Отсюда для некоторого N_0 и всех $a \in (0, 1)$

$$R_n(a) = \max(|E_n(a) - E_{n-1}(a)|^{-1}, \; |E_n(a)| - E_{n+1}(a)|^{-1}) \leqslant cn^{-1}$$

при всех $n \geqslant N_0$. Таким образом, для таких a и n имеет место оценка $d^2E_n(a)/da^2 \leqslant c\|V\|_\infty^2 n^{-1}$, так что по формуле остаточного члена в разложении Тейлора

$$\left| E_n(1) - (n\pi)^2 - \frac{dE_n}{da}(0) \right| \leqslant \frac{c}{2} \|V\|_\infty^2 n^{-1}.$$

Поскольку $\psi_n(0) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$, мы заключаем, что $dE_n/da = \tilde{V}(0) - {}^1/_2\tilde{V}(2n) - {}^1/_2\tilde{V}(-2n)$ при $a=0$, где $\tilde{V}(m) = \int_0^1 e^{-im\pi x} V(x)\,dx$. Но тогда по лемме Римана—Лебега $\tilde{V}(m) \to 0$ при $m \to \infty$, так что $dE_n/da \to \tilde{V}(0)$ при $n \to \infty$. ∎

Заметим, что ошибка $E_n(V) - (n\pi)^2 - \int_0^1 V(x)\,dx$ есть сумма двух членов, один из которых равен $O(n^{-1})$, а другой $\operatorname{Re}\tilde{V}(2n)$. Для гладких V этот член также равен $O(n^{-1})$, но в общем случае $\sup\limits_{n \geqslant m} \tilde{V}(2n)$ может убывать как угодно медленно. Полученный результат существенно зависит от одномерности задачи, ибо только в одномерном случае расстояние между собственными значениями H_0 растет при $n \to \infty$.

XIII.16. Операторы Шредингера с периодическими потенциалами

В этом разделе изучаются операторы Шредингера $-\Delta + V$ с периодической функцией V, т. е. предполагается, что для некоторого базиса $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}^n$ потенциал V удовлетворяет соотношению

$$V(\mathbf{x} + \mathbf{a}_i) = V(\mathbf{x}). \tag{135}$$

Как объясняется дальше, такие операторы играют важную роль в физике твердого тела.

Мы уже знаем, что спектральные свойства операторов Шредингера сильно зависят от поведения V на бесконечности, и нам известны три различных класса шредингеровых операторов. Во-первых, это операторы, у которых $V(x) \to \infty$ при $x \to \infty$. Их спектральные свойства было проще всего установить: существенный спектр таких операторов пуст (теорема XIII.16). Другой простейший класс состоял из «одночастичных операторов Шредингера», у которых $V(x) \to 0$ при $x \to \infty$, по крайней мере в некотором «усредненном» смысле (например так, что $V \in L^p(\mathbb{R}^n, dx)$ при некотором $p < \infty$); при довольно общих предположениях у этих операторов $\sigma_{ess} = [0, \infty)$ (см. теорему XIII.15), а их сингулярный спектр пуст (теорема XIII.33). Третий класс состоял из «N-частичных операторов Шредингера», у которых $V(x) \to 0$ при $x \to \infty$ по «большинству» направлений (т. е. по тем направлениям, где все «координатные» разности $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \to \infty$), но у которых V не имеет предела в трубах около тех пространственных направлений, где $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$ (для каких-то i, j). Анализ этих операторов был значительно труднее; мы установили, что при достаточно общих условиях $\sigma_{ess} = [\Sigma, \infty)$, где Σ — число (теорема XIII.17), которое можно найти, но доказать, что $\sigma_{sing} = \varnothing$, мы смогли только при весьма специальных предположениях (теоремы XIII.27, XIII.29 и XIII.36). Итак, спектральные свойства $-\Delta + V$ весьма чувствительны к поведению V на бесконечности, а поскольку V, удовлетворяющий (135), не имеет предела при $x \to \infty$ по любому направлению, можно ожидать, что анализ периодических операторов Шредингера будет достаточно трудным.

Свойство, которое все-таки позволяет провести анализ оператора $H = -\Delta + V$, когда V — периодическая функция, состоит в том, что он симметричен относительно действия обширной группы. В самом деле, полагая

$$(U(\mathbf{t})\psi)(\mathbf{x}) = \psi\left(\mathbf{x} + \sum_{i=1}^{n} t_i \mathbf{a}_i\right),$$

где $\mathbf{t} \in \mathbb{Z}^n$, мы видим, что (формально)

$$U(\mathbf{t}) H = H U(\mathbf{t}). \tag{136}$$

Можно доказать, что $U(\mathbf{t}) e^{-isH} = e^{-isH} U(\mathbf{t})$ (задача 135). Благодаря этому некоторая часть анализа свойств H представляет собой частный случай излагаемых в гл. XVI общих соображений, основанных на существовании симметрии. С этой точки зрения, здесь еще рано обсуждать эти вопросы. Заметим, однако, что прямые интегралы с одинаковыми слоями, описываемые ниже, дают пример (содержащий большинство существенных черт) общей конструкции гл. XVI и что возможность разложения периодических операторов Шредингера в прямой интеграл вытекает непосредственно из (136). Отметим еще тот исторический факт, что основные моменты такого разложения были открыты и математиками (Флоке), и физиками (Блох), которые, однако, не сознавали, что говорят на языке теории групп. Мы также не будем здесь явно использовать связь с группой симметрий, а разовьем всю теорию более прямым способом.

Итак, пусть $\mathscr{H}'$ — сепарабельное гильбертово пространство и $\langle M, \mu \rangle$ — пространство с σ-конечной мерой. В § II.1 было по строено гильбертово пространство $L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ квадратично интегрируемых $\mathscr{H}'$-значных функций. Заметим, что если μ — сумма точечных мер, сосредоточенных в точках $m_1, \ldots, m_n$, то любая $f \in L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ определена набором $\langle f(m_1), \ldots, f(m_n)\rangle$, так что $L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ изоморфно прямой сумме $\bigoplus_{i=1}^{m} (\mathscr{H}_i = \mathscr{H}')$. Тогда $L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ для более общих мер μ есть своего рода «непрерывная прямая сумма», но с одинаковыми слагаемыми. По этой причине назовем $\mathscr{H} \equiv L^2(M, d\mu; \mathscr{H}')$ **прямым интегралом пространств с одинаковыми слоями** и будем писать

$$\mathscr{H} = \int_M^{\oplus} \mathscr{H}'\, d\mu.$$

Может показаться глупым давать странное новое название хорошо знакомому старому объекту; это сделано с целью перенести акцент с точек пространства M на «слои» $\mathscr{H}'$. Нас будет интересовать специальный класс операторов на $\mathscr{H}$. Функция $A(\cdot)$ из M в $\mathscr{L}(\mathscr{H}')$ называется измеримой тогда и только тогда, когда измерима функция $(\varphi, A(\cdot)\psi)$ для любых $\varphi, \psi \in \mathscr{H}'$. Символ $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$ обозначает пространство (классов эквивалентности равных п. в.) измеримых функций из M в $\mathscr{L}(\mathscr{H}')$, таких, что

$$\|A\|_\infty \equiv \operatorname{ess\,sup} \|A(m)\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H}')} < \infty.$$

Определение. Говорят, что ограниченный оператор A на $\mathscr{H} = \int_M^{\oplus} \mathscr{H}'\, d\mu$ **разложен** прямым интегралом пространств тогда и только тогда, когда существует функция $A(\cdot) \in L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$, такая, что для всех $\psi \in \mathscr{H}$

$$(A\psi)(m) = A(m)\,\psi(m). \tag{137}$$

В таком случае мы называем A **разложимым** и пишем

$$A = \int_M^{\oplus} A(m)\, d\mu(m);$$

$A(m)$ называются **слоями** оператора A.

Отметим прежде всего, что с каждой функцией $A(\cdot)$ из $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$ связан некоторый разложимый оператор.

Теорема XIII.83. Если $A(\cdot) \in L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$, то существует однозначно определенный разложимый оператор $A \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$, такой, что выполняется (137). Более того, $\|A\|_{\mathscr{L}(\mathscr{H})} = \|A(\cdot)\|_\infty$.

Доказательство. Единственность очевидна. Надо только показать, что преобразование, задаваемое формулой (137), переводит измеримые квадратично интегрируемые $\mathcal{H}'$-значные функции ψ в измеримые квадратично интегрируемые $\mathcal{H}'$-значные функции и что так определенный оператор A ограничен и имеет норму $\|A(\cdot)\|_\infty$. Пусть $\psi \in L^2(M, d\mu; \mathcal{H}')$. Пусть $\{\eta_k\}_{k=1}^\infty$ — ортонормированный базис в $\mathcal{H}'$. Тогда $A(m)\psi(m) = \sum_{k=1}^\infty (\eta_k, \psi(m)) A(m)\eta_k$ почти всюду по m, поскольку $A(\cdot)$ — ограниченный почти всюду оператор. Далее, по определению измеримости $A(\cdot)$ функция $A(m)\eta_k$ слабо измерима, так что $\varphi_N(m) \equiv \sum_{k=1}^N (\eta_k, \psi(m)) A(m)\eta_k$ сильно измерима для любого $N < \infty$ (теорема IV.22). Более того,

$$\int \|\varphi_N(m)\|^2 d\mu = \int \left\| A(m) \sum_{k=1}^N (\eta_k, \psi(m))\eta_k \right\|^2 d\mu \leqslant$$
$$\leqslant \|A(\cdot)\|_\infty^2 \int \left\| \sum_{k=1}^N (\eta_k, \psi(m))\eta_k \right\|^2 d\mu \leqslant \|A(\cdot)\|_\infty^2 \|\psi\|^2. \tag{138}$$

Аналогичное вычисление показывает, что φ_N — последовательность Коши в $\mathcal{H}$ и потому она имеет предел $\varphi \in L^2(M, d\mu; \mathcal{H}')$. Но $\varphi_N(m)$ сходится к $A(m)\psi(m)$ в $\mathcal{H}'$ для почти всех $m \in M$. Следовательно, $A(\cdot)\psi(\cdot) \in L^2(M, d\mu; \mathcal{H}')$. В силу (138)

$$\|A(\cdot)\psi(\cdot)\| \leqslant \|A\|_\infty \|\psi\|,$$

так что A ограничен и $\|A\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} \leqslant \|A(\cdot)\|_\infty$.

Для доказательства обратного неравенства предположим, что $\{\beta_k\}_{k=1}^\infty$ — плотное подмножество единичного шара в $\mathcal{H}'$, и пусть $f \in L^1(M, d\mu)$. Функцию f можно представить в виде $f = gh$, где $g, h \in L^2$ и $\|g\|_2^2 = \|h\|_2^2 = \|f\|_1$. Фиксируем k, l, и пусть $\psi = \bar{g}\beta_k$ и $\varphi = h\beta_l$. Тогда

$$\left| \int f(m)(\beta_k, A(m)\beta_l)\, d\mu \right| = |(\psi, A\varphi)| \leqslant \|A\| \|\psi\| \|\varphi\| \leqslant$$
$$\leqslant \|A\| \|\beta_k\| \|\beta_l\| \int |f(m)|\, d\mu.$$

Поскольку $L^\infty(M)$ сопряжено $L^1(M)$, то

$$|(\beta_k, A(m)\beta_l)| \leqslant \|\beta_k\| \|\beta_l\| \|A\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})}$$

почти всюду по m. Отсюда $\|A(\cdot)\|_\infty \leqslant \|A\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})}$. ∎

Доказанная теорема устанавливает изометрический изоморфизм между $L^\infty(M, d\mu; \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$ и множеством разложимых операторов на $\int_M^\oplus \mathcal{H}'\, d\mu$. Оба эти пространства суть алгебры, и легко понять, что при описанном изоморфизме сохраняются и алгебраические структуры. $L^\infty(M, d\mu; \mathbb{C})$ — естественная подалгебра в $L^\infty(M, d\mu; \mathscr{L}(\mathscr{H}'))$, отвечающая тем разложимым операторам, у которых все слои кратны единичному оператору.

Теорема XIII.84. Пусть $\mathscr{H}=\int_M^\oplus \mathscr{H}'\,d\mu$, где $\langle M, \mu\rangle$ — сепарабельное пространство с σ-конечной мерой и $\mathscr{H}'$ сепарабельно. Пусть $\mathscr{A}$ — алгебра разложимых операторов со слоями, кратными единичному оператору. В таком случае $A\in\mathscr{L}(\mathscr{H})$ разложим тогда и только тогда, когда A коммутирует с каждым оператором из $\mathscr{A}$.

Доказательство. Очевидно, что любой разложимый оператор A коммутирует со всеми операторами из $\mathscr{A}$, так что в доказательстве нуждается только обратное утверждение. Поскольку μ есть σ-конечная мера, можно найти строго положительную функцию $F\in L^1$, такую, что $d\nu=F\,d\mu$ имеет единичную массу. Пусть $\tilde{\mathscr{H}}=\int_M^\oplus \mathscr{H}'\,d\nu$. В таком случае отображение $U\colon \mathscr{H}\to\tilde{\mathscr{H}}$, заданное формулой $Ug=F^{-1/2}g$, унитарно и $U\mathscr{A}U^{-1}=\tilde{\mathscr{A}}$. Более того, A разложим тогда и только тогда, когда разложим UAU^{-1}. В итоге без ограничения общности можно предположить, что $\int d\mu=1$.

Предположим, что A из $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ коммутирует с любым оператором из $\mathscr{A}$. Выберем в $\mathscr{H}'$ ортонормированный базис $\{\eta_k\}_{k=1}^\infty$ и предположим, что F_k — элемент $\mathscr{H}$, такой, что $F_k(x)=\eta_k$ для всех x. Семейство F_k ортонормировано в силу условия $\int d\mu=1$. Кроме того, для каждого $\psi\in\mathscr{H}$ справедливо разложение $\psi=\sum_{k=1}^\infty f_k(x)F_k$, в котором каждая функция $f_k\in L^2(M, d\mu;\ \mathbb{C})$ и $\|\psi\|^2=\sum_k\|f_k\|^2$ (см. задачу 12 к гл. II). Введем функции $a_{km}(x)$ равенством $AF_k=\sum_{m=1}^\infty a_{km}(x)F_m$. Выберем плотное в $\mathscr{H}'$ счетное множество D, состоящее из векторов вида $\sum_{k=1}^N \alpha_k\eta_k=\varphi$, и положим $A(x)\varphi=\sum_{k,m}\alpha_k a_{km}(x)\eta_m$. Тогда для любой $f\in L^\infty(M, d\mu;\ \mathbb{C})$

$$A(f\varphi)=f(A\varphi)=\sum_k^N f\alpha_k AF_k=\sum_{k,m} f\alpha_k a_{km}(\cdot)F_m$$

в силу того, что $fI\in\mathscr{A}$. Таким образом,

$$\int |f(x)|^2\sum_m\left|\sum_k \alpha_k a_{km}(x)\right|^2 d\mu(x)\leqslant\|A\|^2\left(\int|f(x)|^2\,d\mu\right)\sum_k|\alpha_k|^2.$$

Отсюда вытекает, что для почти всех x и всех $\varphi \in D$

$$\|A(x)\varphi\| \leqslant \|A\| \|\varphi\|,$$

так что $A(x)$ можно расширить до оператора на $\mathscr{L}(\mathscr{H}')$ и $A(\cdot) \in L^\infty$. Пусть B — соответствующий разложимый оператор. Пусть $\psi \in \mathscr{H}$ представим в виде $\psi = \sum_{k=1}^{N} f_k(x) F_k$, где $f_k \in L^\infty$. Тогда

$$(A\psi)(x) = \sum_{k=1}^{N} f_k(x)(AF_k(x)) = \sum_{k=1}^{N} f_k(x)(A(x)\eta_k) =$$
$$= A(x) \sum_{k=1}^{N} f_k(x)\eta_k = (B\psi)(x).$$

Поскольку множество таких ψ плотно, $A = B$. ∎

Применяемая нами ниже конструкция существенно опирается на то, что $U(t)$ порождает алгебру, изоморфную алгебре $\mathscr{A}$, отвечающей подходящему разложению $\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ в прямой интеграл с одинаковыми слоями.

Поскольку $-\Delta + V$ — неограниченный оператор, нужно сказать несколько слов о неограниченных разложимых самосопряженных операторах.

Определение. Функция $A(\cdot)$ из пространства с мерой $\langle M, \mu\rangle$ во множество самосопряженных (не обязательно ограниченных) операторов на гильбертовом пространстве $\mathscr{H}'$ называется **измеримой** тогда и только тогда, когда измерима функция $(A(\cdot) + i)^{-1}$. Зная такую функцию, мы определяем оператор A в $\mathscr{H} = \int_M^\oplus \mathscr{H}' \, d\mu$ с областью определения

$$D(A) = \left\{ \psi \in \mathscr{H} \;\middle|\; \psi(m) \in D(A(m)) \text{ п. в., } \int_M \|A(m)\psi(m)\|^2_{\mathscr{H}'} \, d\mu(m) < \infty \right\}$$

соотношением

$$(A\psi)(m) = A(m)\psi(m)$$

и пишем $A = \int_M^\oplus A(m)\, d\mu(m)$.

Свойства таких операторов суммирует

Теорема XIII.85. Пусть $A = \int_M^\oplus A(m)\, d\mu(m)$, где $A(\cdot)$ измерима и $A(m)$ — самосопряженный оператор для каждого m. Тогда

(a) оператор A самосопряжен;

(b) самосопряженный оператор A в $\mathscr{H}$ имеет вид $\int_M^\oplus A(m)\,d\mu$ тогда и только тогда, когда $(A+i)^{-1}$ есть ограниченный разложимый оператор;

(c) для любой борелевой функции F на $\mathbb{R}$

$$F(A)=\int_M^\oplus F(A(m))\,d\mu(m); \tag{139}$$

(d) $\lambda\in\sigma(A)$ тогда и только тогда, когда для любого $\varepsilon>0$

$$\mu(\{m\in M\mid\sigma(A(m))\cap(\lambda-\varepsilon,\ \lambda+\varepsilon)\neq\varnothing\})>0;$$

(e) λ есть собственное значение оператора A тогда и только тогда, когда

$$\mu(\{m\in M\mid \lambda \text{ есть собственное значение } A(m)\})>0;$$

(f) если спектр каждого $A(m)$ содержит только абсолютно непрерывную часть, то таков же и спектр A;

(g) предположим, что $B=\int_M^\oplus B(m)\,d\mu(m)$, причем каждый $B(m)$ самосопряжен. Если B ограничен относительно A и его A-грань равна a, то $B(m)$ почти всюду $A(m)$-ограничен и его $A(m)$-грань $a(m)\leqslant a$. Если $a<1$, то

$$A+B=\int_M^\oplus (A(m)+B(m))\,d\mu(m) \tag{140}$$

самосопряжен на $D(A)$.

Доказательство. (a) Заметим прежде всего, что A — симметрический оператор, поэтому в силу основного критерия самосопряженности (теорема VIII.3) нужно доказать только, что $\operatorname{Ran}(A\pm i)=\mathscr{H}$. Пусть $C(m)=(A(m)+i)^{-1}$. Согласно предположению теоремы, $C(m)$ измерима и $\|C(m)\|\leqslant 1$, так что мы можем определить $C=\int_M^\oplus C(m)\,d\mu(m)$. Пусть $\psi=C\eta$ с некоторым $\eta\in\mathscr{H}$. Тогда $\psi(m)\in\operatorname{Ran}C(m)=D(A(m))$ почти всюду и

$$\|A(m)\psi(m)\|=\|A(m)C(m)\eta(m)\|\leqslant\|\eta(m)\|\in L^2(d\mu),$$

так что $\psi\in D(A)$. Более того, $(A+i)\psi=\eta$, так что $\operatorname{Ran}(A+i)=\mathscr{H}$. Аналогично, $\operatorname{Ran}(A-i)=\mathscr{H}$, поскольку $(A(m)-i)^{-1}=C(m)^*$ слабо измерима.

(b) Доказательство этого утверждения мы оставляем читателю (задача 136).

(c) Приведем схему доказательства, оставляя детали читателю (задача 136). Согласно аргументам пункта (a), для любого λ с $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$

$$(A-\lambda)^{-1} = \int_M^{\oplus} (A(m)-\lambda)^{-1}\, d\mu(m).$$

Поскольку $e^{itA} = \lim_{n\to\infty} (1-(itA/n))^{-n}$ (функциональное исчисление), то, применив теорему о мажорированной сходимости, можно получить равенство

$$e^{itA} = \int_M^{\oplus} e^{itA(m)}\, d\mu.$$

Если $F \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$, то (139) доказывается с помощью преобразования Фурье, а тогда путем предельного перехода (139) переносится на произвольные F.

(d) Частным случаем формулы (139) служит равенство

$$P_{(a,b)}(A) = \int_M^{\oplus} P_{(a,b)}(A(m))\, d\mu.$$

Замечая, что $\lambda \in \sigma(A)$ тогда и только тогда, когда $P_{(\lambda-\varepsilon,\lambda+\varepsilon)}(A) \neq 0$ для всех $\varepsilon > 0$, и что $\int_M^{\oplus} T(m)\, d\mu = 0$ тогда и только тогда, когда $T(m) = 0$ почти всюду, легко выводим (d).

(e) Доказательство можно провести так же, как в пункте (d), если основываться на равенстве

$$P_{\{\lambda\}}(A) = \int_M^{\oplus} P_{\{\lambda\}}(A(m))\, d\mu.$$

(f) Пусть $\psi \in \mathscr{H}$ и $d\nu$ — спектральная мера A, ассоциированная с ψ. Пусть $d\nu_m$ — спектральная мера $A(m)$, ассоциированная с $\psi(m)$. Тогда $d\nu = \int_M (d\nu_m)\, d\mu(m)$ в том смысле, что

$$\int_{\mathbb{R}} F(x)\, d\nu = \int_M \left(\int_{\mathbb{R}} F(x)\, d\nu_m \right) d\mu(m). \tag{141}$$

Это утверждение немедленно вытекает из (139). Если теперь спектр каждого оператора $A(m)$ содержит только абсолютно непрерывную часть, то $d\nu_m(x) = g_m(x)\, dx$ с некоторой функцией $g_m \in L^1(\mathbb{R}, dx)$, такой, что $\int g_m(x)\, dx = \|\psi(m)\|^2_{\mathscr{H}'}$. Таким образом, функция

$$g(x) = \int_M g_m(x)\, d\mu(m)$$

лежит в $L^1(\mathbb{R}, dx)$ и, в силу (141),

$$d\nu = g(x)\,dx.$$

Отсюда $\psi \in \mathcal{H}_{ac}$ для оператора A, так что спектр A содержит только абсолютно непрерывную часть.

(g) Если $\|B\psi\| \leqslant a\|A\psi\| + b\|\psi\|$, то $\|B(A+ik)^{-1}\| \leqslant a + bk^{-1}$ для любого положительного целого k. Следовательно,

$$\|B(m)(A(m)+ik)^{-1}\| \leqslant a + bk^{-1}$$

почти всюду, и потому $B(m)$ ограничен относительно $A(m)$ и его $A(m)$-грань $a(m) \leqslant a$. Соотношение (140) очевидно. ∎

Часть (f) последней теоремы дает достаточное условие абсолютной непрерывности спектра оператора $A = \int_M^{\oplus} A(m)\,d\mu(m)$. Но это условие, конечно, не является необходимым. На самом деле A может иметь только абсолютно непрерывный спектр даже тогда, когда у каждого $A(m)$ спектр будет чисто дискретным! Следующая теорема иллюстрирует это явление.

Теорема XIII.86. Пусть $\langle M, d\mu\rangle$ — отрезок $[0, 1]$ с мерой Лебега. Пусть $\mathcal{H}'$ — фиксированное сепарабельное бесконечномерное пространство и $A = \int_{[0,1]}^{\oplus} A(m)\,d\mu(m)$, где каждый $A(m)$ самосопряжен. Предположим, что заданы $\mathcal{H}'$-значные функции $\{\psi_n(\cdot)\}_{n=1}^{\infty}$ на $[0, 1]$, вещественно аналитические на $(0, 1)$ и непрерывные на $[0, 1]$, и комплекснозначные функции $E_n(\cdot)$, аналитические в окрестности $[0, 1]$, такие, что

(i) среди $E_n(\cdot)$ нет постоянных функций;

(ii) $A(m)\psi_n(m) = E_n(m)\psi_n(m)$ для всех $m \in [0, 1]$, $n = 1, 2, \ldots$;

(iii) множество $\{\psi_n(m)\}_{n=1}^{\infty}$ для каждого m есть ортонормированный базис в $\mathcal{H}'$.

Тогда спектр A абсолютно непрерывен.

Доказательство. Пусть

$$\mathcal{H}_n = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi(m) = f(m)\psi_n(m);\ f \in L^2(M;\ d\mu)\}.$$

Тогда $\mathcal{H}_n$ — замкнутые попарно ортогональные подпространства и $\mathcal{H} = \bigoplus \mathcal{H}_n$, поскольку для любого $\psi \in \mathcal{H}$ справедливо следующее разложение (задача 134):

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} (\psi_n(m),\ \psi(m))\,\psi_n(m).$$

Более того, каждое $\mathcal{H}_n$ лежит в $D(A)$, причем $A[\mathcal{H}_n] \subset \mathcal{H}_n$. Рассмотрим унитарное отображение U_n: $\mathcal{H}_n \to L^2([0, 1], dx)$, задаваемое формулой $U_n(f(m)\psi_n(m)) = f(m)$. Тогда $A_n \equiv U_n A U_n^{-1}$ задается равенством

$$(A_n f)(m) = E_n(m) f(m). \tag{142}$$

Нужно доказать только, что спектр каждого A_n абсолютно непрерывен. Поскольку функция $E_n(\cdot)$ аналитична в окрестности $[0, 1]$ и непостоянна, у dE_n/dm только конечное число нулей, скажем $m_1, \ldots, m_{k-1}$ в $(0, 1)$. Пусть $m_0 = 0$ и $m_k = 1$. Тогда

$$L^2([0, 1], dx) = \bigoplus_{j=1}^{k} L^2((m_{j-1}, m_j), dx).$$

Оператор A_n оставляет каждое слагаемое инвариантным и действует на него по формуле (142). На каждом интервале (m_{j-1}, m_j) функция $E_n(\cdot)$ строго монотонна и либо возрастает, либо убывает. Рассмотрим случай, когда она возрастает. Введем α: $(E_n(m_{j-1}), E_n(m_j)) \to (m_{j-1}, m_j)$ соотношением $E_n(\alpha(\lambda)) = \lambda$. Функция α дифференцируема, и мера Стильтьеса $d\alpha$ абсолютно непрерывна относительно меры dx. В самом деле,

$$d\alpha = \left[\left(\frac{dE}{dm}\right)\Big|_{m=\alpha(\lambda)}\right]^{-1} d\lambda.$$

Пусть U — унитарный оператор из $L^2((m_{j-1}, m_j), dx)$ в $L^2((E_n(m_{j-1}), E_n(m_j)), d\lambda)$, заданный равенством

$$(Uf)(\lambda) = \left(\frac{d\alpha}{d\lambda}\right)^{1/2} f(\alpha(\lambda)).$$

Тогда

$$(UA_nU^{-1})\, g(\lambda) = \lambda g(\lambda).$$

Таким образом, мы построили явное спектральное представление $A_n \upharpoonright L^2([m_{j-1}, m_j], dx)$, для которого спектральная мера $d\alpha$ есть мера Лебега. Отсюда следует, что спектр каждого A_n, а потому и всего A абсолютно непрерывен. ∎

Вернемся теперь к анализу операторов Шредингера с периодическими потенциалами. Рассмотрим сначала одномерный случай с кусочно непрерывной функцией V, когда применимы методы теории дифференциальных уравнений, а затем обсудим более высокие размерности и более общие V.

Для пояснения идеи, лежащей в основе последующего анализа, предположим, что $V \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ обладает ограниченными производными, так что $-d^2/dx^2 + V$ переводит $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ в себя. Если $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, то

$$\left[\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V\right) f\right]^{\wedge}(p) = p^2 \hat{f}(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \hat{V}(p - p') \hat{f}(p')\, dp', \tag{143}$$

где интеграл в (143) есть просто формальный символ свертки обобщенной функции $\hat{V}$ с функцией $\hat{f}$. Предположим теперь, что V обладает периодом 2π (2π-периодичен). Тогда V имеет равномерно сходящийся ряд Фурье (см. теорему II.8)

$$V(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n e^{inx}, \tag{144}$$

где $\tilde{V}_n=\int\limits_{-\pi}^{\pi}V(x)\,e^{-inx}\frac{dx}{2\pi}$. Равенство (144) подсказывает, что

$$(2\pi)^{-1/2}\hat{V}(p)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n\delta(p-n), \tag{145}$$

ибо формальная подстановка (145) в формулу обращения Фурье даст (144). Точнее, (145) можно доказать следующим образом: если $f\in\mathscr{S}(\mathbb{R})$, то из равномерной сходимости в (144) следует, что

$$\int f(x)\,V(x)\,dx=\sqrt{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n\hat{f}(n),$$

откуда получается (145), если сходимость суммы понимать в смысле слабой $(\sigma(\mathscr{S}',\mathscr{S}))$ топологии на $\mathscr{S}'$.

Теперь, когда мы исследовали преобразование Фурье периодических обобщенных функций умеренного роста, можно воспользоваться этим и переписать (143) в следующем виде:

$$\left[\left(-\frac{d^2}{dx^2}+V\right)f\right]^{\wedge}(p)=p^2\hat{f}(p)+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n\hat{f}(p-n).$$

Таким образом, если $H=-d^2/dx^2+V$, то $\widehat{Hf}(p)$ зависит только от значений $\hat{f}(p-n)$, $n\in Z$. В итоге доказана

Теорема XIII.87 (разложение в прямой интеграл периодических операторов Шредингера — одномерное p-пространство). Пусть $\mathscr{H}'=l_2$ и $\mathscr{H}=\int\limits_{(-1/2,\,1/2]}^{\oplus}\mathscr{H}'\,dq$. Пусть для $q\in(-1/2,\,1/2]$

$$(H(q)\,g)_j=(q+j)^2g_j+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{V}_n g_{j-n},$$

где $\tilde{V}_n$ — коэффициенты ряда Фурье некоторой 2π-периодической функции $V\in C^\infty(\mathbb{R})$. Отобразим $L^2(\mathbb{R},dx)$ в $\mathscr{H}$ с помощью $[(Uf)(q)]_j=\hat{f}(q+j)$. Пусть $H=-d^2/dx^2+V$ действует в $L^2(\mathbb{R})$.

Тогда

$$UHU^{-1} = \int_{(-1/2,\ 1/2]}^{\oplus} H(q)\,dq.$$

Основываясь на таком варианте разложения в прямой интеграл, можно достаточно далеко продвинуться в анализе H, и такой подход будет основным при изучении многомерного случая. Однако в одномерном случае перевод теоремы XIII.87 на язык x-пространства дает несколько больше. И хотя теорему XIII.87 можно сформулировать прямо на языке x-пространства, мы предпочитаем дать независимое доказательство соответствующих фактов, используя теорему XIII.87 просто как наводящее соображение. Действительно, в случае $V=0$ оператор $H(q)$ обладает собственными значениями $(q+j)^2$ и собственными функциями, которые суть фурье-образы функций $\exp[i(q+j)x]$. Это наводит на мысль, что $H(q)$ как-то связан с оператором $-d^2/dx^2$ на $L^2([0,2\pi], dx)$, но с граничными условиями

$$\psi(2\pi) = e^{2\pi iq}\psi(0), \qquad \psi'(2\pi) = e^{2\pi iq}\psi'(0).$$

Лемма. Пусть $\mathscr{H}' = L^2([0,2\pi], dx)$. Пусть

$$\mathscr{H} = \int_{[0,\ 2\pi)}^{\oplus} \mathscr{H}' \frac{d\theta}{2\pi}. \tag{146}$$

Тогда отображение U: $L^2(\mathbb{R}, dx) \to \mathscr{H}$, задаваемое соотношением

$$(Uf)_\theta(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta n} f(x+2\pi n) \tag{147}$$

для θ и x в $[0, 2\pi)$, корректно определено для $f \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$ и однозначно продолжимо до унитарного оператора. Более того,

$$U\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)U^{-1} = \int_{[0,\ 2\pi)}^{\oplus} \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta \frac{d\theta}{2\pi}, \tag{148}$$

где $(-d^2/dx^2)_\theta$ есть оператор $-d^2/dx^2$ на $L^2([0,2\pi], dx)$ с граничными условиями вида

$$\psi(2\pi) = e^{i\theta}\psi(0), \qquad \psi'(2\pi) = e^{i\theta}\psi'(0).$$

Доказательство. Ясно, что сумма (147) сходится при $f \in \mathscr{S}$. Для доказательства принадлежности Uf пространству $\mathscr{H}$ вычислим $\|Uf\|$ для $f\in\mathcal{S}$·

$$\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{2\pi}\left|\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-in\theta}f(x+2\pi n)\right|^2dx\right)\frac{d\theta}{2\pi}=$$
$$=\int_0^{2\pi}\left[\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{j=-\infty}^{\infty}\overline{f(x+2\pi n)}\,f(x+2\pi j)\right)\int_0^{2\pi}e^{-i(j-n)\theta}\frac{d\theta}{2\pi}\right]dx=$$
$$=\int_0^{2\pi}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}|f(x+2\pi n)|^2\right)dx=\int_{-\infty}^{\infty}|f(x)|^2dx,$$

где мы применили теоремы Фубини и Планшереля. Итак, U корректно определен и однозначно продолжим до изометрии. Для того чтобы убедиться в его сюръективности, вычислим U^*. Для $g\in\mathcal{H}$ и $0\leqslant x\leqslant 2\pi$, $n\in Z$ определим

$$(U^*g)(x+2\pi n)=\int_0^{2\pi}e^{in\theta}g_\theta(x)\frac{d\theta}{2\pi}. \tag{149}$$

Прямое вычисление показывает, что это действительно формула для сопряженного к U. Более того,

$$\|U^*g\|_2^2=\int_{-\infty}^{\infty}|(U^*g)(y)|^2dy=\int_0^{2\pi}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}|(U^*g)(2\pi n+x)|^2\right)dx=$$
$$=\int_0^{2\pi}\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left|\int e^{in\theta}g_\theta(x)\frac{d\theta}{2\pi}\right|^2\right)dx=\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{2\pi}|g_\theta(x)|^2\frac{d\theta}{2\pi}\right)dx=\|g\|^2,$$

где мы применили равенство Парсеваля для рядов Фурье.

Для проверки соотношения (148) обозначим через A оператор, стоящий в его правой части. Покажем, что если $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R})$, то $Uf\in D(A)$ и $U(-f'')=A(Uf)$. Отсюда (148) будет вытекать в силу самосопряженности $-d^2/dx^2$ на $\mathcal{S}$ в существенном и самосопряженности A. Итак, пусть $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Тогда Uf дается сходящейся суммой (147), так что Uf бесконечно дифференцируема на $(0, 2\pi)$, причем $(Uf)'_\theta(x)=(Uf')_\theta(x)$ и аналогично для высших производных. Ясно также, что

$$(Uf)_\theta(2\pi)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-i\theta n}f(2\pi(n+1))=$$
$$=\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-i\theta(n-1)}f(2\pi n)=e^{i\theta}(Uf)_\theta(0).$$

Аналогично, $(Uf)'_\theta(2\pi)=e^{i\theta}(Uf_\theta)'(0)$. Таким образом, $(Uf)_\theta\in$ $\in D((-d^2/dx^2)_\theta)$ для каждого θ и

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta(Uf)=U(-f'')_\theta.$$

Отсюда заключаем, что $Uf\in D(A)$ и $A(Uf)=U(-f'')$. Это доказывает (148). ∎

Теорема XIII.88 (разложение в прямой интеграл периодических операторов Шредингера — одномерное x-пространство). Пусть V — ограниченная измеримая 2π-периодическая функция на $\mathbb{R}$. Для $\theta\in[0, 2\pi)$ пусть

$$H(\theta)=\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta+V(x)$$

— оператор в $L^2([0, 2\pi])$. Пусть U задан формулой (147). Тогда при разложении (146)

$$U\left(-\frac{d^2}{dx^2}+V\right)U^{-1}=\int_{[0,\,2\pi)}^{\oplus} H(\theta)\,\frac{d\theta}{2\pi}. \qquad (150)$$

Доказательство. Пусть V — не зависящий от θ оператор, действующий в слое $\mathscr{H}'=L^2([0, 2\pi), dx)$ по формуле

$$(V_\theta f)(x)=V(x)f(x), \quad 0\leqslant x\leqslant 2\pi.$$

Равенство (150) будет вытекать из теоремы XIII.85(g) и леммы, если мы сможем доказать, что

$$UVU^{-1}=\int_{[0,\,2\pi)}^{\oplus} V_\theta\,\frac{d\theta}{2\pi}. \qquad (151)$$

В силу (147), для $f\in\mathscr{S}$ с учетом периодичности V

$$(UVf)_\theta(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta}V(x+2\pi n)f(x+2\pi n)=$$
$$=V(x)\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta}f(x+2\pi n)=V_\theta(Uf)_\theta(x).$$

Это доказывает (151), а потому и (150). ∎

В результате анализ операторов $-d^2/dx^2+V$ с периодическим потенциалом V сводится к изучению $(-d^2/dx^2)_\theta+V$ при фиксированных значениях θ. Предварительно отметим, что справедлива такая

Лемма. (a) Резольвента $(-d^2/dx^2)_\theta$ для каждого $\theta\in[0, 2\pi)$ — компактный оператор.

(b) $\exp(-t(-d^2/dx^2)_{\theta=0})$ для $\theta=0$ — усиливающая положительность полугруппа (см. § 12).

(c) $[(-d^2/dx^2)_\theta+1]^{-1}$ — аналитическая операторнозначная функция θ в окрестности $[0, 2\pi)$.

Доказательство. Ниже мы докажем аналогичную лемму в многомерном случае, используя общие соображения, применимые и здесь. Однако сейчас легко получить простую явную формулу для $K_\theta \equiv [(-d^2/dx^2)_\theta + 1]^{-1}$. Пусть $f \in C_0^\infty(0, 2\pi)$. Пусть K — оператор, обратный $-d^2/dx^2+1$ и заданный на всем $L^2(\mathbb{R})$. Пусть $g = Kf$. В силу рассуждений в § IX.7, K — интегральный оператор с ядром $G(x-y)$, причем $\hat{G}(p) = (2\pi)^{-1/2}(p^2+1)^{-1}$. Можно провести прямое вычисление G (задача 137), которое приводит к следующему ответу:

$$g(x) \equiv (Kf)(x) = \frac{1}{2}\int e^{-|x-y|} f(y)\, dy. \tag{152}$$

Функции Kf и $K_\theta f$ суть решения одного и того же дифференциального уравнения $-u''(x) + u(x) = f(x)$ на $(0, 2\pi)$. Поэтому их разность $v = K_\theta f - Kf$ удовлетворяет уравнению $-v'' + v = 0$, так что

$$(K_\theta f)(x) = g(x) + ae^x + be^{-x}.$$

Поскольку $K_\theta f \in D((-d^2/dx^2)_\theta)$, константы a и b следует выбрать такими, чтобы $K_\theta f$ удовлетворяла граничным условиям

$$u(2\pi) = e^{i\theta}u(0), \quad u'(2\pi) = e^{i\theta}u'(0). \tag{153}$$

Прямое вычисление с помощью (152) дает

$$(K_\theta f)(x) = \int_0^{2\pi} G_\theta(x, y) f(y)\, dy,$$

$$G_\theta(x, y) = {}^1/_2 e^{-|x-y|} + \alpha(\theta) e^{x-y} + \beta(\theta) e^{y-x}, \tag{154}$$

$$\alpha(\theta) = {}^1/_2 (e^{2\pi - i\theta} - 1)^{-1}, \quad \beta(\theta) = {}^1/_2 (e^{2\pi + i\theta} - 1)^{-1}.$$

Теперь свойства $(-d^2/dx^2)_\theta$ видны прямо из (154). Поскольку функция $G_\theta(x, y)$ ограничена по x, y при каждом фиксированном θ,

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} |G_\theta(x, y)|^2\, dx\, dy < \infty,$$

т. е. K_θ есть оператор Гильберта — Шмидта, и потому он компактен, как и утверждалось в (а). Явный вид $G_{\theta=0}(x, y)$ показывает, что это ядро строго положительно. Аналогичным образом можно убедиться, что ядро оператора $[(-d^2/dx^2)_{\theta=0} + a]^{-1}$ также строго положительно для любого $a > 0$, и потому, в силу теоремы XIII.44 и предшествующего ей предложения, $\exp(-t(-d^2/dx^2)_{\theta=0})$ образуют усиливающую положительность полугруппу. Наконец, для доказательства (с) заметим, что формула (154) позволяет определить оператор Гильберта — Шмидта

K_θ для любых комплексных θ с $|\operatorname{Im}\theta| < 2\pi$, и потому $\theta \mapsto K_\theta$ — аналитическая функция по θ. ∎

На первый взгляд может показаться поразительным, что $K_\theta - K_{\theta'}$ есть оператор ранга два при любых θ и θ', но по существу этот факт отражает то, что индексы дефекта сужения $-d^2/dx^2 \upharpoonright C_0^\infty(0, 2\pi)$ равны $\langle 2, 2\rangle$, а потому K_θ полностью определяется независимым от θ образом на замыкании пространства $(-d^2/dx^2+1)[C_0^\infty(0, 2\pi)]$ коразмерности 2.

Анализ, аналогичный только что проведенному, показывает, что функция $((-d^2/dx^2)_\theta + a)^{-1}$ аналитична в области $|\operatorname{Im}\theta| < 2\pi\sqrt{a}$, так что отображение $\theta \mapsto (-d^2/dx^2)_\theta$ можно продолжить до целого аналитического семейства. Это семейство не относится ни к типу (A), ни к типу (B).

Вооружившись доказанной леммой, мы подготовились к полному анализу операторов

$$H(\theta) = \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)_\theta + V. \tag{155}$$

Теорема XIII.89. Пусть V — кусочно непрерывная 2π-периодическая функция. Тогда

(a) спектр $H(\theta)$ чисто дискретен, а операторнозначная функция $\theta \mapsto H(\theta)$ вещественно аналитична по θ;

(b) $H(\theta)$ и $H(2\pi-\theta)$ антиунитарно эквивалентны относительно обычного комплексного сопряжения; в частности, их собственные значения совпадают, а собственные функции комплексно сопряжены;

(c) при $\theta \in (0, \pi)$ или $(\pi, 2\pi)$ оператор $H(\theta)$ имеет только невырожденные собственные значения;

(d) пусть $E_n(\theta)$ $(n = 1, 2, \ldots;\ 0 \leqslant \theta \leqslant \pi)$ есть n-е собственное значение $H(\theta)$; функция $E_n(\theta)$ аналитична в $(0, \pi)$ и непрерывна при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$;

(e) для нечетных (соответственно четных) n функция $E_n(\theta)$ строго монотонно возрастает (соответственно убывает) при изменении θ от 0 до π; в частности,

$$E_1(0) < E_1(\pi) \leqslant E_2(\pi) < < E_2(0) \leqslant \ldots \leqslant E_{2n-1}(0) < < E_{2n-1}(\pi) \leqslant E_{2n}(\pi) < E_{2n}(0) \leqslant \ldots,$$

см. рис. XIII.13;

(f) собственные функции $\psi_n(\theta)$ можно выбрать аналитическими по $\theta \in (0, \pi) \cup (\pi, 2\pi)$ и непрерывными в π и 0 (причем $\psi_n(0) = \psi_n(2\pi)$).

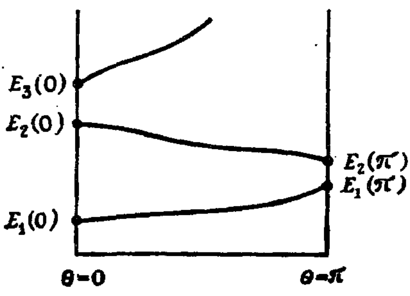


Рис. XIII.13. Зоны одномерных операторов Шредингера.

Доказательство. (a) следует прямо из леммы и основных теорем о возмущениях (теоремы XII.11 и XIII.64).

(b) При $V=0$ это простое следствие определения $(-d^2/dx^2)_\theta$. Поскольку $\overline{V\psi}=V\overline{\psi}$, сформулированные утверждения справедливы и при $V\neq 0$.

(c) Если E — собственное значение $H(\theta)$ при $\theta\in(0, \pi)$, то уравнение $-u''+Vu=Eu$ обладает решением, удовлетворяющим граничному условию (153). Функция $\bar{u}$ — решение этого же уравнения, но удовлетворяющее другим граничным условиям. Поскольку уравнение $-u''+Vu=Eu$ имеет только два линейно независимых решения и не все они удовлетворяют (153), нужное решение всего одно.

(d) Рассмотрим $E_1(0)$. Это простое собственное значение $H(0)$, поскольку $H(0)$ порождает полугруппу, сохраняющую положительность. Так как $H(\theta)$ аналитически зависит от θ вблизи $\theta=0$, можно найти собственное значение $\tilde{f}_1(\theta)$ оператора $H(\theta)$, аналитически зависящее от $\theta\in[0, \varepsilon)$ и такое, что $\tilde{f}_1(0)=E_1(0)$. Пусть $\varepsilon<\pi$. Единственной причиной, препятствующей аналитическому продолжению через точку $\theta=\varepsilon$, может быть лишь стремление $\tilde{f}_1(\theta)$ к ∞ при $\theta\uparrow\varepsilon$. В самом деле, если $\tilde{f}_1(\theta)$ не стремится к ∞, то, в силу неравенства $H(\theta)\geqslant-\|V\|_\infty$, должна существовать последовательность $\theta_n\to\varepsilon$, для которой $\tilde{f}_1(\theta_n)\to\tilde{E}$. Но тогда $\tilde{E}$ есть собственное значение $H(\varepsilon)$. В силу (c), это простое собственное значение, так что для $|\theta-\varepsilon|<\delta$ существует единственное собственное значение $g(\theta)$ оператора $H(\theta)$ около $\tilde{E}$ и функция g аналитична при $|\theta-\varepsilon|<\delta$. В частности, $g(\theta_n)=$ $=\tilde{f}_1(\theta_n)$ для больших n, и g дает аналитическое продолжение $\tilde{f}_1$ за точку ε. Таким образом, доказательство существования аналитического продолжения функции $\tilde{f}_1$ на весь отрезок $[0, \pi)$ сводится к доказательству конечности $\tilde{f}_1(\theta)$ при изменении θ внутри этого отрезка. Покажем сначала, что у $H(\theta)$ нет собственных значений, меньших $\tilde{f}_1(\theta)$, при $\theta\in[0, \varepsilon)$. Если бы такое собственное значение было, мы могли бы продолжить его обратно в точку $\theta=0$; это продолжение было бы конечным при уменьшении θ, поскольку оно всегда было бы строго меньше $\tilde{f}_1(\theta)$ в силу простоты собственных значений и в силу соображений, приведенных выше. В таком случае в $\theta=0$ мы нашли бы собственное значение, меньшее E_1, что невозможно. Теперь, поскольку $\tilde{f}_1(\theta)$ — наименьшее собственное значение $H(\theta)$ при $\theta\in[0, \varepsilon)$, оно не стремится к ∞ и при $\theta\to\varepsilon$. Таким образом, $\tilde{f}_1(\theta)$ обладает продолжением на весь отрезок $[0, \pi]$, и это продолжение — наименьшее собственное значение $H(\theta)$, т. е. равно $E_1(\theta)$.

Посмотрим теперь на $E_2(0)$. Оно может быть двукратно вырожденным; например, это так при $V=0$. Если это так, то при $\theta\neq 0$ вырождения быть не должно, ибо спектр $H(\theta)$ при $\theta\neq 0$ прост. По теории возмущений, охватывающей случай вырождения, собственное значение (или значения, если $E_2(0)$ вырожденно) около $E_2(0)$ задается аналитической функцией (функциями). Пусть $\tilde{f}_2(\theta)$ — такая функция, если $E_2(0)$ — простое собственное значение, и меньшая из таких функций, если $E_2(0)$ вырожденно. Повторяя приведенные выше аргументы, можно продолжить $\tilde{f}_2(0)$ на весь отрезок $[0, \pi]$, и это даст второе собственное значение $E_2(\theta)$. Точно так же можно рассмотреть и все остальные собственные значения.

(e) Это наиболее глубокая часть теоремы, и потому мы дадим подробное доказательство. Сначала покажем, что $E_1(0)\leqslant E_1(\theta)$ при всех θ. В связи с тем что полугруппа $\exp[-tH(0)]$ усиливает положительность, собственный вектор $\psi_1(0)$, отвечающий $E_1(0)$, строго положителен и, в силу граничных условий, допускает периодическое продолжение на все $\mathbb{R}$. Фиксируем целое k и рассмотрим в качестве $H^{(k)}(0)$ оператор $-d^2/dx^2+V$ на $L^2(-2\pi k, 2\pi k)$ с периодическими граничными условиями. В таком случае периодически продолженный $\psi_1(0)$ есть строго положительный собственный вектор $H^{(k)}(0)$, и потому $E_1(0)=\inf\sigma(H^{(k)}(0))$ (см. § XIII.12). Тогда $(f, (-d^2/dx^2+V)f)=(f, H^{(k)}(0)f)\geqslant E_1(f, f)$, если $f\in C_0^\infty(-2\pi k, 2\pi k)$, и потому $-d^2/dx^2+V\geqslant E_1$ на $L^2(\mathbb{R})$. Воспользовавшись разложением в прямой интеграл, получаем, что $H(\theta)\geqslant E_1(0)$ для почти всех θ, значит, $E_1(\theta)\geqslant E_1(0)$ для почти всех θ, а поскольку $E_1(\theta)$ непрерывно зависит от θ, $E_1(\theta)\geqslant E_1(0)$ для всех $\theta\in(0, 2\pi)$.

Введем теперь важную величину $D(E)$, связанную с дифференциальным уравнением

$$-u''+Vu=Eu. \qquad (156)$$

Пусть $u_1(E, x)$ — решение уравнения (156) с $u_1(0)=1$, $u_1'(0)=0$, а $u_2(E, x)$ — его решение с $u_2(0)=0$, $u_2'(0)=1$. Тогда, как известно из стандартной теории обыкновенных дифференциальных уравнений, $u_i(E, x)$ аналитически зависит от E при любом x. Пусть $M(E)$ — аналитическая 2×2-матрица

$$M(E)=\begin{bmatrix} u_1(E, 2\pi) & u_2(E, 2\pi) \\ u_1'(E, 2\pi) & u_2'(E, 2\pi)\end{bmatrix}. \qquad (157)$$

Дискриминантом уравнения $-u''+Vu$ называют функцию

$$D(E)\equiv \operatorname{Tr}(M(E))=u_1(E, 2\pi)+u_2'(E, 2\pi).$$

Матрица $M(E)$ — довольно естественный объект, ибо если v удовлетворяет (156), то

$$\begin{bmatrix} v(2\pi) \\ v'(2\pi) \end{bmatrix} = M(E) \begin{bmatrix} v(0) \\ v'(0) \end{bmatrix}.$$

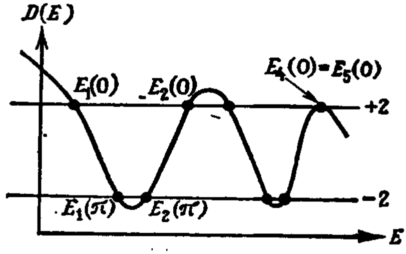


Рис. XIII.14. Типичный дискриминант.

В частности, уравнение $H(\theta)\psi = E\psi$ обладает ненулевым решением тогда и только тогда, когда $M(E)$ обладает собственным значением $e^{i\theta}$. Но детерминант $M(E)$ равен 1, поскольку $W(x) = u_1(E, x)u_2'(E, x) - u_1'(E, x)u_2(E, x)$ — константа, так что собственные значения $M(E)$ суть λ и λ^{-1} и $D(E) = \lambda + \lambda^{-1}$. Отсюда мы заключаем, что E *есть собственное значение* $H(\theta)$ *тогда и только тогда, когда* $D(E) = 2\cos\theta$. Мы будем доказывать, что график $D(E)$ имеет примерно такой вид, как на рис. XIII.14.

Мы уже доказали, что $E_1(0) \leqslant E_1(\theta)$ для всех θ, так что $D(E)$ не может принимать никакое значение из $[-2, 2]$ при $E < E_1(0)$. Но $D(E) = 2$ при $E = E_1(0)$. Когда θ изменяется от 0 до π, $D(E_1(\theta))$ изменяется от 2 до -2. Значит, функция $E_1(\cdot)$ должна строго монотонно убывать, поскольку она имеет обратную функцию $\arccos(^1/_2 D(E_1(\theta))) = \theta$. При $\theta = \pi$ имеем $D(E_1(\pi)) = -2$. График D в конечном счете поворачивает (поскольку у $H(\pi)$ есть дополнительное собственное значение), так что следующее значение $D(\theta)$ из $[-2, 2]$ равно -2. Оно отвечает точке $E_2(\pi)$, а затем D пробегает все значения от -2 до $+2$ при изменении θ от π до 0. В итоге и возникает картина типа изображенной на рис. XIII.14. Единственная тонкость — это доказательство того, что в точках $+2$ или -2 поворота графика D собственное значение $H(0)$ или $H(\pi)$ двукратно. Но ведь если $D(E)$ имеет точку поворота при $E = E_0$, причем в ней $D(E_0) = +2$, то для всех θ, близких к 0, у $H(\theta)$ два собственных значения вблизи E_0 в соответствии с тем, что у уравнения $D(E) = 2\cos\theta$ два решения около $E = E_0$. Согласно аналитической теории возмущений, E_0 должно быть двукратным собственным значением $H(0)$.

(f) Это утверждение вытекает из аналитической теории возмущений § XII.2. ∎

Читатель, возможно, заметил, что мы тщательно избегали утверждения об аналитичности $E_n(\theta)$ около $\theta = \pi$ или $\theta = 0$, хотя оно и справедливо. Однако если $E_n(\pi)$ — двукратно вырожденное собственное значение, то его продолжение через точку $\theta = \pi$ может оказаться равным $E_{n+1}(\theta)$ или $E_{n-1}(\theta)$ (см. рис. XIII.15).

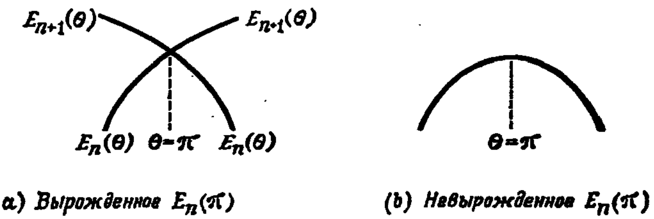


Рис. XIII.15. Пересекающиеся зоны.

Аналогичное явление возможно при $\theta=0$, если отождествлять θ и $\theta-2\pi$.

Теперь мы можем собрать утверждения теорем XIII.85, 86, 88 и 89 и получить такую теорему:

Теорема XIII.90. Пусть V — кусочно непрерывная функция с периодом 2π. Пусть $H=-d^2/dx^2+V$ на $L^2(\mathbb{R}, dx)$. Пусть $E_1(0)$, $E_2(0)$, ... — собственные значения соответствующего оператора на $(0, 2\pi)$ с периодическими граничными условиями, и пусть $E_1(\pi)$, ... — собственные значения с антипериодическими граничными условиями. Положим

$$\alpha_n=\begin{cases} E_n(0), & n \text{ нечетно}, \\ E_n(\pi), & n \text{ четно}, \end{cases} \qquad \beta_n=\begin{cases} E_n(\pi), & n \text{ нечетно}. \\ E_n(0), & n \text{ четно}. \end{cases}$$

Тогда:

(a) $\sigma(H)=\bigcup\limits_{n=1}^{\infty}[\alpha_n, \beta_n]$;

(b) у H нет собственных значений;

(c) спектр H абсолютно непрерывен.

Доказательство. (a) Поскольку $E_n(\theta)$ непрерывны, при заданных θ_0 и ε

$$\{\theta\in(0, 2\pi)\,|\,|\theta-\theta_0|<\delta\}\subset\{\theta\in(0, 2\pi)\,|\,|E_n(\theta)-E_n(\theta_0)|<\varepsilon\}$$

с некоторым δ, так что по теореме XIII.85 $\sigma(H)=\bigcup\limits_n[\alpha_n, \beta_n]$.

(b) Ни одна из функций E_n не равна постоянной, ибо каждая E_n строго монотонна. Следовательно, для каждого E_0 множество $\{\theta\,|\,E_n(\theta)=E_0\}$ содержит не более двух точек. Мера такого множества равна нулю, так что по теореме XIII.86 E_0 не является собственным значением.

(c) следует из теорем XIII.86 и 89. ∎

Заметим, что $-d^2/dx^2+V$ имеет простое разложение по собственным функциям, но, поскольку дальше приводится соответствующий общий результат, относящийся к n-мерному случаю, здесь входить в подробности мы не будем.

Самая поразительная черта теоремы XIII.90 в том, что в $\sigma(H)$ существуют щели $(\beta_1, \alpha_2), \ldots, (\beta_n, \alpha_{n+1}), \ldots$. Конечно, мы знаем только, что $\beta_n \leqslant \alpha_{n+1}$, и некоторых из «щелей» может на самом деле не оказаться. Действительно, если $V=0$, то щелей нет вообще, и для того, чтобы каждая из щелей существовала, нужно накладывать дополнительные требования на V. Красота проведенного анализа — в возможности свести проблему существования щели к вопросу о вырожденности некоторого собственного значения.

Пример 1 (уравнение Матье). Пусть

$$V(x) = \mu \cos x$$

с $\mu \neq 0$. Мы утверждаем, что $\alpha_{n+1} \neq \beta_n$ для всех n, т.е. реализуется каждая щель. Пусть H_0^{P} (соответственно $H_0^{\mathrm{A}}) = -d^2/dx^2$ на $L^2(0, 2\pi)$ с периодическими (соответственно антипериодическими) граничными условиями. Нам надо только показать, что $H_0^{\mathrm{P}}+V$ и $H_0^{\mathrm{A}}+V$ не имеют двукратных собственных значений. Приведем доказательство для $H_0^{\mathrm{P}}+V$; доказательство для $H_0^{\mathrm{A}}+V$ аналогично. Рассмотрим функции $\varphi_n(x) = (2\pi)^{-1/2}\exp(inx)$. Тогда $\varphi_n \in D(H_0^{\mathrm{P}})$ и $H_0^{\mathrm{P}}\varphi_n = n^2\varphi_n$. Если ψ есть решение уравнения $(H_0^{\mathrm{P}}+V)\psi = E\psi$ и $a_n = (\varphi_n, \psi)$, то

$$2(n^2-E)a_n + \mu(a_{n+1}+a_{n-1}) = 0. \tag{158a}$$

Если η тоже решение $(H_0^{\mathrm{P}}+V)\eta = E\eta$ и $b_n = (\varphi_n, \eta)$, то

$$2(n^2-E)b_n + \mu(b_{n+1}+b_{n-1}) = 0. \tag{158b}$$

Исключая из (158) член (n^2-E) и пользуясь условием $\mu \neq 0$, получаем $b_n a_{n+1} - a_n b_{n+1} = a_n b_{n-1} - b_n a_{n-1}$, так что $b_n a_{n+1} - a_n b_{n+1} = c$, где c — некоторая константа. Поскольку η, $\psi \in L^2$, $\sum a_n^2 < \infty$, $\sum b_n^2 < \infty$ и $a_n \to 0$, $b_n \to 0$ при $n \to \infty$. Поэтому c должно быть нулем и

$$a_n b_{n+1} = b_n a_{n+1}. \tag{159}$$

Если любые два последовательных a_j равны нулю, то, в силу (158a), равны нулю все a_j, а потому при любом n либо $a_n \neq 0$, либо $a_{n+1} \neq 0$. Аналогичное утверждение справедливо и относительно b_n. Предположим теперь, что E двукратно. Поскольку $\cos x$ — четная функция, в качестве решения уравнения $-\psi''+V\psi = E\psi$ можно выбрать четное ψ и нечетное η, ибо если E — вырожденное собственное значение $H_0^{\mathrm{P}}+V$, то все решения периодичны. Поскольку η нечетно, $b_0 = \int_{-\pi}^{\pi} \eta(x)\,dx = 0$. Таким образом, согласно приведенному выше замечанию, $b_1 \neq 0$. Поскольку ψ четно, $a_n = a_{-n}$, и потому, в частности, ввиду (158а)

$$-Ea_0 + \mu a_1 = 0.$$

Отсюда $a_0 \neq 0$, ибо если это не так, то a_1 тоже должно быть нулем, а это противоречит сказанному выше. Итак, $a_0 b_1 \neq 0$, в то время как $a_1 b_0 = 0$. Но это нарушает (159), откуда вытекает, что все собственные значения $H_0^{\mathrm{P}} + V$ невырожденны.

В задаче 139 приведен другой пример, когда можно получить асимптотическую формулу для $l_n = \alpha_{n+1} - \beta_n$ при $n \to \infty$, которая показывает, что по крайней мере для больших n (где $l_n \neq 0$) существует очень много щелей. Кроме того, справедливы следующие общие результаты, доказательства которых можно найти в ссылках, приведенных в Замечаниях.

Теорема XIII.91. Пусть V — периодический потенциал с периодом 2π. Тогда:

(a) если нет ни одной щели, V постоянен;

(b) если имеется только одна щель, V — эллиптическая функция Вейерштрасса;

(c) если отсутствуют все нечетные щели (т. е. у $H_0^{\mathrm{A}} + V$ есть только вырожденные собственные значения), то V имеет период π. Более общо, если для фиксированного n отсутствуют все щели (β_k, α_{k+1}) с $k \neq 2^n m$ $(m = 1, 2, \ldots)$, то V имеет период $2^{-n}(2\pi)$, и справедливо обратное утверждение.

(d) Если существует лишь конечное число щелей, то V — вещественно аналитическая функция на $\mathbb{R}$.

(e) Введем топологию в пространстве Y всех функций класса C^∞ с периодом 2π на $\mathbb{R}$ посредством полунорм $\|f\|_n = \|D^n f\|_\infty$, $n = 0, 1, \ldots$. Тогда множество потенциалов V, для которых *все* щели ненулевые, есть плотное G_δ-множество в Y (см. обсуждение понятия «почти всюду в смысле Бэра» в замечаниях к § III.5).

Имеют место некоторые общие результаты о том, когда два потенциала V и W порождают одинаковые энергетические зоны.

Теорема XIII.92. Пусть V и W — два таких 2π-периодических потенциала, что операторы $-d^2/dx^2 + V$ и $-d^2/dx^2 + W$ на $[0, 2\pi]$ с периодическими граничными условиями имеют одинаковые собственные значения. Тогда их энергетические зоны одинаковы.

Доказательство. Опишем основные идеи доказательства. Детали можно найти в ссылках, приводимых в Замечаниях. Пусть $D_V(E)$ и $D_W(E)$ — соответствующие дискриминанты. Имея в виду анализ, проведенный при доказательстве теоремы XIII.89, достаточно доказать, что они равны. Мы утверждаем, что

$$|D_V(E)|+|D_W(E)|\leqslant C_1\exp(C_2\sqrt{|E|}), \tag{160}$$

$$D_V(E)/2\cos(2\pi\sqrt{E})\to 1 \quad \text{при} \quad E\to i\infty, \tag{161}$$

$$D_W(E)/2\cos(2\pi\sqrt{E})\to 1 \quad \text{при} \quad E\to i\infty \tag{162}$$

Откладывая доказательство этих соотношений, покажем, что $D_V=D_W$. В силу (160) и теоремы Адамара из комплексного анализа,

$$2-D_V(E)=C_V\prod_{j=1}^{\infty}(1-E_j(V)^{-1}E),\ 2-D_W(E)=C_W\prod_{j=1}^{\infty}(1-E_j(W)^{-1}E),$$

где $E_j(V)$ — нули $D_V(E)-2$. По условию теоремы, нули $2-D_V$ и $2-D_W$ одинаковы. Но тогда из (161) и (162) следует, что $(2-D_V)/(2-D_W)\to 1$ при $E\to i\infty$, так что $D_V=D_W$.

Соотношения (160)—(162) можно доказать, анализируя решения $u_j(E, x)$. Достаточно доказать, что они служат решениями такого, например, интегрального уравнения:

$$u_1(E, x)=\cos(x\sqrt{E})+\frac{1}{\sqrt{E}}\int_0^x \sin((x-y)\sqrt{E})\,V(y)\,u_1(E, y)\,dy.$$

Отсюда путем повторных итераций можно получить (160)—(162). ∎

На первый взгляд может показаться, что существует не так уж много пар V, W, для которых $D_V=D_W$. На самом деле все наоборот; ссылки по поводу двух следующих теорем приводятся в Замечаниях.

Теорема XIII.93. Пусть $V(t, x)$ есть решение следующего уравнения в частных производных:

$$\frac{\partial V}{\partial t}=3V\frac{\partial V}{\partial x}-\frac{1}{2}\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}, \tag{163}$$

и $V(0, x)$ — периодическая функция с периодом 2π. Тогда $V(t, x)$ есть 2π-периодическая функция при каждом t, приводящая к энергетическим зонам, не зависящим от t.

Уравнение (163) называется **уравнением Кортевега — де Фриза**.

Теорема XIII.94. Введем топологию в множестве 2π-периодических C^∞-функций на $\mathbb{R}$ при помощи полунорм $\|D^\alpha f\|_\infty$. Фиксируем V и предположим, что спектр оператора $-d^2/dx^2+V$ содержит n щелей (n может быть бесконечным). Тогда множество $\{W\,|\,D_V=D_W\}$ гомеоморфно n-мерному тору.

В одномерном случае довольно много можно сказать о глобальных аналитических свойствах $E_n(\theta)$.

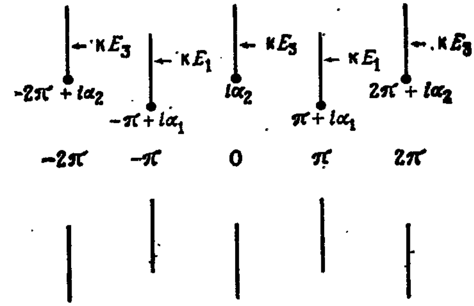


Рис. XIII.16. Римановы поверхности энергетической зоны; $n=2$.

Теорема XIII.95 (теорема Кона). Предположим, что все энергетические щели в одномерной задаче реализуются. Тогда функции $E_n(\theta)$ суть ветви одной многолистной функции, не имеющей других особенностей, кроме точек ветвления типа квадратного корня на прямых $\operatorname{Im}\theta = m\pi$, $m=0, \pm 1, \ldots$. Точнее, существуют положительные числа $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$, такие, что риманова поверхность функции $E(\theta)$ может быть описана следующим образом: $E(\theta)$ равна $E_n(\theta)$ на n-м листе с разрезами по линиям $\bigcup\limits_m [(2m+1)\pi] \pm \pm i(\alpha_n, \infty)$ и $\bigcup\limits_m [2m\pi] \pm i(\alpha_{n-1}, \infty)$ при нечетном n и по $\bigcup\limits_m [2m\pi] \pm \pm i(\alpha_n, \infty)$ и $\bigcup\limits_m [(2m+1)\pi] \pm i(\alpha_{n-1}, \infty)$ при четном n; n-й и $(n+1)$-й листы склеены вдоль берегов разрезов $2m\pi \pm i(\alpha_n, \infty)$ (n четно) и $(2m+1)\pi \pm i(\alpha_n, \infty)$ (n нечетно); см. рис. XIII.16.

Доказательство этой теоремы можно найти в ссылках, приводимых в Замечаниях.

Обратимся теперь к общему n-мерному случаю. Разложение с помощью прямого интеграла может быть проведено как в x-, так и в p-пространстве без существенных изменений. Главную трудность будет представлять анализ слоев H (обобщение теоремы XIII.89), ибо этот анализ существенно опирался на простоту собственных значений $H(\theta)$, чего не будет в многомерном случае. Дополнительное осложнение возникает из-за того, что в случае многих переменных собственные значения не обязательно аналитичны (в смысле однозначных функций) в вырожденных точках: см. пример в замечаниях к § XII.1. Оказывается, все эти проблемы легче разрешить, если проводить анализ слоев в p-пространстве.

При обсуждении n-мерного случая мы хотим допустить потенциалы V с локальными особенностями. Критерии, сформулированные в § X.2, неприменимы, если V неограничен, поскольку такие периодические потенциалы не могут лежать ни в каком L^p+L^∞ с $p<\infty$; но если $V\in L^p$ для всех ограниченных множеств и периодичен, то он равномерно локально принадлежит L^p в смысле следующего определения.

Определение. Измеримая функция V на $\mathbb{R}^n$ называется **равномерно локально лежащей в** L^p, если

$$\int_G |V(x)|^p d^n x \leqslant A$$

для любого единичного куба C с не зависящей от C постоянной A.

Теория возмущений § X.2 обобщается на равномерно локально лежащие в L^p (с некоторым p) потенциалы с помощью следующего метода локализации.

Теорема XIII.96. Пусть $p=2$ при $n\leqslant 3$, $p>2$ при $n=4$ и $p>n/2$ при $n\geqslant 5$. Тогда любая вещественнозначная функция на $\mathbb{R}^n$, равномерно локально лежащая в L^p, определяет $-\Delta$-ограниченный оператор с нулевой относительной гранью.

Доказательство. Пусть q таково, что $p^{-1}+q^{-1}=1/2$. В § X.2 было доказано, что для любого ε существует такое A_ε, что

$$\|\varphi\|_q^2 \leqslant \varepsilon \|\Delta\varphi\|_2^2 + A_\varepsilon \|\varphi\|_2^2. \tag{164}$$

Пусть для любого куба C

$$\|\varphi\|_{r;\,C}^r \equiv \int_C |\varphi(x)|^r d^n x.$$

Пусть C — единичный куб, и пусть C' — куб с ребром 3 и тем же центром, что и C. Пусть η есть C^∞-функция с носителем в C', тождественно равная 1 на C. В силу (164),

$$\begin{aligned}\|\varphi\|_{q;\,C}^2 \leqslant \|\eta\varphi\|_q^2 \leqslant \varepsilon\|\Delta(\eta\varphi)\|_2^2 + A_\varepsilon\|\eta\varphi\|_2^2 \leqslant \\ \leqslant 3\varepsilon\|\Delta\varphi\|_{2;\,C'}^2 + B\|\nabla\varphi\|_{2;\,C'}^2 + D\|\varphi\|_{2;\,C'}^2,\end{aligned} \tag{165}$$

где мы воспользовались равенством $\Delta(\eta\varphi)=\varphi\Delta\eta+\eta\Delta\varphi+2\nabla\eta\cdot\nabla\varphi$, неравенством треугольника, неравенством $(a+b+c)^2\leqslant 3(a^2+b^2+c^2)$ и тем, что η, $\nabla\eta$ и $\Delta\eta$ — ограниченные функции с носителем в C'. Заметим, что, поскольку различные $\|D^2\eta\|_\infty$ можно выбрать независимо от C, (165) справедливо с константами, не зависящими от C. Пусть C_α для $\alpha\in Z^n$ — единичный куб с центром α и C'_α — соответствующий куб C'. Тогда, поскольку V равномерно локально лежит в L^p,

$$|||V|||^2 \equiv \sup_\alpha \|V\|_{p;\,C_\alpha}^2 < \infty,$$

и потому

$$\|V\varphi\|_2^2=\sum_\alpha\|V\varphi\|_{2;\,C_\alpha}^2\leqslant\sum_\alpha\|V\|_{p;\,C_\alpha}^2\|\varphi\|_{q;\,C_\alpha}^2\leqslant$$
$$\leqslant|||V|||^2\sum_\alpha\left(3\varepsilon\|\Delta\varphi\|_{2;\,C'_\alpha}^2+B\|\nabla\varphi\|_{2;\,C'_\alpha}^2+D\|\varphi\|_{2;\,C'_\alpha}^2\right)=$$
$$=|||V|||^2\,3^n(3\varepsilon\|\Delta\varphi\|_2^2+B\|\nabla\varphi\|_2^2+D\|\varphi\|_2^2)\leqslant$$
$$\leqslant|||V|||^2\,3^n(4\varepsilon\|\Delta\varphi\|_2^2+(D+{}^1/_4\varepsilon^{-1}B)\|\varphi\|_2^2).$$

На предпоследнем шаге мы воспользовались тем, что всякая точка $x\in\mathbb{R}^n$, не лежащая на границе какого-нибудь C_α, лежит точно в 3^n кубах C'_α, а на последнем — неравенством

$$\|\nabla\varphi\|_2^2\leqslant\delta\|\Delta\varphi\|_2^2+{}^1/_4\delta^{-1}\|\varphi\|_2^2,$$

которое в силу теоремы Планшереля следует из числового неравенства $a\leqslant\delta a^2+{}^1/_4\delta^{-1}$. ∎

Отметим, что если V равномерно локально лежит в L^p при некотором $p>n/2$, то это же автоматически справедливо для $L^{n/2}$, поэтому мы и сформулировали предыдущую теорему для $p>n/2$.

Обладая таким критерием, можно дать такое доказательство следующей теоремы, которое лишь обозначениями отличается от соответствующего одномерного результата (теоремы XIII.88).

Теорема XIII.97. Пусть $a_1, \ldots, a_n$ — линейно независимые векторы в $\mathbb{R}^n$, а V — вещественнозначная функция на $\mathbb{R}^n$, такая, что

(i) $V(x+a_i)=V(x)$, $i=1, \ldots, n$;

(ii) $\int\limits_Q|V(x)|^p\,d^nx<\infty$, где Q — **элементарная ячейка**

$$Q=\left\{x\in\mathbb{R}^n\,\middle|\,x=\sum_{i=1}^n t_ia_i,\ 0\leqslant t_i<1\right\},$$

и $p=2$ при $n\leqslant3$, $p>2$ при $n=4$, $p=n/2$ при $n\geqslant5$. Пусть $H^0(\theta)$ для каждого $\theta\in[0, 2\pi)^n$ — оператор $-\Delta$ на $\mathscr{H}'\equiv\equiv L^2(Q, d^nx)$ с граничными условиями

$$\varphi(x+a_j)=e^{i\theta_j}\varphi(x),\qquad \frac{\partial\varphi}{\partial y_j}(x+a_j)=e^{i\theta_j}\frac{\partial\varphi}{\partial y_j}(x)\tag{166}$$

для всех x, для которых x, $x+a_j\in\overline{Q}$ (т. е. для x на соответствующих гранях ∂Q с координатами y_j, определяемых разложением $x=\sum y_ja_j$). Пусть

$$\mathscr{H}=\int_{[0,\,2\pi)^n}^{\oplus}\mathscr{H}'\,\frac{d^n\theta}{(2\pi)^n},$$

и пусть преобразование U': $L^2(\mathbb{R}^n, d^n x) \to \mathcal{H}$ задано на $\mathcal{S}$ соотношением

$$(U'f)_\theta(\mathrm{x}) = \sum_{\mathrm{m}\in\mathbb{Z}^n} e^{-i\theta\cdot\mathrm{m}} f(\mathrm{x} + \sum m_i \mathrm{a}_i)$$

и продолжено на все L^2 до унитарного оператора U. Тогда:

(a) для почти всех $\theta \in [0, 2\pi)^n$ функция V определяет на $L^2(Q, d^n x)$ ограниченный относительно $H^{(0)}(\theta)$ оператор умножения с нулевой относительной гранью;

(b) $U(-\Delta + V)U^{-1} = \int_{[0, 2\pi)^n}^{\oplus} H(\theta) \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}$, где $H(\theta) = H^{(0)}(\theta) + V$.

Отметим, что можно доказать $H^{(0)}(\theta)$-ограниченность V с нулевой относительной гранью не только почти всюду, но и поточечно. Это достигается, например, с помощью рассуждений, основанных на свойствах аналитичности.

Одно из следствий этой теоремы — существование разложения по собственным функциям оператора H в смысле § XI.6:

Теорема XIII.98. Каждый $H(\theta)$ обладает полной системой собственных функций $\psi_m(\theta; \mathrm{x})$, отвечающих собственным значениям $E_m(\theta)$. Если с помощью граничных условий (166) продолжить $\psi_m(\theta; \mathrm{x})$ на все $\mathbb{R}^n$ и для $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ положить

$$\tilde{\varphi}(m; \theta) = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi_m(\theta; \mathrm{x})}\, \varphi(\mathrm{x})\, d^n x,$$

то

(a) $\int_{\mathbb{R}^n} |\varphi(\mathrm{x})|^2 d^n x = \sum_m \int_{[0, 2\pi)^n} |\tilde{\varphi}(m; \theta)|^2 \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}$;

(b) $\varphi(\mathrm{x}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \sum_m \int_{[0, 2\pi)^n} \tilde{\varphi}(m; \theta)\, \psi_m(\theta; \mathrm{x})\, d^n\theta$;

(c) $H = -\Delta + V$ при всех $\varphi \in D(H)$ обладает свойством

$$\widetilde{H\varphi}(m; \theta) = E_m(\theta)\, \tilde{\varphi}(m; \theta),$$

где операция $\sim$ считается продолженной на все $L^2(\mathbb{R}^n)$ по непрерывности;

(d) операция $\sim$ отображает $L^2(\mathbb{R}^n, d^n x)$ *на* $\bigoplus_m L^2([0, 2\pi)^n, d^n\theta)$.

Доказательство. Полную систему собственных функций $H^{(0)}(\theta)$ можно найти в явном виде, а именно

$$\psi_{\mathrm{k}}^{(0)}(\theta; \mathrm{x}) = (2\pi)^{-n/2} \exp\left[i \sum_{j=1}^{n} (\theta_j + 2\pi k_j)\, y_j\right]$$

для $k_j \in Z$, где y_j определены разложением $\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{n} y_j \mathbf{a}_j$. Соответствующие собственные значения стремятся к бесконечности при $|\mathbf{k}| \to \infty$, так что резольвента $H^{(0)}(\theta)$ — компактный оператор. Тогда, в силу теоремы XIII.68, резольвента $H(\theta)$ также компактный оператор, и потому спектр $H(\theta)$ состоит из дискретных собственных значений $\{E_m(\theta)\}_{m=1}^{\infty}$, а набор соответствующих собственных функций полон. С помощью принципа минимакса можно доказать, что $E_m(\theta)$ — измеримые функции и что соответствующие собственные функции можно выбрать также измеримыми (задача 140). Поскольку при фиксированном θ собственные функции $\psi_m(\theta)$ оператора $H(\theta)$ образуют ортонормированный базис в $\mathcal{H}'$ то для $\eta \in \mathcal{H} = \int_{[0,\, 2\pi)^n}^{\oplus} \mathcal{H}' \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}$ имеем

$$(\eta,\ \eta)_{\mathcal{H}} = \sum_m \int |(\eta_\theta,\ \psi_m(\theta))_{\mathcal{H}'}|^2 \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n},$$

$$\eta_\theta = \sum_m (\psi_m(\theta),\ \eta_\theta)_{\mathcal{H}'}\ \psi_m(\theta), \qquad (\psi_m(\theta),\ (A\eta)_\theta) = E_m(\theta)\,(\psi_m(\theta),\ \eta_\theta),$$

где

$$A = \int_{[0,\, 2\pi)^n}^{\oplus} H(\theta) \frac{d^n\theta}{(2\pi)^n}.$$

Утверждения (a)—(c) теперь следуют просто из определения U и способа, которым мы продолжили $\psi_m(\theta)$. Аналогично доказывается (d). ∎

Для проведения анализа в p-пространстве удобнее использовать величины, отличающиеся множителем 2π от обычно применяемых величин.

Определение. Пусть $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ — некоторый базис в $\mathbb{R}^n$. Базис $\mathbf{K}_1, \ldots, \mathbf{K}_n$, определяемый соотношениями

$$(\mathbf{K}_i,\ \mathbf{a}_l) = (2\pi)\,\delta_{ij},$$

будем называть сопряженным к $\{\mathbf{a}_l\}$.

Теорема XIII.99. Пусть V — функция на $\mathbb{R}^n$, такая, что $V(\mathbf{x}+\mathbf{a}_j) = V(\mathbf{x})$ $(j = 1, \ldots, n)$, где $\{\mathbf{a}_j\}_{j=1}^{n}$ — базис в $\mathbb{R}^n$. Пусть Q — элементарная ячейка этого базиса, и пусть $\tilde{Q}$ — элементарная ячейка сопряженного базиса $\{\mathbf{K}_l\}$, т. е.

$$\tilde{Q} = \left\{ \sum_{i=1}^{n} t_i \mathbf{K}_i \,\middle|\, 0 \leqslant t_i < 1 \right\}.$$

Пусть $\mathcal{H}' = l_2(\mathbf{Z}^n)$ и $\mathcal{H} = \int_{\tilde{Q}}^{\oplus} \mathcal{H}' d^n k$. Предположим, что V равномерно локально принадлежит L^p (где $p=2$ при $n\leqslant 3$, $p>2$ при $n=4$ и $p=n/2$ при $n\geqslant 5$), и пусть $\tilde{V}_{\mathbf{m}}$ — коэффициенты Фурье V как функции на Q, т. е. для любого $\mathbf{m}\in Z^n$

$$\tilde{V}_{\mathbf{m}}=(\operatorname{vol} Q)^{-1}\int_Q \exp\left(-i\sum_{j=1}^n m_j \mathbf{K}_j\cdot\mathbf{x}\right)V(\mathbf{x})\,d^n x. \qquad (167)$$

Для $\mathbf{k}\in\tilde{Q}$ определим оператор $H(\mathbf{k})$ на $\mathscr{H}'$

$$(H(\mathbf{k})g)_{\mathbf{m}}=(\mathbf{k}+\sum m_j\mathbf{K}_j)^2 g_{\mathbf{m}}+\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha g_{\mathbf{m}-\alpha} \qquad (168)$$

с областью определения

$$D_0=\{g\in\mathscr{H}'\mid \sum \mathbf{m}^2\,|g_{\mathbf{m}}|^2<\infty\}.$$

Наконец, пусть U: $L^2(\mathbb{R}^n)\to\mathscr{H}$ задано соотношением

$$[(Uf)(\mathbf{k})]_{\mathbf{m}}=\hat{f}(\mathbf{k}+\sum m_j\mathbf{K}_j).$$

Тогда U — унитарный оператор и

$$U(-\Delta+V)\,U^{-1}=\int_{\tilde{Q}}^{\oplus} H(\mathbf{k})\,d^n k.$$

Доказательство. То, что U унитарен, следует из теоремы Планшереля. Более того, ясно, что

$$[(U(-\Delta)\,U^{-1})\,g](\mathbf{k})_{\mathbf{m}}=(\mathbf{k}+\sum m_j\mathbf{K}_j)^2\,g(\mathbf{k})_{\mathbf{m}},$$

поскольку $-\widehat{\Delta f}\,(l)=l^2\hat{f}(l)$. Учитывая $-\Delta$-ограниченность V с нулевой относительной гранью, остается доказать только, что

$$[(UVU^{-1})\,g(\mathbf{k})]_{\mathbf{m}}=\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha g_{\mathbf{m}-\alpha}(\mathbf{k}),$$

а для этого достаточно показать, что для $f\in\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$

$$\widehat{Vf}(\mathbf{k})=\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha\hat{f}\left(\mathbf{k}-\sum_{j=1}^n\alpha_j\mathbf{K}_j\right). \qquad (169)$$

Для доказательства (169) нужно только убедиться, что V как обобщенная функция умеренного роста имеет фурье-образ

$$\hat{V}(\mathbf{k})=(2\pi)^{n/2}\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha\delta\left(\mathbf{k}-\sum_{j=1}^n\alpha_j\mathbf{K}_j\right).$$

Но это верно, поскольку, как и в одномерном случае, ряд Фурье

$$V(\mathbf{x})=\sum_{\alpha\in\mathbb{Z}^n}\tilde{V}_\alpha\exp\left(i\sum_{j=1}^n\alpha_j\mathbf{K}_j\cdot\mathbf{x}\right)$$

сходится локально в смысле L^2, ибо V равномерно локально принадлежит L^2. ∎

Одно из преимуществ описанной процедуры разложения в k-пространстве — независимость области определения D_0 операторов $H(\mathbf{k})$ от k. В действительности можно с помощью (168) определить $H(\mathbf{k})$ для любого $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^n$, и так определенные операторы $H(\mathbf{k})$ образуют аналитическое семейство типа (A). Простейший способ убедиться в этом — ввести

$$(\mathbf{P}g)_{\mathbf{m}} = \left(\sum_{j=1}^{n} m_j \mathbf{K}_j\right) g_{\mathbf{m}},$$

так чтобы $\mathbf{P}$ был $H(\mathbf{0})$-ограниченным с нулевой относительной гранью, и

$$H(\mathbf{k}) = H(\mathbf{0}) + 2\mathbf{k}\cdot\mathbf{P} + \sum_{j=1}^{n} k_j^2. \tag{170}$$

$H(\mathbf{k})$ зависит от n параметров, но нам удобно фиксировать $n-1$ из них. Этому есть две причины. Во-первых, таким способом мы избегаем неаналитичности, с которой можно столкнуться в многопараметрической задаче на собственные значения в вещественном случае. Вторая причина более деликатная. Пусть $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ — фиксированные векторы в $\mathbb{R}^n$. Пусть $z = \lambda + iy$. Определим

$$E_{\mathbf{m}}(z) = \left(\mathbf{a} + z\mathbf{b} + \sum m_j \mathbf{K}_j\right)^2.$$

Конечно, $H(\mathbf{k}) = H_0(\mathbf{k}) + V$, где $H_0(\mathbf{a} + z\mathbf{b})$ обладает полным ортонормированным набором собственных векторов с собственными значениями $E_{\mathbf{m}}(z)$ Далее,

$$\operatorname{Im} E_{\mathbf{m}}(z) = 2y\left[\mathbf{b}\cdot\left(\mathbf{a} + \lambda\mathbf{b} + \sum m_j \mathbf{K}_j\right)\right]$$

имеет особенно простой вид, если разумно выбрать числа $\mathbf{b}\cdot\mathbf{K}_j$, так чтобы число в квадратных скобках не обращалось в нуль при изменении $\mathbf{m}$. Удобно выбрать в качестве $\mathbf{b}$ первый вектор решетки в x-пространстве:

$$\mathbf{b}\cdot\mathbf{K}_j = 2\pi\delta_{j1}, \tag{171}$$

а λ определить равенством

$$\mathbf{b}\cdot(\mathbf{a} + \lambda\mathbf{b}) = \pi. \tag{172}$$

В этом случае $\operatorname{Im} E_{\mathbf{m}}(z) = 2\pi y(2m_1 + 1)$ и

$$|\operatorname{Im} E_{\mathbf{m}}(z)| \geqslant \pi |y| (1 + |m_1|). \tag{173a}$$

Более того, легко показать (задача 141a), что

$$|\operatorname{Re}(E_{\mathbf{m}}(z) + 1)| \geqslant c_1 |\mathbf{m}|^2, \quad \text{если } |\mathbf{m}| \geqslant c_2(1 + |y|), \tag{173b}$$

с подходящими c_1 и c_2 (зависящими от $\mathbf{a}$ в силу выбора λ в (172)). Из (173) вытекает (задача 141) следующая

Лемма 1. Пусть $n \geqslant 2$. Пусть $\mathbf{b}$ и λ заданы формулами (171) и (172). Тогда:

(a) если $\alpha > n/2$ и $\alpha \geqslant n-1$, то ряд

$$f_\alpha(y) = \sum_{\mathbf{m}} |E_{\mathbf{m}}(\lambda + iy) + 1|^{-\alpha}$$

сходится и ограничен при $|y| \geqslant 1$;

(b) если, кроме того, $\alpha > n-1$, то $\lim\limits_{y \to \pm\infty} f_\alpha(y) = 0$.

Смысл леммы 1 в том, что она позволяет контролировать поведение $\|V(H_0(\lambda + iy) + 1)^{-1}\|$ при $y \to \infty$ для подходящих V.

Лемма 2. Пусть $n \geqslant 2$. Пусть V — периодический потенциал с коэффициентами Фурье (167), такими, что

$$\sum_{\mathbf{m}} |\tilde{V}_{\mathbf{m}}|^\beta < \infty, \tag{174}$$

где $\beta < (n-1)/(n-2)$ при $n \geqslant 3$ и $\beta = 2$ при $n = 2$. Фиксируем $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, и пусть $\mathbf{b}$ удовлетворяет (171). Пусть

$$A(t) = H(\mathbf{a} + \mathbf{b}t)$$

для всех $t \in \mathbb{R}$. Тогда:

(a) резольвента каждого $A(t)$ компактна;

(b) существуют вещественно аналитические функции $\{E_j(t)\}$ и соответствующие аналитические векторнозначные функции $\{\psi_j(t)\}$, такие, что $\psi_j(t)$ образуют базис в $\mathcal{H}' = l^2(Z^n)$ и для каждого t

$$A(t)\psi_j(t) = E_j(t)\psi_j(t);$$

(c) среди функций $E_j(t)$ нет постоянных.

Доказательство. (a) Поскольку $\beta \leqslant 2$, из (174) и неравенства Хаусдорфа—Юнга следует, что $V \in L^\alpha(Q)$ с $\alpha < n-1$ при $n \geqslant 3$ и $\alpha = 2$ при $n = 2$. Таким образом, V ограничен относительно $H_0(\mathbf{k})$, и достаточно доказать, что компактна резольвента $H_0(\mathbf{k})$, а это следует из того, что $H_0(\mathbf{k})$ обладает полным набором собственных векторов с собственными значениями, уходящими на бесконечность.

(b) Пусть $E_j(0)$ — собственные значения $A(t=0)$, упорядоченные так, что $E_1(0) \leqslant E_2(0) \leqslant \ldots$. Используя, если понадобится, теорию возмущений для вырожденных собственных значений, можно продолжить эти собственные значения и собственные векторы на ненулевые t. Как и в одномерном случае, для того чтобы убедиться в возможности такого продолжения на любые t, нужно только показать, что $E_j(t)$ не уходят на бесконечность при каком-то конечном t. В силу (170),

$$\frac{dA(t)}{dt}=2(\mathbf{b}\cdot\mathbf{P}+\mathbf{b}\cdot(\mathbf{a}+t\mathbf{b})),$$

откуда, в силу теории возмущений первого порядка и $H_0(\mathbf{k})$-ограниченности $\mathbf{P}$,

$$\left|\frac{dE_j(t)}{dt}\right|\leqslant c(|E_j(t)|+|t|+1)$$

Следовательно, $E_j(t)$ не могут уходить на бесконечность для конечных *вещественных* t.

(c) В силу леммы 1, предположений о V, неравенства Гёльдера и неравенства Юнга,

$$\lim_{y\to\infty}\|(A_0(\lambda+iy)+1)^{-1}\|=0,\quad \lim_{y\to\infty}\|V(A_0(\lambda+iy)+1)^{-1}\|=0,$$

где λ выбрано так, что выполнено (172). Отсюда с помощью обычной теории возмущений получаем, что $(A(\lambda+iy)+1)^{-1}$ существует при $|y|\geqslant Y_0$ и

$$\lim_{y\to\infty}\|[A(\lambda+iy)+1]^{-1}\|=0. \tag{175}$$

Предположим теперь, что некоторая $E_j(t)$ равна константе C для всех t. Поскольку резольвента $A(t)$ компактна для всех вещественных t, она компактна и для всех $t\in\mathbb{C}$, так что C — всегда собственное значение $A(t)$. Тогда $(C+1)^{-1}$ — всегда собственное значение $(A(t)+1)^{-1}$, так что

$$\|(A(t)+1)^{-1}\|\geqslant(C+1)^{-1}.$$

Но это противоречит (175), и потому $E_j(t)$ не может быть постоянной. ∎

Теперь мы готовы провести полный анализ спектральных свойств операторов Шредингера с периодическими потенциалами.

Теорема XIII.100. Пусть V — периодический потенциал с коэффициентами Фурье из l_β, где $\beta<(n-1)/(n-2)$ при $n\geqslant 3$ и $\beta=2$ при $n=2, 3$. Тогда спектр $-\Delta+V$ состоит лишь из абсолютно непрерывной части.

Доказательство. Векторы $\mathbf{b}$, $\mathbf{K}_2$, ..., $\mathbf{K}_n$ образуют базис в $\mathbb{R}^n$, и потому внутренность Q можно представить в соответствии с разложением $\mathbf{k}=s_1\mathbf{b}+s_2\mathbf{k}_2+\ldots+s_n\mathbf{K}_n$ как множество $\{\langle s_1, s_\perp\rangle \mid s_1\in M(s_\perp),\ s_\perp\in N\}$, где $M(s_\perp)$ для каждого $s_\perp\in N$ — открытое связ-

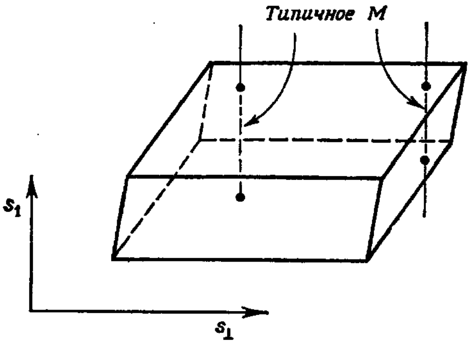


Рис. XIII.17. s-разложение $\tilde{Q}$.

ное множество (см. рис. XIII.17). Тогда в подходящем разложении в прямой интеграл

$$H = \int\limits_{s_\perp \in N} \int\limits_{s_1 \in M(s_1)} H(s_1\mathbf{b} + \ldots + s_n\mathbf{K}_n)\, ds_1 d^{n-1}s.$$

В силу леммы 2 и теоремы XIII.86, прямой интеграл по s_1 для каждого $s_\perp \in N$ обладает лишь абсолютно непрерывным спектром, и потому, в силу пункта (f) теоремы XIII.85, спектр H состоит лишь из абсолютно непрерывной части ∎

Подчеркнем, что подобно ситуации в одномерном случае спектр H разбивается на «зоны», но с двумя существенными отличиями. Во-первых, из-за вырожденности возможны неопределенности в особых точках функций многих переменных. Во-вторых, в отличие от одномерного случая зоны могут «перекрываться».

Прежде чем приступить к обсуждению связей изложенных здесь идей с простой моделью физики твердого тела, мы хотим еще упомянуть о произволе в выборе $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$. Пусть V задан; то, что определяется без всякого произвола, — это множество

$$\mathscr{L}_V = \{\mathbf{a} \mid V(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = V(\mathbf{x}) \text{ п. в. по } \mathbf{x}\}.$$

Для периодических потенциилов $\mathscr{L}_V$ всегда представляет собой решетку в смысле следующего определения.

Определение. Решетка — это подмножество $\mathscr{L} \subset \mathbb{R}^n$, обладающее следующими свойствами:

(i) $\mathscr{L}$ дискретно, т. е. не имеет конечных предельных точек;

(ii) $\mathscr{L}$ — подгруппа аддитивной группы $\mathbb{R}^n$;

(iii) $\mathscr{L}$ не содержится ни в одном нетривиальном подпространстве $\mathbb{R}^n$.

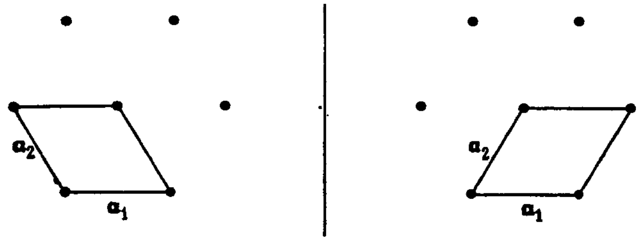


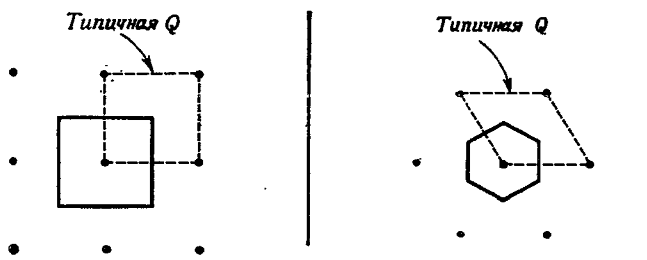
Рис. XIII.18. Два выбора базиса и элементарной ячейки.

Любая решетка $\mathscr{L}$ обладает **базисом**, т. е. набором таких элементов $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n \in \mathscr{L}$, что каждый $\mathbf{a} \in \mathscr{L}$ однозначно представим в виде $\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{n} m_i \mathbf{a}_i$ с $m_i \in \mathbb{Z}$. Такой базис не единствен, и соответствующая элементарная ячейка также не единственна (пример см. на рис. XIII.18). Свойство, которым обладают все элементарные ячейки,— это равенство $\mathbb{R}^n = \bigcup_{\mathbf{a} \in \mathscr{L}} \overline{\tau_{\mathbf{a}} Q}$, где $\tau_{\mathbf{a}} S = \{\mathbf{x} + \mathbf{a} \mid \mathbf{x} \in S\}$ с $\tau_{\mathbf{a}} Q^{\mathrm{int}} \cap \tau_{\mathbf{b}} Q^{\mathrm{int}} = \varnothing$, если $\mathbf{a} \neq \mathbf{b}$. Существует и другая «элементарная ячейка» C, обладающая таким свойством, хотя она и не связана ни с каким базисом. Это **ячейка Вигнера — Зейтца решетки** $\mathscr{L}$, определяемая формулой

$$C = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{x} \text{ — ближайшая к 0 точка в } \mathscr{L}\}.$$

Два примера ячеек Вигнера — Зейтца приведены на рис. XIII.19. Можно показать (задача 143), что любая ячейка Вигнера — Зейтца представляет собой многогранник, т. е. пересечение конечного числа слоев $\{x \mid a \leqslant l(x) \leqslant b\}$, где l — линейный функционал. Ячейка Вигнера — Зейтца определена однозначно.

Точно так же сопряженный базис зависит от выбора базиса в $\mathscr{L}_V$, а сопряженная решетка $\mathscr{L}'_V = \{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} \in 2\pi\mathbb{Z}$ для всех



(a) *Квадратная решетка* (b) *Гексагональная решетка*

Рис. XIII.19. Две ячейки Вигнера — Зейтца.

$a \in \mathscr{L}\}$ и ее ячейка Вигнера—Зейтца, называемая **зоной Бриллюэна** B, не зависят от выбора базиса в $\mathscr{L}_V$.

Мы коснулись этой терминологии по следующей причине. Можно провести разложение в прямой интеграл в x-пространстве, заменив Q на C, и в p-пространстве, заменив Q на B. Изучение твердых тел в физической литературе обычно начинается с построений, представляющих собой не что иное, как замаскированную форму разложения в прямой интеграл в p-пространстве по зоне Бриллюэна.

Вернемся теперь к обещанному описанию связей всего изложенного с физикой твердого тела. Человеку, занимающемуся математической физикой и привыкшему иметь дело с атомной физикой или даже квантовой теорией поля, внушительный ряд сбивающих с толку приближений, называемых теорией твердого тела, представляется скорее искусством, чем наукой. Хотя в таком представлении есть некоторая доля правды, мы хотели бы подчеркнуть, что различие между атомной физикой и физикой твердого тела на самом деле измеряется лишь степенью приближения к реальным явлениям: ведь «стандартный» чисто кулонов гамильтониан атома—всего лишь приближенная модель «реального» атома. Прежде всего в ней не учтены ни релятивистские поправки к кинетической энергии, ни спин-орбитальное взаимодействие. Далее, эксперименты в атомной физике никогда не проводятся с отдельными атомами, так что, обсуждая простую модель атома, а затем сравнивая ее с результатами эксперимента, мы всегда делаем определенное приближение. Наконец, в эксперименте присутствует взаимодействие с полем излучения (квантовая электродинамика), которое, без сомнения, еще не понято во всей глубине. Большая разница между атомной физикой и физикой твердого тела состоит в том, что в атомной физике одна модель описывает большинство основных физических явлений в этой области, тогда как в физике твердого тела модель, которую мы описываем ниже, качественно объясняет лишь ограниченную область явлений. Многие явления требуют учета колебаний решетки («фононы») и взаимодействия электронов между собой и с фононами. Но, в конце концов, человеку, занимающемуся математической физикой, выдается для изучения точно описанная модель (или несколько таких моделей), а это все, что он или она могут потребовать с достаточным основанием.

Замечено, что ядра в твердом теле расположены более или менее регулярным образом, т. е. в $\mathbb{R}^n$ существует решетка, примерно в узлах которой находятся ядра. Никто пока не объяснил, опираясь только на основные законы природы, почему образуются кристаллы, т. е. никто не доказал, что большое число тяжелых ядер с достаточным для нейтральности числом электронов, взаимодействующих посредством кулоновых потенциалов, обладает основным состоянием, приближенно представляющим собой кристалл. Поэтому мы просто постулируем, что в нашей модели *заданное* число ядер с некоторым числом окружающих их электронов располагается в каждом узле решетки. Для простоты мы заменим большое твердое тело кристаллом, заполняющим все $\mathbb{R}^n$. В итоге, если пренебречь электрон-электронным взаимодействием, получится модель электронов, движение которых описывается гамильтонианом $-\Delta+V$, где V — периодический потенциал. Эта модель носит название **одноэлектронной модели твердого тела.** Мы хотим с помощью проведенного анализа периодических операторов Шредингера описать две вещи:

(1) понятие плотности состояний и качественное объяснение разницы между металлами и диэлектриками;

(2) рассеяние на примеси в одноэлектронной модели.

Для упрощения обозначений рассматривается трехмерное пространство.

Определение. Пусть $\tilde{Q}$ — элементарная ячейка сопряженной решетки, и пусть $E_n(\mathbf{k})$ — уровни энергии $H(\mathbf{k})$ (упорядоченные неравенствами $E_1 \leqslant E_2 \leqslant \ldots$). **Мерой плотности состояний** называется заданная на $\mathbb{R}$ мера ρ, определяемая равенством

$$\rho(-\infty, E] = \frac{2}{|\tilde{Q}|} \sum_n |\{\mathbf{k} \in \tilde{Q} \mid E_n(\mathbf{k}) \leqslant E\}|, \tag{176}$$

где $|\tilde{Q}|$ — мера Лебега ячейки $\tilde{Q}$ и $|\{\ldots\}|$ — мера Лебега множества $\{\ldots\}$.

Отметим, что, поскольку $E_n(\mathbf{k}) \to \infty$ равномерно по $\mathbf{k}$ при $n \to \infty$ (задача 144), число $\rho(-\infty, E]$ конечно. Более того, основываясь на проведенном общем анализе, легко показать (задача 145), что ρ абсолютно непрерывна относительно dE, меры Лебега на $\mathbb{R}$. Производную Радона — Никодима $d\rho/dE$ обычно называют **плотностью состояний**. Для того чтобы объяснить важность ρ в теории твердого тела, введем еще одно понятие. Пусть Q — элементарная ячейка в x-пространстве, фиксировано некоторое $m \in \mathbb{Z}$ и $Q^{(m)}$ — множество объема $m^3|Q|$, полученное прикладыванием друг к другу $m \times m \times m$ множеств Q. Пусть H_m — оператор $-\Delta_P + V$ на $L^2(Q^{(m)})$, где $-\Delta_P$ — оператор с периодическими граничными условиями. Пусть $P_m(\Omega)$ — спектральные проекторы H_m; введем

$$\rho_m(-\infty, E] = 2 \dim P_m(-\infty, E]/m^3.$$

Тогда справедлива

Теорема XIII.101. Если $m \to \infty$, то $\rho_m \to \rho$ в том смысле, что $\rho_m(-\infty, E] \to \rho(-\infty, E]$ для любого E.

Доказательство. Опишем основные идеи доказательства, оставляя детали читателю (задача 147). Ключевой момент состоит в том, что H_m имеет следующее разложение в прямую *сумму*. Параметризуем $\tilde{Q}$ так: $\left\{\sum_{i=1}^{3} t_i \mathbf{K}_i \,\middle|\, 0 \leqslant t_i < 1\right\}$. Тогда

$$L^2(Q^{(m)}) \cong \bigoplus_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3=0}^{m-1} l^2(\mathbf{Z}^3),$$

и, таким образом, H_m можно представить в виде

$$\bigoplus_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3=0}^{m-1} H\left(\frac{\alpha_1}{m}\mathbf{K}_1 + \frac{\alpha_2}{m}\mathbf{K}_2 + \frac{\alpha_3}{m}\mathbf{K}_3\right),$$

где $H(\mathbf{k})$ — слои оператора H в бесконечном объеме. Возможность такого разложения объясняется тем, что любая функция φ, периодическая на $Q^{(m)}$, есть сумма функций φ, обладающих свойством $\varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a}_j) = \exp(2\pi\alpha_j i/m)\varphi(\mathbf{x})$. В результате такого разложения имеем

$$\rho_m(-\infty, E] = 2m^{-3} \# \{n;\ \alpha_i \in \{0, 1, \ldots, m-1\} \mid E_n(m^{-1} \sum (\alpha_j \mathbf{K}_j)) \leqslant E\},$$

и, поскольку $E(.)$ непрерывно, это выражение служит приближением $\rho(-\infty, E]$. ∎

Вернемся теперь к нашей модели твердого тела. Предположим, что каждое свободное ядро окружено l электронами. Тогда в нашей модели мы хотим иметь l электронов на единичную ячейку. Хотя мы и пренебрегаем взаимодействием между электронами, игнорировать принцип Паули, который в случае свободных электронов утверждает, что в каждом собственном состоянии H может находиться не более двух электронов, нельзя. Однако, как же мы можем его учесть, когда H не имеет собственных векторов и когда в нашем (бесконечном) кристалле находится бесконечное число электронов? Мы утверждаем, что разумный путь учесть принцип Паули состоит в том, чтобы считать, что в основном состоянии электроны заполняют континуум состояний до энергии E, при которой $\rho(-\infty, E] = l$. Действительно, если бы мы взяли большой, но конечный кристалл размера $m \times m \times m$ с периодическими граничными условиями, у нас было бы $m^3 l$ электронов и в основном состоянии они заполняли бы собственные состояния H_m до энергии E_m, определяемой равенством $\rho_m(-\infty, E_m] = l$. Наименьшее число E, при котором $\rho(-\infty, E] = l$, называется **энергией Ферми** E_F. Множество тех

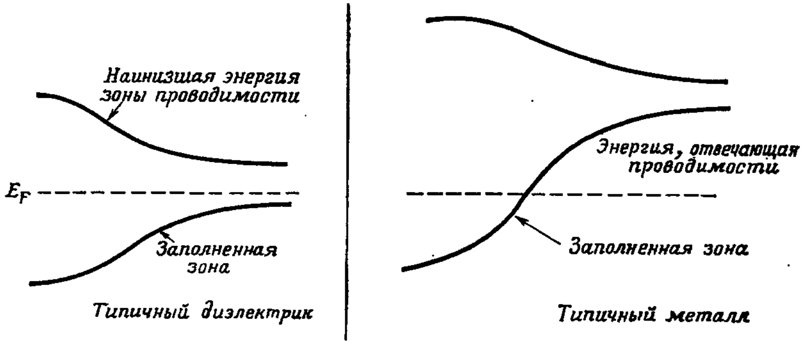


Рис. XIII.20. Энергетические зоны проводников и диэлектриков.

$\mathbf{k} \in B$ (т. е. $\mathbf{k}$ из зоны Бриллюэна), при которых $E_n(\mathbf{k}) = E_F$ для некоторого n, называется **поверхностью Ферми.** Эта картина похожа на ту, которая возникает при элементарном обсуждении периодической таблицы элементов, основанном на спектре атома водорода, но осложняется присутствием континуума состояний.

Теперь мы готовы к объяснению, почему электронная проводимость в одних твердых телах (диэлектрики) мала, а в других (металлы) велика. Используя симметрию основного состояния относительно комплексного сопряжения, можно доказать, что в нем нет движения электронов. Для того чтобы получить поток электронов, нужно возбудить некоторые из них. Мы уже знаем, что в типичных случаях периодический оператор Шредингера обладает щелями (запрещенными зонами) в энергетическом спектре. Существует качественная разница между тем, когда E_F располагается на дне щели, и случаем, когда это не так. Если E_F лежит на дне щели, то спектр H не пересекается с интервалом $(E_F, E_F + \varepsilon)$, и потому нужна конечная порция энергии для возбуждения тока (см. рис. XIII.20). В этом случае мы имеем диэлектрик. Если E_F не находится на дне щели, мы имеем металл! Конечно, если E_F лежит на дне узкой щели (ε мало) или не лежит на дне, но достаточно близко к нему, мы имеем промежуточные случаи, где различия металл/диэлектрик выражены не резко (полуметаллы, полупроводники). Имея дело с реальными телами, нужно учитывать, что реальное тело находится не в основном состоянии, а в состоянии с конечной температурой, описываемом статистической физикой. Подчеркнем, что учет щелей в спектре энергии — важный момент теории твердого тела.

В качестве заключительной темы из одноэлектронной теории твердых тел обсудим рассеяние на примеси. Предположим, что один из узлов решетки занят атомом примеси, отличающимся от атомов во всех остальных узлах. На электрон в таком криссталле действует потенциал $V+W$, где V периодичен, а W, представляющий различие между примесью и атомом, который она замещает, имеет короткий радиус действия. Можно ожидать, что электроны в таком кристалле рассеиваются на примеси в соответствии с обычной теорией рассеяния.

Теорема XIII.102. Пусть V — периодический потенциал на $\mathbb{R}^3$, квадратично интегрируемый по элементарной ячейке. Пусть W — потенциал из $L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)$. Тогда

$$\Omega^{\pm} = \operatorname*{s-lim}_{t \to \mp\infty} \exp[it(H_0+V+W)] \exp[-it(H_0+V)]$$

существуют и обладают одинаковой областью значений, так что S-матрица унитарна.

Доказательство. Поскольку спектр H_0+V состоит лишь из абсолютно непрерывной части (теорема XIII.100), достаточно доказать, что $(-\Delta+V+W+c)^{-1}-(-\Delta+V+c)^{-1}$ при некотором c лежит в классе операторов со следом, ибо тогда можно использовать теорию Като — Бирмана (теорема XI.9). Выберем c так, чтобы $-\Delta+V+W \geqslant -c+1$, $-\Delta+V \geqslant -c+1$. Поскольку V и W ограничены относительно $-\Delta$ с нулевой относительной гранью, то

$$\begin{aligned}
&(-\Delta+V+W+c)^{-1}-(-\Delta+V+c)^{-1}=\\
&=-(-\Delta+V+W+c)^{-1}W(-\Delta+V+c)^{-1}=\\
&=-[(-\Delta+V+W+c)^{-1}(-\Delta+1)][(-\Delta+1)^{-1}W(-\Delta+1)^{-1}]\times\\
&\qquad\times[(-\Delta+1)(-\Delta+V+c)^{-1}].
\end{aligned}$$

Первый и третий множители суть ограниченные операторы благодаря относительной ограниченности; средний множитель лежит в классе операторов со следом (см. теорему XI.20), поскольку $W \in L^1 \cap L^2$. Следовательно, разность резольвент также имеет конечный след. ∎

XIII.17. Введение в спектральную теорию несамосопряженных операторов

До сих пор мы изучали спектральные свойства главным образом самосопряженных операторов. В этом последнем разделе мы хотим кое-что сказать о спектральном анализе компактных операторов, которые не обязательно самосопряжены. В § VI.5 мы уже видели, что если A — компактный оператор, то $\sigma(A)$ состоит из нуля и множества отличных от нуля чисел $\{\lambda_i\}_{i=1}^{N(A)}$, где $N(A)$ конечно или счетно. Единственной точкой накопления спектра может служить лишь 0. Более того, каждое число λ_i есть собственное значение, и, в силу утверждений § XII.1 и