}\}\to 0$ при $m\to\infty$ для некоторого a, можно заключить, что μ_∞ — мера на $\mathbb{R}^n$, т. е. $\mu_\infty(\{\infty\})=0$, и что $\int f(y)\,d\mu_{m(i)}\to\int f(y)\,d\mu_\infty$ для *любой* непрерывной ограниченной функции на $\mathbb{R}^n$, а не только для тех, которые на бесконечности стремятся к константе. В частности, $\int e^{ixy}\,d\mu_\infty(y)=1$ для малых $|x|$. Пусть Q — семейство точек в этом множестве малых x, все координаты которых рациональны. Легко видеть, что $\bigcap\limits_{x\in Q}\{y\,|\,e^{ixy}=1\}=\{0\}$, поэтому мы заключаем, что $\mu_\infty=\delta_0$, точечной массе в нуле. Поскольку каждая предельная точка последовательности μ_m есть δ_0, $\mu_m\to\delta_0$ слабо, и, так же как выше, $\int f(y)\,d\mu_m(y)\to f(0)$ для любой ограниченной непрерывной f. В частности, $G_m(x)\to 1$ для всех x. ∎

XIII.13. Отсутствие положительных собственных значений

До сих пор мы избегали обсуждения вопроса о том, могут ли шредингеровы операторы обладать собственными значениями, погруженными в непрерывный спектр. Этот вопрос оказывается очень сложным, а существующие результаты обычно требуют предположений более детальных, чем для любой другой спектральной задачи. Более того, исследование этой проблемы представляется особенно бесперспективным, поскольку имеются весомые физические причины (мы обсудим их ниже) ожидать, что таких собственных значений быть не должно. Приведем пример интуитивных соображений в простом случае. Рассмотрим потенциал $V(x)$, стремящийся к нулю при $|x| \to \infty$. На классическом уровне единственный способ удержать частицу с положительной энергией от ухода в бесконечность — это возвести барьер, т. е. «привязать» ее с помощью закона сохранения энергии. Но в квантовой механике существуют подбарьерные переходы, так что можно было бы думать, что связанные состояния с положительной энергией невозможны. Однако все это не так просто!

Пример 1 (потенциал Вигнера — фон Неймана). Чтобы найти потенциал V, для которого существует квадратично интегрируемая функция ψ, удовлетворяющая уравнению $(-\Delta+V)\psi=\psi$, попытаемся подобрать ψ. Если функция u сферически симметрична и $u(r)=r\psi(r)$, то $-u''+Vu=u$, или $V=1+u''u^{-1}$. Чтобы V стремился к нулю на бесконечности, произведение $u''u^{-1}$ должно стремиться к -1, что наводит на мысль испробовать подстановку $u(r)=(\sin r)w(r)$. Тогда

$$V(r)=w''(r)w(r)^{-1}+2(\operatorname{ctg} r)w'(r)w(r)^{-1}.$$

Чтобы V не имел особенностей, нужно, чтобы w' обращалась в нуль там же, где и $\sin r$. Итак, функция w должна вести себя примерно как

$$g(r)=2r-\sin 2r=4\int_0^r \sin^2 x\,dx. \tag{85}$$

Конечно, если взять $w=g$, то u не будет квадратично интегрируемой. Но если положить $w=(1+g(r)^2)^{-1}$, то u будет квадратично интегрируема, а $w'=-2g'g(1+g^2)^{-2}$ будет иметь нули в правильных точках. Останавливаясь на этом выборе w и вычисляя V, найдем

$$V(r)=[1+g(r)^2]^{-2}(-32\sin r)[g(r)^3\cos r-$$
$$-3g(r)^2\sin^3 r+g(r)\cos r+\sin^3 r],$$

где $g(r)$ задается формулой (85). Этот довольно сложный потенциал V обладает тем свойством, что оператор $-\Delta+V$ имеет собственное значение в точке $+1$ с собственным вектором

$$\psi(r)=(r^{-1}\sin r)(1+g(r)^2)^{-1},$$

даже несмотря на то, что V ограничен и стремится к нулю на бесконечности, так что $[0,\infty)\subset\sigma(-\Delta+V)$ по теореме Вейля о существенном спектре. Заметим, что V обладает асимптотическим поведением

$$V(r) = -8(\sin 2r)/r + O(r^{-2}).$$

Это означает, что V осциллирует и медленно убывает на ∞. Мы увидим, что оба эти качества являются решающими для существования положительных собственных значений. Более подробное рассмотрение примеров такого рода можно найти во втором и третьем дополнениях к § XI.8.

Физику, который уверовал в предсказание, что положительных собственных значений быть не может, столкнувшись с примером 1, не избежать ответа на вопрос: почему же ошибочна интуиция? Решающее свойство V — это его осцилляции. Как и в примере 1 в дополнении к § X.1, мы воспользовались тем, что квантовомеханические частицы отражаются от выпуклостей потенциала. Потенциал V устроен таким образом, что для этой специальной картины колебаний потенциала отражения происходят когерентно. Эта интерпретация наводит на мысль, что появление собственных значений в положительном спектре — вещь очень необычная, зависящая от детальных свойств «когерентности», присущих потенциалу. Она показывает также, что было бы трудно сформулировать простые общие условия, исключающие возможность появления таких связанных состояний.

Пример 2. Пусть $V(x) = ||x|-1|^{-1}$ на $\mathbb{R}^3$. Функция V не лежит даже в $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$, но область $Q(V) \cap Q(-\Delta)$ плотна, так что оператор $-\Delta + V$ можно определить как сумму квадратичных форм. Этот оператор имеет собственные значения с положительной энергией по следующей простой причине. Любой вектор $\psi \in Q(V) \cap Q(-\Delta)$ обращается в нуль на сфере единичного радиуса, а потому оператор $-\Delta + V$ оставляет инвариантным множество $\mathcal{H}_1 = L^2(\{x \mid |x| \leqslant 1\})$. Таким образом, $\mathcal{H}$ разлагается в прямую сумму $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$, и потому $H = H_1 \oplus H_2$, где H_1 имеет чисто дискретный спектр. Доказательство этих утверждений мы оставляем читателю (задача 104).

Этот пример довольно искусствен, но он показывает, что вопрос о положительных собственных значениях связан с вопросом о том, может ли оператор $-\Delta + V$ иметь собственные векторы с компактными носителями. Мы вернемся к этому аспекту проблемы ниже, а также в дополнении.

Пример 3. Пусть V — сферический потенциальный ящик в $\mathbb{R}^3$, т. е. $V(x) = -c$, если $|x| \leqslant 1$, и $V(x) = 0$, если $|x| > 1$. Мы ищем решения уравнения $(-\Delta + V)\psi = 0$. Если $\psi(x) = |x|^{-1} u(|x|) \times Y_{lm}(\hat{x})$, где $\hat{x}$ — единичный вектор в направлении x, а Y_{lm} —

сферическая функция, то u удовлетворяет уравнению

$$-u''+l(l+1)r^{-2}u+V(r)u=0. \tag{86}$$

Решения (86) в области $r>1$, где $V=0$, суть r^{-l} и r^{l+1}. Если решение (86), которое регулярно при $r=0$, в точности равно r^{-l} в области $r>1$ (а этого можно добиться подбором c) и $l\geqslant 1$, уравнение $(-\Delta+V)\psi=0$ имеет квадратично интегрируемые решения.

Этот пример демонстрирует, что собственные значения с нулевой энергией и, в общем случае, пороговые собственные значения для n-частичных систем — это совершенно естественное явление, и нельзя рассчитывать, что его удастся исключить.

Пример 4. Рассмотрим гамильтониан атома гелия:

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

который мы подробно обсуждали в § XII.6. При $\beta=0$ мы обнаружили высокую кратность собственных значений в непрерывном спектре. Это происходило потому, что состояния с энергией, при которой возможен распад, не могут реально распасться, поскольку этот процесс должен включать в себя передачу энергии от одной частицы к другой, а это невозможно при $\beta=0$, так как две частицы при этом не взаимодействуют друг с другом. Даже при $\beta\neq 0$ остаются собственные значения, погруженные в непрерывный спектр, что связано с наличием симметрии, а именно «естественностью» четности. Отметим, что все эти погруженные собственные значения проявляются при отрицательных энергиях.

Урок, который можно извлечь из этого примера, таков: должно быть, доказать, что n-частичные операторы Шредингера не имеют погруженных собственных значений при отрицательных энергиях, чрезвычайно трудно. В предыдущих случаях имелись простые причины существования «погруженных» собственных значений. Но как убедиться для заданной n-частичной системы в отсутствии «скрытых» симметрий, которые могут породить такие собственные значения?

На этих примерах становится понятно, почему рассматриваемая проблема столь сложна. Интуитивно ясно, что положительные собственные значения энергии не встречаются в «разумных» ситуациях, но не менее ясно, что такие собственные значения могут возникнуть благодаря «неразумным» тонкостям. Мы представим четыре довольно разных подхода к этой проблеме. Первый относится к двухчастичному центрально-симметричному потенциалу. Здесь уравнение Шредингера формально может быть сведено к обыкновенному дифференциальному уравнению, поэтому сравнительно легко провести полное исследование. Мы не будем приводить наиболее сильных результатов, включающих случаи с локальными особенностями.

Теорема XIII.56. Пусть V — сферически-симметричная функция на $\mathbb{R}^n$, причем

$$\int_a^\infty |V(r)|\,dr < \infty \tag{87}$$

для некоторого $a > 0$. Предположим, что $V \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n \setminus 0)$, и пусть H — произвольное самосопряженное расширение оператора $-\Delta + V$ с $C_0^\infty(\mathbb{R}^n \setminus 0)$, коммутирующее с поворотами. Тогда H не имеет строго положительных собственных значений.

Доказательство. Предположим, что $(-\Delta + V)\psi = E\psi$. Разложим ψ по парциальным волнам (сферическим гармоникам). Тогда некоторые компоненты этого разложения отличны от нуля, так что нас интересует обобщенное решение уравнения

$$-u'' + cr^{-2}u + Vu = Eu \tag{88}$$

на $(0, \infty)$, которое квадратично интегрируемо. Здесь c — константа, зависящая от номера парциальной волны. Как и в § XI.8, поскольку $E > 0$, можно найти два независимых решения Йоста интегрального уравнения, соответствующего (88), так как справедливо условие (87). Нетрудно показать (задача 105), что любое решение уравнения (88) должно быть линейной комбинацией этих двух решений Йоста. Поскольку ни одна из таких линейных комбинаций не является квадратично интегрируемой на бесконечности, u должно быть тождественным нулем. ∎

Хотя потенциал из примера 1 не удовлетворяет условию (87), он в точности принадлежит к тому типу, который рассмотрен в дополнении к § XI.8, где мы построили решения Йоста для потенциалов вида

$$V(x) = \sum_{i=1}^N c_i r^{-1} \sin(\alpha_i r) + O(r^{-1-\varepsilon})$$

для любого $E = k^2 \neq 0, \alpha_1^2/4, \ldots, \alpha_N^2/4$. Таким образом, из предыдущих рассуждений видно, что потенциал Вигнера — фон Неймана может иметь положительное собственное значение только при энергии E, равной единице, т. е. при энергии, при которой он действительно имеет связанное состояние рассмотренного типа.

Наш следующий результат позволит включить в рассмотрение потенциалы, которые не обладают сферической симметрией. Важной частью метода является теорема об однозначном продолжении решения уравнения Шредингера. Чтобы понять, как применяется это утверждение, предположим, что $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, причем $\operatorname{supp} V \subset \{x \mid |x| < R\}$. Если $(-\Delta+V)u=Eu$, то u удовлетворяет уравнению $-\Delta u=Eu$ на $\{x \mid |x|>R\}=\Omega$. Как и выше, можно разложить u по сферическим гармоникам на Ω и получить, что $u=0$ на Ω. Чтобы заключить, что решение u тождественно равно нулю, нам необходима

Теорема XIII.57. Пусть V — функция на $\mathbb{R}^n$, такая, что

(i) операция умножения на V — Δ-ограничена с относительной гранью, меньшей 1;

(ii) существует замкнутое множество S нулевой меры, такое, что $\mathbb{R}^n \setminus S$ связно и V ограничена на каждом компактном подмножестве в $\mathbb{R}^n \setminus S$.

Пусть $H=-\Delta+V$, и предположим, что $Hu=Eu$ для некоторого E и $u \in L^2$. Предположим, что u обращается в нуль на некотором открытом подмножестве в $\mathbb{R}^n$. Тогда u есть тождественный нуль.

Как показывает доказательство, данное в дополнении к этому разделу, это локальный результат, относящийся к решениям в смысле обобщенных функций уравнения $(-\Delta+V)u=Eu$, которые локально лежат в $D(-\Delta)$. Причина введения условия (i) как раз и состоит в необходимости гарантировать, что собственные функции локально лежат в $D(-\Delta)$.

Предыдущее рассмотрение показывает, что $\sigma_p(-\Delta+V) \cap \cap (0, \infty)=\varnothing$ для $V \in C_0^\infty$. Это специальный случай следующего общего утверждения.

Теорема XIII.58 (теорема Като — Агмона — Саймона). Предположим, что V — потенциал, удовлетворяющий условиям теоремы XIII.57, и что, кроме того, $V=V_1+V_2$, где

(i) функция V_1 ограничена вне некоторого шара $\{x \mid |x|<R_0\}$ и $|x| V_1(x) \to 0$ при $|x| \to \infty$;

(ii) функция V_2 ограничена вне некоторого шара $\{x \mid |x|<R_0\}$ и $V_2(x) \to 0$ при $|x| \to \infty$;

(iii) если рассматривать V_2 как отображение $r \mapsto V_2(r, \cdot)$ из $(0, \infty)$ в $L^\infty(S^{n-1})$, где S^{n-1} есть $(n-1)$-мерная сфера, то V_2 дифференцируема для $|x|>R_0$ как L^∞-значная функция и $\overline{\lim\limits_{r\to\infty}}\, r\,\partial V_2/\partial r \leqslant 0$.

Тогда $H=-\Delta+V$ не имеет строго положительных собственных значений.

Доказательство. Рассмотрим другие условия:

(ii′) $V_2(x)<0$ при $|x|>R_0$ (вместо $V_2(x) \to 0$);

(iii′) $\partial V_2(x)/\partial r \leqslant -r^{-1} V_2$ при $|x|>R_0$ (вместо $\lim\limits_{r\to\infty} r\,\partial V_2/\partial r \leqslant 0$).

Допустим, что можно показать, что $-\Delta+V$ не имеет строго положительных собственных значений при условиях (i), (ii′), (iii′). Но если задан V_2, удовлетворяющий (ii) и (iii), то функция $\tilde{V}_2=V_2-\varepsilon$ удовлетворяет (ii′) и (iii′), по крайней мере, когда R_0 выбрано достаточно большим. Применяя предполагаемый для (i)—(iii′) результат к $-\Delta+V_1+\tilde{V}_2$, мы видим, что $-\Delta+V$ не имеет собственных значений в (ε, ∞). Поскольку ε произвольно, можно довести доказательство теоремы до конца. Итак, будем считать, что выполнены (i), (ii′), (iii′).

Предположим, что ψ — вещественная собственная функция оператора $-\Delta+V$ с собственным значением $E>0$. Определим функцию w из $(0, \infty)$ в $L^2(S^{n-1}, d\Omega)$ посредством

$$w(r, \Omega)=r^{(n-1)/2}\psi(r\Omega), \tag{89}$$

так что

$$\int_0^\infty \|w(r)\|^2_{L^2(S^{n-1},\, d\Omega)}\, dr<\infty.$$

Далее мы будем опускать индекс у нормы. В более общей формулировке, для заданной $\varphi\in L^2(\mathbb{R}^n)$ определим $w_\varphi\in L^2((0, \infty); L^2(S^{n-1}, d\Omega), dr)$ по (89) с заменой ψ на φ. Если $\varphi\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, то

$$w_{H\varphi}=-w''_\varphi-r^{-2}Bw_\varphi+{}^1/_4(n-1)(n-3)r^{-2}w_\varphi+Vw_\varphi, \tag{90}$$

где B — оператор Лапласа—Бельтрами на $L^2(S^{n-1})$, описанный в примере 4 дополнения к § X.1. Равенство (90) может быть доказано применением разложения по сферическим гармоникам, как и в указанном примере. Ниже нам требуется только знать, что $-B$ есть положительный оператор.

При помощи функции w из (89) определим при $r>R_0$ функцию

$$F(r)=(w', w')+r^{-2}(w, Bw)+(w, (E-V_2(r))w), \tag{91}$$

где все внутренние произведения лежат в $L^2(S^{n-1}, d\Omega)$. Объекты, входящие в (91), все корректно определены. Действительно, сначала заметим, что при $\varphi\in C_0^\infty$

$$\int_0^\infty [(\dot{w}_\varphi, \dot{w}_\varphi)-r^{-2}(w_\varphi, Bw_\varphi)]\,dr=\|\nabla\varphi\|^2_{L^2(\mathbb{R}^n)},$$

где $\dot{w}_\varphi=r^{(n-1)/2}(d/dr)(r^{-(n-1)/2}w_\varphi)$. Из этого равенства следует, что w'_φ и (w_φ, Bw_φ) определены почти всюду на $(0, \infty)$, если $\varphi\in Q(-\Delta)$.

Выберем $R_1>R_0$ так, чтобы выполнялось неравенство

$$|rV_1(r)|+{}^1/_4(n-1)(n-3)r^{-1}<k\equiv\sqrt{E}$$

для $r > R_1$. Такое R_1 существует по предположению (i). Утверждается, что почти всюду

$$F(r) \geqslant r^{-1} r_1 F(r_1), \quad r > r_1 > R_1. \tag{92}$$

Дадим сначала формальный вывод (92). Если $r > R_1$, то

$$\frac{d}{dr}(rF(r)) = 2r(w', w'' + r^{-2}Bw + (E - V_2)w) + \\ + \|w'\|^2 - r^{-2}(w, Bw) + E\|w\|^2 - (w, (rV_2)'w) \geqslant \\ \geqslant 2(w', (rV_1 + {}^1/_4(n-1)(n-3)r^{-1})w) + \|w'\|^2 + E\|w\|^2 \geqslant 0,$$

где первое неравенство следует из (формального) равенства для собственной функции, положительности оператора $-B$ и оценки $(rV_2)' = rV_2' + V_2 \leqslant 0$ по условию (iii′). Последнее неравенство обусловлено выбором R_1. Конечно, (92) получается интегрированием этого неравенства.

Приведем теперь строгий вывод (92). Пусть $\varphi \in C_0^\infty$; определим F_φ по (91) с заменой w на w_φ. Дифференцирование, примененное выше к F формально, в применении к F_φ законно и дает

$$\frac{d}{dr}(rF_\varphi) \geqslant 2r(w'_\varphi, (Ew_\varphi - w_{H\varphi}))$$

для $r > R$. Поэтому, если $r > r_1 > R_1$, имеем

$$rF_\varphi(r) \geqslant r_1 F_\varphi(r_1) + \int_{r_1}^{r} 2t(w'_\varphi(t), Ew_\varphi(t) - w_{H\varphi}(t))\, dt.$$

Подберем теперь $\varphi_n \in C_0^\infty$ так, чтобы $\varphi_n \to \psi$ и $-\Delta\varphi_n \to -\Delta\psi$ (такой выбор возможен, поскольку C_0^∞ — существенная область определения для $-\Delta$). Тогда $H\varphi_n \to H\psi = E\psi$. Итак, $w_{\varphi_n} \to w$, $w_{H\varphi_n} \to Ew$ и $w'_{\varphi_n} \to w'$ в $L^2((0, \infty); L^2(S^{n-1}, d\Omega), dr)$ и после перехода к подпоследовательности $F_{\varphi_n} \to F$ поточечно почти всюду. Это доказывает (92).

Из (92) выводится, что $F(r) \leqslant 0$ при $r > R_1$, поскольку если бы это было не так, то левая часть (91) не была бы интегрируемой. Но левая часть (91) интегрируема, ибо $\psi \in D(-\Delta)$ (задача 110). Теперь мы хотим доказать, что $w = 0$ при $r > R_2$ для подходящего R_2. Это повлечет за собой обращение ψ в нуль вне некоторой сферы, а потому, по теореме об однозначном продолжении, ψ окажется тождественно равной нулю. В нашем дальнейшем вычислении мы проделаем только «формальные» выкладки, оставляя читателю восполнение рассуждений по образцу только что приведенных для F_φ.

Для любого $m \geqslant 0$ пусть $w_m = r^m w$ и

$$G(m, r) = \|w'_m\|^2 + (k^2 - k^2 R_1 r^{-1} + m(m+1) r^{-2}) \|w_m\|^2 + \\ + r^{-2}(w_m, Bw_m) - (w_m, V_2(r) w_m).$$

Заметим сначала, что w_m удовлетворяет равенству

$$w''_m - 2mr^{-1} w'_m + r^{-2}[m(m+1) - {}^1/_4(n-1)(n-3) + B] w_m + \\ + (k^2 - V) w_m = 0.$$

Тогда, пользуясь неравенством $-(r^2 V_2)' = rV_2 - r(rV_2)' \geqslant 0$, легко вычислить, что при $r > R_0$

$$\frac{d}{dr}(r^2 G(m, r)) \geqslant 2r\left[(2m+1)\|w'_m\|^2 + k^2\left(1 - \frac{R_1}{2r}\right)\|w_m\|^2 + \right. \\ \left. + (w'_m, (rV_1 + {}^1/_4(n-1)(n-3) r^{-1} - k^2 R_1) w_m)\right].$$

Итак, при $r > R_1$

$$\frac{d}{dr}(r^2 G(m, r)) \geqslant 2r\left[(2m+1)\|w'_m\|^2 + \frac{1}{2} k^2 \|w_m\|^2 - \right. \\ \left. - (k + k^2 R_1)\|w'_m\| \|w_m\|\right].$$

Отсюда следует, что для некоторого m_0 функция $r^2 G(m, r)$ монотонно возрастает на (R_1, ∞), если $m > m_0$.

Предположим теперь, что $w(r_0) \neq 0$ для некоторого $r_0 > R_1$. Записывая

$$G(m, r) = r^{2m}[\|w' + mr^{-1}w\|^2 + (k^2 - k^2 R_1 r^{-1} + m(m+1) r^{-2})\|w\|^2 - \\ - (w, V_2 w) + r^{-2}(w, Bw)], \tag{93}$$

видим, что $G(m, r_0) > 0$ для достаточно большого m. Комбинируя это утверждение с доказанной выше монотонностью, заключаем, что если $w(r_0) \neq 0$ для некоторого $r_0 > R_1$, то для некоторого M (зависящего от r_0) $G(m, r) > 0$ при всех $m > M$ и $r > r_0$.

Теперь можно завершить доказательство. По заданному r_0, такому, что $w(r_0) \neq 0$ и $r_0 > R_1$, выбираем $m_0 > M$, а затем $R_2 > r_0$ так, чтобы для $r > R_2$ выполнялось

$$-k^2 R_1 r^{-1} + m_0(2m_0 + 1) r^{-2} < 0.$$

Поскольку $\int\limits_{R_2}^{\infty} \|w\|^2 dr < \infty$, $\|w\|$ не есть строго монотонно возрастающая функция на всем бесконечном интервале $[R_2, \infty)$, а потому существует некоторое $r_1 > R_2$, такое, что

$$\frac{d}{dr}\|w\|^2 |_{r=r_1} = 2(w', w) \leqslant 0.$$

В частности, при $r=r_1$

$$\|w'+mr^{-1}w\|^2\leqslant\|w'\|^2+m^2r^{-2}\|w\|^2,$$

откуда, в силу (93),

$$0<r_1^{-2m_0}G(m_0,\ r_1)\leqslant\|w'\|^2+k^2\|w\|^2-(w,\ V_2w)+r^{-2}(w,\ Bw)=F(r_1).$$

Коль скоро дано (92), это означает, что $\int\|w\|^2\,dr=\infty$, или $\|w\|^2=0$, поэтому $w(r_0)=0$ для всех $r_0>R_1$. В силу однозначности продолжения (теорема XIII.57), ψ есть тождественный нуль. ∎

Следствие. Предположим, что V удовлетворяет условиям теоремы XIII.57. Если V имеет компактный носитель или если V — потенциал отталкивания вблизи бесконечности (т. е. $\partial V/\partial r\leqslant 0$), то связанных состояний с положительной энергией не существует.

Отметим, что, в силу своего асимптотического поведения, потенциал из примера 1 нарушает как условие $rV_1\to 0$, так и условие на $r\partial V_2/\partial r$.

Третий метод контроля за связанными состояниями с положительной энергией, который мы обсудим, включает в себя теорему вириала. Эта теорема утверждает, что если ψ — собственная функция оператора $H=-\Delta+V$, то при должных предположениях о V имеем

$$2(\psi,\ (-\Delta)\psi)=(\psi,\ \mathbf{r}\cdot\nabla V\psi). \tag{94}$$

Эта формула, очевидно, полезный инструмент при изучении связанных состояний. Например, если $\mathbf{r}\cdot\nabla V\leqslant 0$ (что выражает тот факт, что V — потенциал отталкивания), то H не может иметь связанных состояний, поскольку тогда правая часть (94) всегда была бы отрицательна, а левая — строго положительна. Формально (94) вытекает из следующего построения. Пусть

$$D=\frac{in}{2}+i\sum_{i=1}^{n}x_i\frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Тогда $i[D,\ H]=2(-\Delta)-\mathbf{r}\cdot\nabla V$, так что если ψ — собственная функция с собственным значением E, то

$$2(\psi,\ -\Delta\psi)-(\psi,\ \mathbf{r}\cdot\nabla V)=(\psi,\ i[D,\ H]\psi)=$$
$$=-iE\{(\psi,\ D\psi)-(\psi,\ D\psi)\}=0,$$

поскольку H эрмитов. Это рассуждение чисто формальное, поскольку D — неограниченный оператор, а ψ не обязана лежать в его области определения. И действительно, существуют модификации потенциала из примера 1, обладающие собственными функциями, не лежащими в области определения оператора D (задача 107)! Ключ нашего доказательства теоремы вириала —

в том, что группа, порождаемая D, есть группа растяжений, рассмотренная в § 10. Для $a>0$ определим семейство унитарных операторов

$$(U_a\psi)(x) \equiv (e^{-iD\ln a}\psi)(x) = a^{n/2}\psi(ax)$$

и положим $V_a(x)=V(ax)$, так что $V_a=U_aVU_a^{-1}$ для оператора умножения V.

Теорема XIII.59 (теорема вириала). Предположим, что V — оператор умножения в $L^2(\mathbb{R}^n)$ и что

(i) V — Δ-ограничен с относительной гранью, меньшей единицы;

(ii) существует такой оператор умножения W в $L^2(\mathbb{R}^n)$, что $D(W)\supset D(-\Delta)$ и для всех $\psi\in D(-\Delta)$

$$(a-1)^{-1}(V_a-V)\psi \to W\psi \quad \text{при} \quad a\to 1. \tag{95}$$

Тогда, если $\psi\in D(-\Delta)$ и $-\Delta\psi+V\psi=E\psi$, имеем

$$2(\psi, -\Delta\psi) = (\psi, W\psi) = 2(\psi, (E-V)\psi). \tag{96}$$

Доказательство. Поскольку $U_a(-\Delta)U_a^{-1}=a^{-2}(-\Delta)$, наряду с $(-\Delta+V)\psi=E\psi$ имеем $(-\Delta+a^2V_a)\psi_a=a^2E\psi_a$. Из этих двух равенств следует, что

$$E(a^2-1)(\psi_a, \psi) = ((-\Delta+a^2V_a)\psi_a, \psi)-(\psi_a, (-\Delta+V)\psi) =$$
$$= a^2(V_a\psi_a, \psi)-(\psi_a, V\psi),$$

поскольку оператор $-\Delta$ симметричен. Итак,

$$(a+1)(\psi_a, V_a\psi)+(a-1)^{-1}(\psi_a, (V_a-V)\psi) = E(a+1)(\psi_a, \psi).$$

Переходя к пределу при $a\to 1$, получаем (96). ∎

Отметим, что формально W есть не что иное, как $\mathbf{r}\cdot\nabla V$. Действительно, так как $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)\subset D(-\Delta)$, то, если справедливо (95), W дается формулой $\mathbf{r}\cdot\nabla V$, где производные понимаются в смысле обобщенных функций. Далее, (95) стандартно доказывается следующим образом. Предположим, что $(a-1)^{-1}(V_a-V)$ поточечно сходится к функции W и что существует оператор умножения $\tilde{W}$ с областью определения $D(\tilde{W})\supset D(-\Delta)$, причем выполнено условие

$$|(a-1)^{-1}(V_a-V)| \leqslant \tilde{W}$$

поточечно почти всюду для a, близких к единице. Тогда $D(W)\supset D(-\Delta)$, и (95) выводится из теоремы о мажорированной сходимости.

Теорема XIII.60. Пусть V — вещественнозначная функция, — Δ-ограниченная с относительной гранью, меньшей единицы. Тогда оператор $-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений, если выполнено хотя бы одно из следующих условий:

(i) V удовлетворяет условиям теоремы XIII.59 и является потенциалом отталкивания (т. е. $V(ar) \leqslant V(r)$ для всех r и всех $a>1$);

(ii) V — однородная функция степени $-\alpha$, причем $0<\alpha<2$ (т. е. $V(ar)=a^{-\alpha}V(r)$);

(iii) V удовлетворяет условиям теоремы XIII.59, и для некоторого $b>0$ имеем

$$-\Delta-{}^1/_2(1+b)W-bV \geqslant 0. \tag{97}$$

Доказательство. Если (ii) справедливо, то легко проверить, что выполняются и условия теоремы XIII.59. Поэтому во всех трех случаях пусть W такое, как в теореме XIII.59. Тогда

$$(\psi,\ -\Delta\psi)={}^1/_2(\psi,\ W\psi)$$

для любой собственной функции ψ. В случае (i) $W(x) \leqslant 0$, поэтому $\psi=0$, так как $H_0 \geqslant 0$ и $\operatorname{Ker}(H_0)=\{0\}$. В случае (ii) $W=-\alpha V$, так что по (96)

$$\begin{aligned}2E(\psi,\ \psi)&=(2-\alpha)(\psi,\ V\psi)=-\alpha^{-1}(2-\alpha)(\psi,\ W\psi)=\\&=-2\alpha^{-1}(2-\alpha)(\psi,\ H_0\psi).\end{aligned}$$

Поскольку $2-\alpha>0$ и $-\Delta \geqslant 0$, заключаем, что $E<0$. Наконец, в случае (iii) для любой собственной функции ψ имеем

$$\begin{aligned}-bE(\psi,\ \psi)&=-b(\psi,\ (H_0+V)\psi)+(1+b)(\psi,\ (H_0-{}^1/_2W)\psi)=\\&=(\psi,\ [H_0-{}^1/_2(1+b)W-bV]\psi),\end{aligned}$$

так что из (97) следует, что $E \leqslant 0$. ∎

Подчеркнем, что потенциалы в этой теореме не обязаны стремиться к нулю на бесконечности, поэтому теорему можно применять к многочастичным операторам Шредингера.

Пример 5 (кулоновы системы и в том числе гамильтонианы атомов). Предположим, что имеется n-частичная система с парными силами, которые все имеют вид $a_{ij}|r_i-r_j|^{-1}$. Тогда V — однородная функция степени -1, так что, согласно критерию пункта (ii) теоремы XIII.60, оператор $H=-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений.

Пример 6. Проиллюстрируем пункт (iii) теоремы XIII.60 простым примером. Пусть $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ с $n \geqslant 3$. Мы уже видели в § 3, что $-\Delta+\lambda V$ не имеет отрицательных собственных значений, коль скоро λ достаточно мало. Что можно сказать относительно положительных собственных значений? Техника, развитая в § 7 и основанная на понятии гладкости, влечет за собой отсутствие и положительных собственных значений. А теорема XIII.58 утверждает, что положительных собственных значений нет ни при каких значениях λ. При малых λ возможно другое доказательство, поскольку $-\mathbf{r}\cdot\nabla V-V$ также принадлежит $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Итак, для малых λ оператор $-\Delta-\lambda(\mathbf{r}\cdot\nabla V+V)$ не имеет отрицательных собственных значений, а потому положителен. Из части (iii) теоремы XIII.60 следует, что $-\Delta+\lambda V$ не имеет положительных собственных значений при малых λ.

Теорема XIII.60 не исчерпывает информации, вытекающей из теоремы вириала. Например, можно иметь дело с суммами потенциалов рассмотренного там типа (задача 108). Для некоторых потенциалов можно доказать отсутствие собственных значений в некотором интервале (a, ∞), где $a>0$.

Пример 7. Пусть $H=-\sum_{j=1}^{n}\Delta_j+\sum_{j=1}^{n}V_j(\mathbf{r}_j)+\sum_{i<j}V_{ij}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)$ в $L^2(\mathbb{R}^{3n})$, где $V_j(\mathbf{r}_j)=-b_j r_j^{-1}\exp(-a_j r_j)$ и $V_{ij}(\mathbf{r})=b_{ij}r^{-1}\times\exp(-a_{ij}r)$, все a и b — положительные константы. Пусть $U(r)=r^{-1}(\exp(-ar))$. Тогда $rdU/dr=-U-a\exp(-ar)$, так что если $V=\sum_{j=1}^{n}V_j+\sum_{i<j}V_{ij}$, то

$$\mathbf{x}\cdot\nabla V+V\leqslant\sum_{j=1}^{n}a_jb_j.$$

Отсюда следует, что если $(-\Delta+V)\psi=E\psi$, то

$$E(\psi, \psi)=-(\psi, H_0\psi)+(\psi, (\mathbf{x}\cdot\nabla V+V)\psi)\leqslant\sum_{j=1}^{n}a_jb_j(\psi, \psi),$$

так что H не имеет собственных значений в интервале $\left(\sum_{j=1}^{n}a_jb_j, \infty\right)$.

Имеется связь между методами теоремы вириала и утверждением теоремы XIII.58. Например, если V отрицательно при всех x и однородно степени $-\alpha$, где $\alpha\leqslant 1$, то в окрестности бесконечности выполняются условия (ii′) и (iii′) из доказательства теоремы XIII.58, так что, пользуясь любым из методов, можно заключить, что оператор $-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений. Различие между этими двумя типами результатов состоит в том, что теорема XIII.58 требует лишь информации о поведении на бесконечности, в то время как теорема XIII.60 требует глобальных предположений.

Имеется также связь между методами теоремы вириала и нашим последним методом. Роль, которую играют в предыдущем

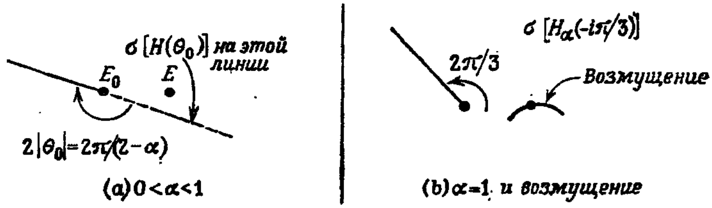

Рис. XIII.6.

изложении растяжения, наводит на мысль, что методы аналитичности по растяжению из § 10 могут иметь отношение к проблеме связанных состояний с положительной энергией. Чтобы убедиться, что это действительно так, вернемся к случаю кулоновых потенциалов.

Пример 5 (заново). Пусть H — гамильтониан n-частичных систем, все парные потенциалы которых суть однородные функции некоторой заданной степени $-\alpha$, где $0<\alpha<1$. Тогда все потенциалы аналитичны относительно растяжений; действительно,

$$U(\theta)\,VU(\theta)^{-1}=e^{-\alpha\theta}V,$$

где $U(\theta)$ — группа растяжений из § 10. Предположим, что E_0 — наибольший порог оператора H_0+V (в конце концов мы докажем, что $E_0=0$) и что $E>E_0$ — собственное значение H. В соответствии с общим анализом гамильтонианов, аналитических относительно растяжений, $H(\theta)$ будет иметь E в качестве собственного значения, коль скоро $0<\operatorname{Im}\theta<\pi$. Записывая

$$H(\theta)=e^{-2\theta}\left(H_0-e^{-(\alpha-2)(\theta-\theta_0)}V\right),$$

где $\theta_0=i\pi/(2-\alpha)$, мы заметим, что

$$H(\theta_0)=e^{-2\theta_0}(H_0-V),$$

и потому любые собственные значения оператора $H(\theta_0)$ должны иметь аргумент $2i\theta_0\neq 0$ или $\pi+2i\theta_0\neq 0$. Итак, E не может быть собственным значением оператора $H(\theta_0)$, а потому и H (см. рис. XIII.6(a)). Условие $\alpha<1$ нужно для того, чтобы гарантировать, что $\operatorname{Im}\theta_0<\pi$.

Теперь, по индукции, мы утверждаем, что $E_0=0$. В самом деле, это справедливо для двухчастичных систем, и очевидно, что если это справедливо для всех k-частичных систем с $k<n$, то по предыдущему построению все k-частичные системы с $k<n$ не имеют положительных собственных значений, а потому n-частичная система не имеет положительных порогов. Заметим, что, по предыдущему построению, можно действительно доказать, что $H(\theta)$ не имеет собственных значений в полосе $\{E\mid 0\leqslant\arg E<2\operatorname{Im}\theta\}$ при $0>\operatorname{Im}\theta>-\pi$.

Пусть теперь V — кулонов потенциал. Пусть V_α — потенциал, получаемый заменой $|r_i-r_j|^{-1}$ на $|r_i-r_j|^{-\alpha}$. Согласно аналитической теории возмущений, если H_0+V обладает положительным собственным значением, то, скажем, для $\theta=-i\pi/3$ оператор $H_0(\theta)+V_\alpha(\theta)$ будет обладать собственным значением вблизи положительной части вещественной оси для малых разностей $\alpha-1$. Однако по общим принципам это собственное значение не может иметь малого отрицательного аргумента при вещественных α. По предыдущему построению при вещественных α, меньших единицы, оно не может иметь и нулевого или малого положительного аргумента. Это противоречие показывает, что H_0+V не может иметь положительных собственных значений (см. рис. XIII.6(b)).

Пример 5 (продолжение, другой подход). Существует и другой путь получения результатов, которые мы только что обсудили. Он позволяет включить интервал $0<\alpha<2$, но требует, чтобы все потенциалы были однородными функциями одной и той же степени $-\alpha$: $H_0(\theta)=e^{-2\theta}H_0$, $V(\theta)=e^{-\alpha\theta}V$. Таким образом, для любого $\varphi\in Q(H_0)$ величина $(\varphi, H_0(\theta)\varphi)$ имеет аргумент, равный $2\pi-2\operatorname{Im}\theta$, в то время как $(\varphi, V(\theta)\varphi)$ — аргумент $2\pi-\alpha\operatorname{Im}\theta$ или $\pi-\alpha\operatorname{Im}\theta$. Итак, поскольку $\alpha<2$, то аргумент $(\varphi, H(\theta)\varphi)$ лежит между $\pi-\alpha\operatorname{Im}\theta$ и $2\pi-\alpha\operatorname{Im}\theta$ для малых и положительных $\operatorname{Im}\theta$. В частности, $(\varphi, H(\theta)\varphi)$ не может иметь нулевого аргумента, а потому $H(\theta)\varphi$ не может равняться $E\varphi$ с $E>0$. Поскольку $H(\theta)$ не может иметь положительных собственных значений, то этим свойством обладает и H.

Одна черта предыдущего построения особенно интересна: существует разница между положительными и отрицательными собственными значениями, как и должно быть в соответствии с примером 4. Эта разница сказывается при $\operatorname{Im}\theta=\pm\pi/2$. При $|\operatorname{Im}\theta|<$ $<\pi/2$ любое собственное значение H в непороговой точке есть дискретное собственное значение $H(\theta)$. Когда $\operatorname{Im}\theta$ стремится к $\pm\pi/2$, непрерывный спектр приближается к отрицательным собственным значениям, так что мы не можем утверждать, что эти собственные значения остаются и при $\operatorname{Im}\theta>\pi/2$ (и, в частности, при $\theta=\theta_0$). Но положительные собственные значения лежат вне непрерывного спектра при $|\operatorname{Im}\theta|\in(0, \pi)$. Это различие наводит на мысль, что потенциалы, аналитические относительно растяжений и допускающие продолжение вплоть до $\operatorname{Im}\theta=\pi/2$, должны обладать специфическими свойствами. Поэтому введем такое

Определение. Будем говорить, что «потенциал» V лежит в $\mathscr{F}_{\pi/2}$, тогда и только тогда, когда

(1) V — квадратичная форма с областью определения $D(-\Delta)$;
(2) величина $(-\Delta+1)^{-1/2}[U(\theta)VU(\theta)^{-1}](-\Delta+1)^{-1/2}$, опреде-

ляемая как оператор при $\theta \in \mathbb{R}$, есть сужение на вещественную ось компактной операторнозначной функции, аналитической в полосе $|\operatorname{Im}\theta| < \pi/2$ и непрерывной по норме в полосе $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant \pi/2$.

Как мы увидим, $\overline{\mathcal{F}}_{\pi/2}$ включает потенциалы Кулона и Юкавы. Скоро мы докажем, что никакая N-частичная система, все парные потенциалы которой лежат в $\overline{\mathcal{F}}_{\pi/2}$, не имеет положительных собственных значений. Для этого нам понадобится теорема из комплексного анализа, связанная с теоремой XII.18.

Лемма (теорема Карлсона). Предположим, что f — комплекснозначная функция, определенная и непрерывная на полуплоскости $\{z \mid \operatorname{Re} z \geqslant 0\}$ и аналитическая в $\{z \mid \operatorname{Re} z > 0\}$. Предположим, что

$$|f(z)| \leqslant Me^{A|z|} \quad \text{для всех } z \text{ с } \operatorname{Re} z \geqslant 0, \tag{98a}$$
$$|f(iy)| \leqslant Me^{-B|y|} \quad \text{для всех } y \in \mathbb{R}, \tag{98b}$$

где $B > 0$. Тогда f — тождественный нуль.

Доказательство. Докажем сначала несколько усиленный вариант принципа максимума, называемый принципом **Фрагмена — Линделёфа**. Предположим, что функция g аналитична в клине

$$N = \{re^{i\theta} \mid r > 0,\ \alpha < \theta < \beta\},$$

непрерывна в $\bar{N}$ и что $\beta - \alpha < \pi$. Тогда, если $|g(z)| \leqslant C_1 \exp(C_2|z|)$ в $\bar{N}$, имеем

$$|g(z)| \leqslant \sup_{y \geqslant 0} \{|g(ye^{i\alpha})|,\ |g(ye^{i\beta})|\} \equiv D.$$

Чтобы доказать это, предположим сначала без потери общности, что $\beta < {}^1/_2\pi\mu^{-1}$, $\alpha > -{}^1/_2\pi\mu^{-1}$, где $\mu > 1$. Пусть $g_\varepsilon(z) = g(z)\exp(-\varepsilon z^\mu)$. Тогда $g_\varepsilon \to 0$ при $|z| \to \infty$ в $\bar{N}$, так что по обычному принципу максимума $g_\varepsilon(z)$ принимает свое наибольшее значение на ∂N. Итак, $|g_\varepsilon(z)| \leqslant D$ для любого ε. Переходя к пределу при $\varepsilon \downarrow 0$, видим, что $|g(z)| \leqslant D$.

Предположим теперь, что f удовлетворяет (98). Пусть

$$h(z) = f(z)\exp(-iBz - Az).$$

Тогда $|h(z)| \leqslant M$, если $|\arg z| = 0$ или $\pi/2$ и $|h(z)| \leqslant M\exp((A+B)|z|)$ для всех z. Итак, по принципу Фрагмена — Линделёфа, $|h(z)| \leqslant M$, если $0 \leqslant \arg z \leqslant \pi/2$. Отсюда следует, что

$$|f(z)| \leqslant M\exp(A|z|\cos\theta - B|z||\sin\theta|), \quad \theta = \arg z, \tag{99}$$

для $0 \leqslant \theta \leqslant \pi/2$ и аналогично для $0 \geqslant \theta \geqslant -\pi/2$.

Теперь рассмотрим функцию $g(x)=f(ix)$ при вещественных x, и пусть $\hat{g}$ — ее фурье-образ. Согласно (99),

$$|g(x-iy)| \leqslant M\exp(A|y|), \quad y>0,$$

так что соображения, основанные на теоремах Пэли — Винера, показывают, что $\hat{g}(k)=0$, если $k<-A$. Поскольку $|g(x)| \leqslant \leqslant M\exp(-\beta|x|)$, из этих же соображений следует, что функция $\hat{g}$ аналитична в окрестности вещественной оси. Отсюда вытекает, что g есть тождественный нуль, поэтому и f — нуль. ∎

Теорема XIII.61 (теорема Балслева — Саймона). Пусть H есть N-частичный оператор Шредингера в $L^2(\mathbb{R}^{nN-n})$, полученный путем отделения движения центра масс из оператора

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

где каждый потенциал V_{ij} есть форма в $\mathcal{F}_{\pi/2}$, причем локальная (т. е. форма, порождаемая оператором умножения) и симметрическая. Тогда H не имеет собственных значений в $(0, \infty)$.

Доказательство. Как и в примере 5 (заново), если нам удастся доказать, что H не имеет положительных собственных значений при дополнительном предположении, что у H нет положительных порогов, то по индукции можно будет доказать это утверждение и без дополнительного предположения.

Если H не имеет положительных порогов и $E>0$ — собственное значение, то E будет и собственным значением операторов $H(\theta)$ при $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant \pi/2$, а проектор

$$P(\theta)=-\frac{1}{2\pi i}\int_{|\lambda-E|=\varepsilon}(H(\theta)-\lambda)^{-1}\,d\lambda,$$

определенный при $|\operatorname{Im}\theta|>0$, будет аналитичен в полосе $|\operatorname{Im}\theta| \leqslant \pi/2$ и равен спектральному проектору $P_{\{E\}}(H)$ при $\theta=0$. Итак, по лемме О'Коннора (предложению, следующему за теоремой XIII.39) любой собственный вектор ψ, удовлетворяющий равенству $H\psi=E\psi$, обладает тем свойством, что $U(\theta)\psi$ продолжается до функции, аналитической в $\{\theta \mid |\operatorname{Im}\theta|<\pi/2\}=N$ и непрерывной в $\bar{N}$. Более того, поскольку E — изолированное собственное значение операторов $H(\pm i\pi/2)$, то по доказанному в § 11 функции $U(\pm i\pi/2)\psi$ убывают экспоненциально в том смысле, что $e^{br}U(\pm i\pi/2)\psi \in L^2$ при некотором $b>0$.

Говоря нестрого, доказательство будет развиваться следующим образом. На интуитивном уровне утверждение, что ψ аналитична относительно растяжений, означает, что $\psi(x)$, рассматриваемая как функция от $r=|x|$ и $\Omega=x/|x|$, аналитична по r при фиксированном Ω в области $\operatorname{Re} r>0$, причем

$$e^{-1/2(nN-n)i\theta}(U(\theta)\psi)(r, \Omega)=\psi(re^{i\theta}, \Omega).$$

Из условия $\psi\in L^2$ следует, что $\psi(z, \Omega)$ в какой-то мере ограничена, а из условия $U(\pm i\pi/2)\psi\in D(e^{br})$ — что $\psi(z, \Omega)$ убывает экспоненциально, если $\arg z=\pm\pi/2$. Но тогда $\psi=0$ по теореме Карлсона. Это рассуждение не проходит непосредственно, поскольку вся наша информация относится только к пространству L^2, однако оно поясняет идею, лежащую в основе следующего доказательства.

Фиксируем $g\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{nN-n}\setminus\{0\})$ — функцию, носитель которой отделен от нуля; скажем, $\operatorname{supp} g\subset\{x\,|\,|x|>R\}$. При $z\in(0, \infty)$ определим

$$F(z)=z^{nN/2}\int\overline{g(x)}\,\psi(zx)\,d^{nN-n}x=z^{n/2}(g,\ U(\ln z)\psi).$$

Пользуясь этой формулой, можно продолжить F до функции, аналитической в области $\{z\mid \operatorname{Re} z>0\}$ и непрерывной в $\{z\mid\operatorname{Re} z\geqslant 0\}$.

Поскольку $U(\theta)$ унитарен при вещественном θ, то

$$|F(z)|\leqslant|z|^{n/2}\|g\|\sup_{|y|\leqslant\pi/2}\|U(iy)\psi\|$$

для всех z с $\operatorname{Re} z\geqslant 0$. Более того, при вещественных и положительных β

$$\begin{aligned}|F(i\beta)|&=\left|\beta^{nN/2}\int\overline{g(x)}\,[U(i\pi/2)\psi](\beta x)\,dx\right|=\\&=\beta^{n/2}\int\limits_{|x|\geqslant\beta R}\overline{g(\beta^{-1}x)}\,[U(i\pi/2)\psi](x)\,dx\leqslant\\&\leqslant e^{-\beta Rb}|\beta|^{nN/2}\|g\|\,\|e^{br}U(i\pi/2)\psi\|\end{aligned}$$

и аналогично для $F(-i\beta)$. Итак, по теореме Карлсона $F=0$, откуда $(g, \psi)=0$. Поскольку функции $g\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{nN-n}\setminus\{0\})$ плотны в L^2, то $\psi=0$. ∎

Пример 7 (заново). Потенциал $V(r)=e^{-ar}/r$ лежит в $\mathscr{F}_{\pi/2}$ и $V_\theta(r)=e^{-\theta}r^{-1}\exp(-ae^\theta r)$. Итак, гамильтонианы примера 7 не имеют собственных значений в $(0, \infty)$. Этот результат лучше, чем тот, который дает теорема вириала. Однако существуют ситуации, когда метод вириала дает информацию, а теорема XIII.61 нет. Например, если $V(r)=be^{-ar}$ с $b>0$, то оператор $-\Delta+V$ не имеет положительных собственных значений по теореме вириала, но V *не* лежит в $\mathscr{F}_{\pi/2}$, поскольку $\exp(-ae^\theta r)$ не является относительно компактным оператором умножения, так что $V_\theta(r)$ не может обладать непрерывным *по норме* продолжением вплоть до $\{\theta\,|\,|\operatorname{Im}\theta|=\pi/2\}$.

Пример 8. Если каждый потенциал V_{ij} однороден степени β_{ij}, причем $0<\beta_{ij}<2$, то оператор $\tilde{H}=-\sum_{i=1}^{n}\Delta_i+\sum_{i<j}V_{ij}$ обладает тем свойством, что после отделения движения центра масс у него нет связанных состояний с положительной энергией. Этот результат нельзя получить методом теоремы вириала, хотя он и разумен с точки зрения этой теоремы.

В предыдущем мы занимались операторами Шредингера, но те же идеи применимы и в других ситуациях. Так, при исследовании акустического рассеяния по методу Лакса—Филлипса (§ XI.11) мы нуждались в следующем результате.

Теорема XIII.62. Пусть σ и λ — вещественные C^2-функции на $\mathbb{R}^3$, такие, что $\sigma(x)>0$, $\lambda(x)>0$ и функции $\sigma_0-\sigma(x)$ и $\lambda_0-\lambda(x)$ имеют компактные носители при некоторых константах σ_0 и λ_0. Пусть H — самосопряженный оператор в $L^2(\mathbb{R}^3)$, получаемый замыканием квадратичной формы

$$q(f,f)=\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla(\lambda f)|^2\sigma\,dx,$$

заданной на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Тогда H не имеет собственных значений.

Доказательство. Очевидно, для некоторого $a>0$ функция $\sigma(x)\geqslant a$ для всех x. Таким образом, для $f\in D(H)$

$$(Hf,f)=q(f,f)\geqslant a\int_{\mathbb{R}^3}|\nabla(\lambda f)|^2dx\geqslant 0.$$

Итак, H не имеет отрицательных собственных значений, а если $Hf=0$, то $\lambda f=0$, откуда следует, что $f=0$, так что и нуль не может быть собственным значением. Остается исключить строго положительные собственные значения.

Предположим, что $E>0$ и что $Hf=Ef$. Пусть B_R — шар радиуса R, содержащий носители функций $\sigma_0-\sigma(x)$ и $\lambda_0-\lambda(x)$. Тогда на $\Omega=\mathbb{R}^3\setminus B_R$ функция f удовлетворяет уравнению

$$-\Delta f=(\lambda_0^2\sigma_0)^{-1}Ef,$$

а потому f обращается на Ω в нуль в соответствии с рассуждением, предшествующим теореме XIII.57. Итак, чтобы заключить, что f есть нуль, нам нужна теорема об однозначном продолжении для H. Но, поскольку $Hf=Ef$, имеем

$$(\Delta f)(x)=\alpha(x)f(x)+\beta(x)\cdot\nabla f(x)$$

для подходящих ограниченных функций $\alpha(x)$ и $\beta(x)$, так что

$$|(\Delta f)(x)|\leqslant M(|f(x)|+|\nabla f(x)|).$$

С помощью несложного обобщения методов из дополнения к этому разделу (см. задачу 113) можно показать, что теорема об однозначном продолжении для таких неравенств существует. ∎

Дополнение к § XIII.13. Теоремы об однозначном продолжении решений уравнений Шредингера

В этом дополнении мы докажем теорему XIII.57. На самом деле мы докажем следующий более сильный результат.

Теорема XIII.63. Пусть $u \in H^2_{\text{loc}}$, т. е. $\varphi u \in D(-\Delta)$ для каждого $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Пусть D — открытое связное множество в $\mathbb{R}^n$, и предположим, что

$$|\Delta u(x)| \leqslant M\,|u(x)|$$

почти всюду на D. Тогда, если u обращается в нуль в окрестности одной точки $x_0 \in D$, то u — тождественный нуль в D.

Доказательство этого результата, которое мы дадим только для $n=3$ (см. задачи 111, 112 для случая произвольного n), основано на следующей замечательной оценке для C^∞-функции f с носителем в $\{x \mid 0 < |x| < R\}$:

$$\int |x|^\alpha |f(x)|^2 d^3x \leqslant {}^4/_3 R^4 \int |x|^\alpha |\Delta f|^2 d^3x \tag{100}$$

для *всех* вещественных α. Мы докажем (100), применяя разложение f по парциальным волнам:

$$f(x) = \sum_{l,\,m} f_{lm}(|x|)\,Y_{lm}(\Omega_x),$$

явно описанное ниже. Итак, начнем с доказательства аналога оценки (100) для каждой парциальной волны.

Лемма 1. Пусть f есть C^∞-функция с носителем в $(0, 1)$. Для каждого $l = 0, 1, 2, \ldots$ определим

$$g_l = -f'' + \frac{l(l+1)}{x^2} f.$$

Тогда для *любого* вещественного α

$$\int_0^1 x^\alpha |f(x)|^2\,dx \leqslant {}^4/_3 (2l+1)^{-2} \int_0^1 x^\alpha |g_l(x)|^2\,dx.$$

Доказательство. Фиксируем l, и пусть D обозначает формальный дифференциальный оператор $-d^2/dx^2 + l(l+1)/x^2$. Тогда формально $Dh_+ = Dh_- = 0$ где $h_+(x) = x^{l+1}$ и $h_-(x) = x^{-l}$. Далее, поскольку f обращается в нуль около нуля и единицы, можно