Министерство высшего и среднего специального образования
Р С Ф С Р

Ордена Трудового Красного Знамени
Научно-исследовательский радиофизический институт (НИРФИ)

Препринт № 87

УСЛОВИЯ КОНЕЧНОСТИ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА МНОГОЧАСТИЧНЫХ ГАМИЛЬТОНИАНОВ В ПРОСТРАНСТВАХ СИММЕТРИИ

Вугальтер С.А.,

Жислин Г.М.

Введение

В настоящей работе получены достаточные условия конечности дискретного спектра операторов энергии многочастичных квантовых систем в отсутствие внешних полей в пространствах функций заданной симметрии. Найденные условия обобщают все известные ранее [1–4] критерии конечности дискретного спектра рассматриваемых операторов.+)

По сравнению с [1,2] нами существенно ослаблены ограничения на потенциалы, что позволило включить в число исследуемых операторов гамильтонианы однократных отрицательных ионов атомов, а также некоторых молекул.

Основным отличием от [3,4] (где дискретный спектр изучался во всем пространстве $\mathcal{L}_2$) является учет симметрии, т.е. исследование спектра в подпространствах функций из $\mathcal{L}_2$, преобразующихся по кратным неприводимым представлениям групп симметрии рассматриваемых операторов. Это позволяет, в частности, установить критерии конечности числа дискретных точек спектра для любой физически реализуемой симметрии собственных функций, в то время как условия конечности [3, 4] не выделяют разрешенные типы симметрии и поэтому не могут дать ответ на вопрос о тонкой структуре дискретного спектра, например, когда дискретный спектр состоит из бесконечной серии физически запрещенных и конечного числа физически разрешенных собственных значений); подробнее об этом см. п.2.4.

Метод доказательства работы является дальнейшим развитием вариационного метода [1]; используются также некоторые...

+) результаты [3, 4] обобщаются здесь только для операторов с $V_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) = V_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}|)$.

идеи [5], применявшиеся и в [3,4].

§ 1. Определения

П.1.1. Введем, следуя [1, 6], необходимые определения и обозначения. Пусть

$$R_0=\{z: z\in R^{3n}, \sum_i^{1,n} m_i z_i=0\}.$$

Оператор энергии системы $Z_1=(1,2,\dots,n)$ n частиц, записанный после отделения движения центра масс, имеет вид [6]

$$H_0=-\Delta_0+0{,}5\sum_{\substack{i,j\\ i\neq j}}^{1,n} V_{ij}(z_{ij}), \qquad (1.1)$$

где Δ_0 – инвариантно заданный на $C_0^2(R_0)$ оператор Лапласа,

$$V_{ij}(z_1)\in Q(R^3),$$

$$Q(R^3)=\{V(z_1): V(z_1)\text{-веществ}, \\ V(z_1)\in \mathcal{L}_{2,loc}(R^3),\ \lim_{|z_1|\to\infty}\int_{|z_1-z_1'|\le 1}|V_1(z_1')|^2dz_1'=0\}.$$

В качестве группы симметрии G системы Z_1 (и оператора H_0) рассмотрим прямое произведение группы $S(Z_1)$ перестановок тождественных частиц системы Z_1 [+)] на любую компактную подгруппу $\mathcal{R}$ полной группы вращений, для которой

$$V_{ij}(gz_1)=V_{ij}(z_1)\quad g\in\mathcal{R}\quad i,j=1,2,\dots,n.$$

Типы неприводимых представлений группы G будем обозначать $\mathfrak{S}$, проектор из $\mathcal{L}_2(R_0)$ на подпространство функций, преобразующихся по представлениям типа $\mathfrak{S}$ – через $P^{\mathfrak{S}}$.

Ниже будет даны условия конечности дискретного спектра

+) Все результаты остаются справедливыми и тогда, когда $S(Z_1)$ – любая подгруппа всей группы перестановок тождественных частиц из Z_1.

оператора $H_0^\sigma = H_0 P^\sigma$ в пространстве $\mathcal{G}_\eta^\sigma = P^\sigma \mathcal{L}_2(R_0)$.

П.1.2. Так же, как и в [6], для каждого разбиения $Z_h = (C_1,\dots,C_h)$ исходной системы Z_1 на непустые подсистемы C_i определим пространства

$$R_c^{Z_h} = \{ z : z = (z_1,\dots,z_n) \in R_0 \ , \ z_i = \Big(\sum_{k\in C_t} m_k\Big)^{-1} \cdot \sum_{k\in C_t} m_k z_k \quad i \in C_t, t=1,\dots h \}$$

и

$$R_0^{Z_h} = \{ z : z = (z_1,\dots, z_n) \in R_0 \ , \ \sum_{i\in C_k} m_i z_i = 0 \quad k=1,2,\dots h \}$$

и множества

$$a(Z_h) = \{ (i,j) : i \in C_\ell \ , \ j \in C_p \quad \ell \neq p \ , \ \ell, p = 1,\dots,h \}.$$

Тогда оператор H_0 можно записать в виде

$$H_0 = H_0(Z_h) + H_c(Z_h) + I(Z_h),$$

где

$$H_0(Z_h) = -\Delta_0^{Z_h} + 0{,}5 \sum_{k=1}^{h} \sum_{i,j\in C_k}^{1,n} V_{ij}(z_{ij})$$

– оператор энергии относительного движения системы Z_h, определенный на $C_0^2(R_0^{Z_h})$;

$$H_c(Z_h) = -\Delta_c^{Z_h} \ , \ I(Z_h) = 0{,}5 \sum_{i,j\in a(Z_h)} V_{ij}(z_{ij})$$

– операторы, определенные соответственно на $C_0^2(R_c^{Z_h})$ и $C_0^2(R_0)$. Обозначим через $S(Z_h)$ – подгруппу $S(Z_1)$, являющуюся группой перестановочной симметрии оператора $H_0(Z_h)$, и положим $\tilde{G} = G(Z_h) = S(Z_h) \times \mathcal{R}$. Типы неприводимых представлений группы $\tilde{G}$ в пространстве $\mathcal{L}_2(R_0^{Z_h})$ будем обозначать $\tilde{\sigma}$, отвечающий типу $\tilde{\sigma}$ проектор – $P^{\tilde{\sigma}}$. Так же, как в [6] (см.также [2]) определим понятие индуцирования ($\prec$) симметрии $\tilde{\sigma}$ подсистемы Z_h симметрией σ всей системы Z_1 и положим

$$H_0(\sigma; Z_h) = \sum_{\tilde{\sigma}\prec\sigma} H_0(Z_h) P^{\tilde{\sigma}}, \qquad \mathcal{G}_\eta(\sigma, Z_h) = \bigoplus_{\tilde{\sigma}\prec\sigma} P^{\tilde{\sigma}} \mathcal{L}_2(R_0^{Z_h})$$

Оператор $H_0(\sigma; Z_h)$ самосопряжен в $\mathcal{H}_\eta(\sigma; Z_h)$.
Пусть

$$\lambda(\sigma; Z_h) = \inf H_0(\sigma; Z_h),\quad \mu^\sigma = \min_{Z_h, h\geq 2} \lambda(\sigma; Z_h),\quad O_h(\sigma) = \{Z_h : \lambda(\sigma; Z_h) = \mu^\sigma\}.$$

μ^σ – нижняя граница существенного спектра оператора H_0^σ [6 – 8]. Распадение Z_h назовем σ – устойчивым, если дискретный спектр оператора $H_0(\sigma; Z_h)$ не пуст.

П.1.3. Пусть $\rho = \sqrt{0{,}5}\left(\sum_{i,j}^{1,n} |r_{ij}|^2\right)^{1/2}$, $M = \sum_{i=1}^{n} m_i$.

Для каждого $Z_2 = (C_1, C_2)$ положим

$$\rho_{C_K} = \left(0{,}5 \sum_{i,j\in C_K} |r_{ij}|^2\right)^{1/2},\ M_{C_K} = \sum_{i\in C_K} m_i,\ r_{C_K} = M_{C_K}^{-1} \sum_{i\in C_K} m_i r_i \in R^3,\ K = 1, 2,$$

$$\zeta_{ij} = \zeta(Z_2) \text{ при } i \in C_1, j \in C_2;\ \zeta_{ij} = -\zeta(Z_2) \text{ при } i \in C_2, j \in C_1;$$

$$M_{Z_2} := M_{C_1} M_{C_2} \cdot M^{-1},\ \zeta(Z_2) = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) = \sqrt{M_{Z_2}}\,(r_{C_2} - r_{C_1})$$

и определим при любых $\alpha > 0$, $B > 0$ области

$$S(B) = \{r : r \in R_0, \rho \leq B\},\ K_{Z_2}(\alpha) = \{r : r \in R_0, \rho_{C_1}^2 + \rho_{C_2}^2 \leq \alpha^2 \rho^2\},$$
$$T_{Z_2}(\alpha, B) = K_{Z_2}(\alpha) \setminus S(B).$$

Очевидно, $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ можно рассматривать как координаты в R^{Z_2} [[1], [7, 8]]; координаты точки в $R_0^{Z_2}$ обозначим через $q(Z_2)$. Там, где это не может вызвать недоразумения, мы будем далее опускать Z_2 и писать q, ζ. Таким образом, если $r \in R_0$, то $r = (q, \zeta)$.
Пусть

$$\Theta(\zeta) = \{q : r = (q, \zeta) \in T_{Z_2}(\alpha, B)\},\ \zeta_0 = \min |\zeta|,\ \Theta(\zeta) \neq \emptyset.$$

Если $Z_2 \in O_2$ и Z_2 – σ – устойчиво, то число μ^σ является собственным значением оператора $H_0(\sigma; Z_2)$ конечной кратности; обозначим через $\varphi_1, \ldots, \varphi_\ell$ – ортогональный базис в отвечающем числу μ^σ собственном подпространстве.
Введем, наконец, множества

$$\mathcal{F}_\delta,\ \delta \in (0, 1),\ -$$

– всех функций $V(z_1) \in Q(R^3)$, для которых дискретный спектр оператора $(\delta-1)\Delta_1 + V(z_1)$ в $\mathcal{L}_2(R^3)$ конечен [1], и

Ψ_β, $\beta \in (0,1)$, –

– всех функций $V(z)$, $z \in R_0$, для которых

$$\sup_{z\in R_0} \int_{|z-z'|\le 1} |V(z')|^2 |z-z'|^{4-(3n-3)-\beta} dz' < +\infty,$$

$$\lim_{|z|\to\infty} \int_{|z-z'|\le 1} |V(z')|^2 dz' = 0 \quad (\text{см. } [7], \S 2).$$

§ 2. Формулировка и обсуждение результатов.

П.2.1. Теорема 1. Пусть для оператора $H_0^{\mathfrak{S}}$ выполняются следующие условия.

I. Все распадения Z_2 из $\mathcal{O}_2(\mathfrak{S})$ $\mathfrak{S}$ – устойчивы.

II. Для каждого $Z_2 = (C_1, C_2)$ из $\mathcal{O}_2(\mathfrak{S})$ существуют числа

$$\alpha > 0;\ \beta > 0;\ b > 0;\ \delta_1, \delta_2^{ij}, \delta_3 \in (0,1);\ \delta_2 = \frac{M_{Z_2}}{2} \sum_{i,j\in a(Z_2)} (1-\delta_2^{ij})$$

такие, что $\delta + \delta_3 - \delta_2 > 1$,

и вещественные функции $V_{Z_{2,1}}(z_1) \in \mathcal{T}_{\delta_1}$, $V^{(\ell)}_{Z_{2,3}}(z_2) \in \mathcal{T}_{\delta_3}$ $\ell = 1,\dots,\bar{\ell}$;

$$u_{ij}^{(\gamma)}(z_1) \in Q(R^3);\ V_{Z_2} = V'_{Z_2} \cdot V''_{Z_2};\ V_{Z_2}, |V''_{Z_2}|^2 \in \Psi_\beta$$

такие, что

1. $V_{ij}(z_{ij}) \ge \sum_{\gamma=1}^{3} u_{ij}^{(\gamma)}(z_{ij})$ для $(i,j) \in a(Z_2)$ при $z \in T_{Z_2}(\alpha, b)$;

2. $0{,}5 \sum_{i,j\in a(Z_2)} [u_{ij}^{(1)}(z_{ij}) + u_{ij}^{(3)}(\xi/\sqrt{M_{Z_2}})] \ge V_{Z_{2,1}}(\xi)$

при $z \in T_{Z_2}(\alpha, b)$;

3. $u_{ij}^{(2)}(z_1) \in \mathcal{T}_{\delta_2^{ij}}(z_1)$ при $(i,j) \in a(Z_2)$;

4. $0{,}5 \sum_{i,j\in a(Z_2)} (u_{ij}^{(3)}(z_{ij}) - u_{ij}^{(3)}(\xi/\sqrt{M_{Z_2}})) \ge V_{Z_2}(q, \xi)$

при $z \in T_{Z_2}(\alpha, b)$;

$$Б.\ \int\limits_{\theta(\zeta)} |\varphi_\ell(q)|^2 [V_{\chi_2}(q,\zeta) - |V'_{\chi_2}|^2]\,dq - \sum_{K,K\neq\ell} \left| \int\limits_{\theta(\zeta)} \varphi_\ell \bar\varphi_K V_{\chi_2}(q,\zeta)\,dq \right| -$$

$$\sum_{K,K\neq\ell} \left| \int\limits_{\theta(\zeta)} \varphi_\ell \bar\varphi_K |V'_{\chi_2}|^2 dq \right| \geq V^{(\ell)}_{\chi_{2,3}}(\zeta) \quad \ell = 1,\dots,\bar\ell \quad \text{при } |\zeta| \geq \zeta_0 .$$

Тогда дискретный спектр оператора H_0^{σ} не более чем конечен и число μ^{σ} не может быть собственным значением H_0^{σ} бесконечной кратности.

П.2.2.

Замечание 1. Поскольку требования $\mathrm{II}_{4,5}$ накладывают ограничения на функции V_{χ_2}, V'_{χ_2}, V''_{χ_2} только в области $T_{\chi_2}(\alpha, B)$, то можно считать $V_{\chi_2}(z) \equiv V'_{\chi_2}(z) \equiv V''_{\chi_2}(z) = 0$ при $z \,\bar\in\, T_{\chi_2}(\alpha, B)$.

Замечание 2. Теорема 1 может быть несколько усилена аналогично тому, как это сделано в [2]. С этой целью в определении множеств $\mathcal{F}_\delta$ надо заменить $\mathcal{L}_2(R^3)$ на подпространство функций из $\mathcal{L}_2(R^3)$, обладающих определенными типами симметрии λ_c относительно группы $\mathcal{R}$. Значения λ_c зависят от симметрии относительно группы $\mathcal{R}$ собственных функций φ_ℓ.

Мы не даем здесь точной формулировки и не приводим доказательства только ради краткости изложения.

Замечание 3. Достаточные условия для выполнения соотношения $\mathrm{II}_{3)}$ при любом $\delta_2^{ij} > 0$ указаны, например, в [8].

Замечание 4. Для справедливости требований $\mathrm{II}_{4)}$ и $\mathrm{II}_{5)}$, теоремы 1 достаточно, чтобы для функций $U^{(3)}_{ij}$, $(i,j) \in \mathfrak{a}(\chi_2)$, выполнялось любое из условий А, В

А. $i)$ $U^{(3)}_{ij}(z_1) \in C^1(R^3)$ при $|z_1| > B$.

$ii)$ – существует функция $w(z_1) > 0$, $w(z_1) \to 0$ при $|z_1| \to \infty$, такая, что

$$|\nabla_1 U^{(3)}_{ij}(z_1)| \leq w(z_1)\,|z_1|^{-2} \quad \text{при } |z_1| > B;$$

B. i) $U_{ij}^{(3)}(z_1)\in C^2(R^3)$ при $|z_1|>B$,

ii) существует функция $W(z_1)>0$, $W(z_1)\to 0$ при $|z_1|\to\infty$, такая, что для $|z_1|>B$

$$|\nabla_1 U_{ij}^{(3)}(z_1)|\le W(z_1)|z_1|^{-1},\ \left|\frac{\partial^2 U_{ij}(z_1)}{\partial x_k\partial x_\ell}\right|\le W(z_1)|z_1|^{-2}\quad k,\ell=1,2,3$$

iii) каждая из функций $\varphi_\ell(q)$ обладает определенной чётностью и чётность всех φ_ℓ одинакова.

П.2.3. Следствие 1. Пусть для каждого $z_2\in O_2(\sigma)$ и всех $(i,j)\in a(z_2)$ $V_{ij}(z_1)\in \mathcal{F}_\delta$ для любого $\delta>0$. Тогда условия II теоремы выполняются с

$$U_{ij}^{(1)}=U_{ij}^{(3)}=0;\ U_{ij}^{(2)}=V_{ij},(i,j)\in a(z_2);$$

$$V_{z_2}\equiv V'_{z_2}\equiv V_{z_2,1}\equiv V_{z_2,3}^{(\ell)}\equiv 0,\quad \ell=1,2,\dots\bar{\ell}.$$

Следствие 2. Пусть для каждого $z_2\in O_2(\sigma)$ справедливы неравенства $V_{ij}(z_1)=\ell_{ij}|z_1|^{-m}$ при $|z_1|>B$ для $(i,j)\in a(z_2)$ и пусть

$$\Lambda(z_2)\equiv 0{,}5\sum_{(i,j)\in a(z_2)}\ell_{ij}.$$

Тогда требования II теоремы 1 выполняются, если верно любое из следующих условий:

i) $m>2$;

ii) $m=2$ и $\Lambda(z_2)\ge -0{,}25M_{z_2}^{-1}$;

iii) $2>m>1$ и $\Lambda(z_2)>0$;

iv) $1\ge m>0$, $\Lambda(z_2)>0$ и справедливо требование B(iii) замечания 4.

Доказательство теоремы 1 будет дано в § 3; доказательство замечания 4 и следствий 1,2 мы не приводим из-за недостатка места.

П.2.4. Сравним наши результаты с полученными ранее. Теорема 1.1. [1] вытекает из теоремы 1 при $U_{ij}^{(2)}=U_{ij}^{(3)}=V_{z_2}=V'_{z_2}=V''_{z_2}=0$, $U_{ij}^{(1)}=V_{ij}$. В этом случае условия II сводятся к одному неравенству $II_{2)}$, которое эквивалентно (1.5.) [1]. В частности поэтому, требования i), ii) следствия 2, обеспечивающие каждое справедливость (1.5) [1], обеспечивают и справедливость $II_{2)}$. Отметим, что в важных для приложений ситуациях

$iii), iv)$ следствия 2 теорема 1.1. [1] не применима. Остановимся на отличиях наших результатов от [3,4]. Для удобства формулировки будем писать $\mathfrak{G} = e$, когда группа $\mathfrak{G}$ сводится к единичному элементу ($S(Z_1) = E$, $R = E$). Пусть выполнено условие 1 теоремы 1 с $\mathfrak{G} = e$ и ν — нижняя грань существенных спектров операторов $H_0(Z_2)$ по всем $Z_2 \in O_2(e)$. В [3,4] доказывается, что к собственным значениям λ оператора $H_0(Z_2)$, $\lambda < \nu$, не может накапливаться точечный спектр оператора H_0, если

а) на потенциалы V_{ij}, $(i,j) \in a(Z_2)$ наложены некоторые ограничения или

б) на V_{ij}, $(i,j) \in a(Z_2)$, накладываются более слабые ограничения (чем а)), но требуется, чтобы все собственные функции φ оператора $H_0(Z_2)$, отвечающие λ, имели одинаковую четность и в импульсном представлении функция $\nabla\varphi$ была гельдерова с показателем, большим чем 1/2.

Мы изучаем только дискретный спектр оператора $H_0^{\mathfrak{G}}$, который, согласно [6-8], может накапливаться лишь к числу $\mu^{\mathfrak{G}}$. Поэтому далее из [3,4] рассматриваются только результаты о возможности накопления точечного спектра оператора H_0 к собственным значениям оператора $H_0(Z_2)$, равным $\mu^{\mathfrak{G}}$ для каких-либо $\mathfrak{G}$. Можно доказать, что всегда, когда выполняются условия [3,4]*), требования теоремы 1 также справедливы. Более того, наши критерии конечности применимы и во многих ситуациях, на которые результаты [3,4] не распространяются. А именно —

1. Случай операторов энергии $H_0^{\mathfrak{G}}$, для которых $\mu^{\mathfrak{G}} > \nu$. Для гамильтонианов $H_0^{\mathfrak{G}}$ реальных систем неизвестно, будет ли $\mu^{\mathfrak{G}} < \nu$ или $\mu^{\mathfrak{G}} \geq \nu$. Поэтому применение теорем из [3, 4], требующих, чтобы $\mu^{\mathfrak{G}} < \nu$, имеет условный характер, в то время как в теореме 1 ограничение $\mu^{\mathfrak{G}} < \nu$ отсутствует. Отметим, что модельные задачи показывают нарушение условия $\mu^{\mathfrak{G}} < \nu$ уже в простейших случаях. Например, для гамильтониана

$$H = -\sum_{i=1}^{4} 0{,}5\,\Delta_i - |z_i|^{-1} \text{ при } \mathfrak{G} = S_2 \times O(3)$$

---

*) и $V_{ij} = V_{ij}(|\cdot|)$

в пространствах антисимметричных функций при любых ξ, ω

$$\mu^{\sigma} \geq -\frac{3}{4}, \text{ а } \nu = -1.$$

2. Случай операторов энергии H_0^{σ} квантовых систем типа отрицательных ионов атомов и некоторых молекул, когда собственные функции, отвечающие собственному значению μ^{σ} оператора $H_0(Z_2)$ в пространстве $\mathcal{L}_2$, имеют различные четности, а в пространстве $\Psi_\eta(Z_2;\sigma)$ – одинаковую четность. Изучение спектра оператора H_0 в пространствах Ψ_η^{σ} приводит к тому, что требование одинаковой четности теоремой 1 (в отличие от [3,4]) накладывается не на все собственные функции оператора $H_0(Z_2)$, отвечающие μ^{σ}, а только на те из них, которые принадлежат $\Psi_\eta(\sigma;Z_2)$. При этом теорема 1 утверждает невозможность накопления к μ^{σ}, разумеется, не любых собственных значений оператора H_0, а только тех, которые обладают собственными функциями симметрии σ.

Рассмотрим важный пример. Пусть $G = S_2 \times O(3)$. Для оператора энергии H_3 отрицательного иона водорода, как известно, [8]

$$\mu^{\sigma} = \lambda_0 \quad \text{при } \sigma = \sigma' = (\alpha, \ell, (-1)^{\ell}) \quad \ell = 0,1,\ldots$$
$$\mu^{\sigma} = \lambda_1 \quad \text{при } \sigma = \sigma'' = (\alpha, \ell, (-1)^{\ell+1}) \quad \ell = 0,1,\ldots,$$

где α – любой тип неприводимого представления группы S_2, $\lambda_0 < \lambda_1$ – наименьшие собственные значения оператора энергии H_2 атома водорода (очевидно $H_2 = H_0(Z_2)$, где Z_2 – распадение системы на нейтральный атом водорода и электрон). Собственное значение λ_0 оператора H_2 – не вырождено, поэтому в силу [3,4] к нему не может накапливаться точечный спектр оператора H_3. Для собственного значения λ_1 отвечающие ему собственные функции имеют различную четность (см., например, [10]), и результаты [3,4] к этой ситуации неприменимы. В то же время в пространствах $\Psi_\eta(\sigma'', Z_2)$ все собственные функции оператора H_2, отвечающие λ_1, нечетны [8] и в силу следствия 2 дискретный спектр оператора $H_3^{\sigma''}$ не более чем конечен+).

+) Отметим, что с помощью несложного обобщения теоремы 1 можно доказать конечность дискретного спектра и оператора $\sum_{\sigma''} H_3^{\sigma''}$

3. Случай оператора H_0^{ε} с медленно убывающими потенциалами. В ситуации $-i\nabla)$ следствия 2 в [3] накладывается условие $m-1/2$, которое для нас излишне.

§ 3. Доказательство теоремы 1.

П.3.1. Теорема 1 доказывается аналогично теореме 1.1. [1], исключая оценку функционала $L_1[\varphi^{(-)}_{Z_2}]$, которую в условиях теоремы 1 нельзя получить с помощью техники [1]. Поэтому здесь проводится только оценка величины $L_1[\varphi^{(-1)}_{Z_2}]$. Всюду далее считаем $\alpha_2 \le \bar{\alpha}$, $B \ge \alpha_2^{-1}\bar{B}$ (см. П.3.4 [1]).

Используя условия $\mathrm{I\!I}_{1)}$, $\mathrm{I\!I}_{4)}$, имеем

$$L_1[\varphi^{(-)}_{Z_2}] = (H_0\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) - \varepsilon_2\int|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2\rho^{-2}d\Omega \ge (H_0(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) +$$
$$+(H_c(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) + 0{,}5\sum_{(i,j)\in a(Z_2)}\Big\{\int[U^{(1)}_{ij}(z_{ij}) + U^{(3)}_{ij}\Big(\frac{\zeta_{ij}}{\sqrt{M_{Z_2}}}\Big)]|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2d\Omega + \tag{3.1}$$
$$+\int U^{(2)}_{ij}(z_{ij})|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2d\Omega\Big\} + \int V_{Z_2}(z)|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2d\Omega - \varepsilon_2\int|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2\rho^{-2}d\Omega.$$

Очевидно,

$$z_{ij} = \zeta_{ij}M_{Z_2}^{-1/2} - z_{i,0} + z_{j,0}, \tag{3.2}$$

где $z_{k,0} = z_k - z_{C(k)}$, $z_{C(k)}$ – положение центра масс системы $C(k)$, содержащей k (см. п. 1.3).

Поэтому, если ввести R_0 вместо ζ новые координаты z_{ij} – согласно (3.2), а координаты q оставить без изменения, то

$$|\nabla_{\zeta}| = |\nabla_{z_{ij}}| M_{Z_2}^{-1/2}$$

и, следовательно [1],

$$(H_0(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) = \int|\nabla_{\zeta}\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2d\Omega - \int|\nabla_{z_{ij}}\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2d\Omega\cdot M^{-1}_{Z_2}.$$

В силу леммы 2.1 [1] при $z\in T_{Z_2}(\alpha;B)$ $|z_{ij}| > 0{,}5\,n^{-1}B$, поэтому из условия $\mathrm{I\!I}_{3)}$ вытекает существование такого $B_\theta > 0$, что при $B > B_\theta$ и $(i,j) \in a(Z_2)$

$$M_{Z_2}(1-\delta_2^{ij})(H_e(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) + \int U^{(2)}_{ij}|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2 d\Omega \geq 0. \quad (3.3)$$

Просуммировав неравенства (3.3) по всем $(i,j) \in a(Z_2)$ получим

$$\delta_2(H_e(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) + 0{,}5\sum_{(ij)\in a(Z_2)} \int U^{(2)}_{ij}(z_{ij})|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2 d\Omega \geq 0.$$

В силу $\mathrm{II}_{2)}$ при достаточно большом B_0, $B > B_0$ и любом $\varepsilon_2 > 0$ аналогично имеем

$$(1-\delta_1+4M_{Z_2}\varepsilon_2)\int|\nabla_\zeta \varphi^{(-)}_{Z_2}|^2 d\Omega + \int(V_{Z_{2,1}}(\zeta)-\varepsilon_2\rho^{-2})|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2 d\Omega \geq 0$$

(здесь использовано также неравенство Куранта [11], стр. 115). Выберем $\varepsilon_2 < (\delta_1+\delta_3-\delta_2-1)/4M_{Z_2}$ и $2\varepsilon_3 < \delta_1+\delta_3-\delta_2-1-4M_{Z_2}\varepsilon_2$. Тогда в силу проведенных оценок из (3.1) вытекает, что

$$L_1[\varphi^{(-)}_{Z_2}] \geq (H_0(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) +$$
$$+(1-\delta_3+2\varepsilon_3)(H_c(Z_2)\varphi^{(-)}_{Z_2}, \varphi^{(-)}_{Z_2}) + \int V_{Z_2}|\varphi^{(-)}_{Z_2}|^2 d\Omega. \quad (3.4)$$

<u>П.3.2.</u> Представим функцию $\varphi^{(-)}_{Z_2}$ при каждом фиксированном ζ как сумму двух слагаемых, одно из которых есть проекция $\varphi^{(-)}_{Z_2}$ на собственное подпространство оператора $H_0(\sigma; Z_2)$, отвечающее числу μ^σ. Имеем

$$\varphi^{(-)}_{Z_2} = \sum_{l=1}^{\bar l} \varphi_l(q) f_l(\zeta) + g(q,\zeta), \quad (3.5\text{a})$$

где

$$(g(q,\zeta), \varphi_l(q))_{R_0^{Z_2}} = 0 \qquad l = 1,\ldots,\bar l \quad (3.5\text{в})$$

при любом ζ. Очевидно,

$$(H_0(z_2)\varphi^{(-)}_{z_2},\varphi^{(-)}_{z_2})=\mu^{6}\sum_{\ell=1}^{\bar{\ell}}\|f_\ell(\zeta)\|^2+(H_0(z_2)g,g). \tag{3.6}$$

Функция $\varphi^{(-)}_{z_2}(z)=\varphi^{(-)}_{z_2}(q,\zeta)$ как функция q имеет относительно группы $\tilde{G}(z_2)$ симметрию, индуцируемую симметрией G функции ψ относительно группы G, т.е. $\varphi^{(-)}_{z_2}\in\varphi_\eta(G;z_2)$ при любом фиксированном ζ. Так как $\varphi^{z_2}_\ell(q)\in\varphi_\eta(G;z_2)$, то в силу (3.5а) при фиксир. ζ

$$g(q,\zeta)\in\varphi_{\eta\perp}(G;z_2)\overset{\text{опр}}{=}\{\varphi(q):\varphi\in\varphi_\eta(G;z_2),(\varphi,\varphi_\ell)=0\ \ \ell=1,2,\dots,\bar{\ell}\}.$$

Следовательно,

$$(H_0(z_2)g,g)\geq\mu_1^{6}\|g\|^2,$$

где $\mu_1^6=\inf H_0(z_2)$ в $\varphi_{\eta\perp}(G;z_2)$ – ближайшая к μ^6 точка спектра оператора $H_0(G;z_2)$. В силу I $\varkappa=\mu_1^6-\mu^6>0$. Пусть $H_0(G;z_2;t)=$ $=H_0(G;z_2)+t\Delta_0^{z_2}$. Функция $\mu_1^6(t)=\inf H_0(G;z_2;t)$ в $\varphi_{\eta\perp}(G;z_2)$ непрерывна как функция от t в окрестности $t=0$. Поэтому можно указать $\delta_0>0$ так, чтобы $\mu_1^6(\delta_0)>\mu_1^6(0)-0{,}5\varkappa$.

В силу (3.6) получим, что

$$(\overset{\circ}{H}_0(z_2)\varphi^{(-)}_{z_2},\varphi^{(-)}_{z_2})\geq\mu^6\|\varphi^{(-)}_{z_2}\|^2+0{,}5\varkappa\|g\|^2-\delta_0(\Delta_0^{z_2}g,g) \tag{3.7}$$

П.3.3. Оценим теперь члены, входящие в интеграл $\int V_{z_2}|\varphi^{(-)}_{z_2}|^2d\Omega$. Имеем

$$2\operatorname{Re}\int V_{z_2}g\sum_{\ell=1}^{\bar{\ell}}\bar{\varphi}_\ell\bar{f}_\ell\,d\Omega\geq-\int|V''_{z_2}|^2|g|^2d\Omega-\sum_{\ell=1}^{\bar{\ell}}\int\limits_{|\zeta|>\zeta_0}|f_\ell|^2\times \tag{3.8}$$

$$\times\Big\{\int_{\theta(\zeta)}|V'_{z_2}|^2|\varphi_\ell(q)|^2dq-\sum_{k,\,k\neq\ell}^{\bar{\ell}}\Big|\int_{\theta(\zeta)}\varphi_k\bar{\varphi}_\ell|V'_{z_2}|^2dq\Big|\Big\}d\zeta;$$

Здесь и далее интегралы без указания области интегрирования берутся по области $T_{z_2}(\alpha,\beta)$. Аналогично (3.8) получим, что

$$\int V_{\chi_2}\Big|\sum_{\ell}^{1,\bar\ell}\varphi_\ell f_\ell\Big|^2 d\Omega-2\operatorname{Re}\sum_{\kappa,\ell}^{1,\bar\ell}\int V_{\chi_2}\varphi_\ell\bar\varphi_\kappa f_\ell\bar f_\kappa\, d\Omega\geq$$

$$\geq\sum_{\ell=1}^{\bar\ell}\int_{|z|>z_0}|f_\ell|^2\Big\{V_{\chi_2}|\varphi_\ell|^2-\sum_{\kappa,\kappa\neq\ell}^{1,\bar\ell}\Big|\int_{\theta(z)}\varphi_\kappa\bar\varphi_\ell V_{\chi_2}\,dq\Big|\Big\}\,dz. \tag{3.9}$$

Пусть

$$F(B)=\varepsilon_3\,\||\nabla_e^{\chi_2}\varphi_{\chi_2}^{(-)}|\|^2+\delta_0\,\||\nabla_0^{\chi_2}g|\|^2+\int(V_{\chi_2}-|V''_{\chi_2}|^2)|g|^2\,d\Omega.$$

Так как, по условию, V_{χ_2}, $|V''_{\chi_2}|^2\in\psi_B$, то в силу леммы 2.6 [7] для любого $\varepsilon'>0$ можно указать $B_1>0$, что при $B>B_1$

$$\int(|V''_{\chi_2}|^2+|V_{\chi_2}|)|g|^2d\Omega\leq\varepsilon'\Big\{\int(|\nabla_z g|^2+|\nabla_q g|^2)d\Omega+\|g\|^2\Big\}.$$

Выбирая $\varepsilon'<\min\{\varepsilon_3,\delta_0,0{,}5\varkappa\}$ и учитывая, что $\||\nabla_e^{\chi_2}\varphi_{\chi_2}^{(-)}|\|=\||\nabla_z\varphi_{\chi_2}^{(-)}|\|>\||\nabla_z g|\|$, а $\||\nabla_0^{\chi_2}g|\|=\||\nabla_{q_e}g|\|$, получим для $F(B)$ при $B>B_1$ оценку

$$F(B)>-0{,}5\varkappa\,\|g\|^2. \tag{3.10}$$

<u>П.3.4.</u> Подставим найденные оценки (3.7)-(3.10) в (3.4). Получим

$$L_1[\varphi_{\chi_2}^{(-)}]\geq\mu^{\sigma}\|\varphi_{\chi_2}^{(-)}\|^2+0{,}5\varkappa\|g\|^2+(1-\delta_3+\varepsilon_3)(K_e(\chi_2)\varphi_{\chi_2}^{(-)},\varphi_{\chi_2}^{(-)})+$$

$$+\sum_{\ell=1}^{\bar\ell}\int_{|z|>z_0}|f_\ell|^2\Big\{\int_{\theta(z)}|\varphi_\ell|^2(V_{\chi_2}-|V'_{\chi_1}|^2)\,dq-\sum_{\kappa,\kappa\neq\ell}^{1,\bar\ell}\Big[\Big|\int_{\theta(z)}\varphi_\kappa\bar\varphi_\ell|V'_{\chi_2}|^2dq\Big|+$$

$$+\Big|\int_{\theta(z)}\varphi_\ell\bar\varphi_\kappa V_{\chi_2}\,dq\Big|\Big]\Big\}dz\geq\mu^{\sigma}\|\varphi_{\chi_2}^{(-)}\|^2+0{,}5\varkappa\|g\|^2+\varepsilon_3\||\nabla_z\varphi_{\chi_2}^{(-)}|\|^2+$$

$$+(1-\delta_3)\||\nabla_z g|\|^2+\sum_{\ell=1}^{\bar\ell}\Big\{(1-\delta_3)\||\nabla_z f_\ell|\|^2+\int_{|z|>z_0}V_{\chi_{2,3}}^{(\ell)}(z)|f_\ell|^2\,dz\Big\}.$$

Так как $V^{(\varepsilon)}_{z_{\delta,0}} \in \mathcal{V}_{\delta_\delta}$ и $\gamma_0 \to \infty$ при $\delta \to \infty$, то каждое слагаемое в последней сумме неотрицательно, если δ достаточно велико. Поэтому окончательно получим следующую оценку для величины $L_1[\varphi^{(-)}_{z_\delta}]$

$$L_1[\varphi^{(-)}_{z_\delta}] \geq \mu^{\delta} \|\varphi^{(-)}_{z_\delta}\|^2 + \varepsilon_\delta \|\nabla_\varepsilon \varphi^{(-)}_{z_\delta}\|^2.$$

Дальнейшее доказательство не отличается от проведенного в [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Г.М.Жислин, Конечность дискретного спектра в квантовой проблеме n частиц. ТМФ, 21, 60 (1974).

2. М.А.Антонец, Г.М.Жислин, И.А.Шерешевский, О дискретном спектре N -частичных гамильтонианов, Дополнение к книге К.Йоргенс, И.Вайдман "Спектральные свойства гамильтоновых операторов", Мир, 1976.

3. Д.Р.Яфаев. О точечном спектре в квантовомеханической задаче многих частиц, Известия АН СССР (в печати).

4. Д.Р.Яфаев, Точечный спектр в квантовомеханической задаче трех частиц; кандидатская диссертация, ЛГУ, 1972 г.

5. Л.Д.Фаддеев, Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех частиц; труды МИАН, т.69 (1963).

6. А.Г. Сигалов, И.М.Сигал, Инвариантное относительно перестановок тождественных частиц описание спектра оператора энергии квантовомеханических систем, ТМФ, 5 3 (1970).

7. К.Йоргенс, И.Вайдман, Спектральные свойства гамильтоновых операторов, Мир (1976).

8. Г.М.Жислин, Исследование спектра дифференциальных операторов квантовомеханических систем многих частиц в пространствах функций заданной симметрии. Известия АН СССР, сер.матем. 33, 590 (1969).

9. Н.Ш.Бирман, О спектре сингулярных граничных задач, Математический Сборник 55(97), 2, 125 (1961)

10. П.Гомбаш, Проблема многих частиц в квантовой механике, М., ИЛ, 1953.

11. Р.Курант, Д.Гильберт, Методы математической физики т. 1, М-Л, 1951.