Министерство высшего и среднего специального образования
Р С Ф С Р

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

Препринт № 111

О ДИСКРЕТНОМ СПЕКТРЕ ОПЕРАТОРА ЭНЕРГИИ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ n ЧАСТИЦ

С.А.Вугальтер,
Г.М. Жислин

Горький 1977 г.

Р е ф е р а т

Получены новые условия конечности дискретного спектра в пространствах функций заданной перестановочной и вращательной симметрии для оператора энергии H_0 квантовой системы из n частиц. Эти критерии относятся к квантовым системам с короткодействием и в случае компенсации взаимодействий – к системам с медленно убывающими потенциалами. Найденные условия применимы в общей ситуации – когда граница существенного спектра H_0 определяется распадением $\mathcal{X} = (C_1, \dots, C_K)$ исходной системы на любое число к устойчивых подсистем C_i, $2 \leq K \leq n$, причем оператор энергии одной из неустойчивых систем B_1, B_2 – которые можно получать объединяя все подсистемы C_i в две системы B_j – может иметь "виртуальный" уровень на нижней границе спектра.

Библ. 15 названий.

1. В настоящей заметке получены новые критерии конечности дискретного спектра в пространствах функций заданной симметрии для оператора энергии H_0 квантовой системы n частиц. Эти критерии относятся к квантовым системам с короткодействием и к системам с медленно убывающими потенциалами – в случае компенсации взаимодействий.

Найденные условия конечности применимы в самой общей (при исследовании дискретного спектра H_0) ситуации, когда граница существенного спектра оператора H_0 исходной системы определяется ее распадением $Z=(C_1,\ldots,C_k)$ на любое число k устойчивых подсистем C_i; при этом для каждого такого Z оператор энергии одной из неустойчивых систем C', C'', которые можно получать, объединяя все подсистемы $C_i \in Z$ в 2 системы C', C'', может иметь "виртуальный уровень" на нижней границе спектра.

Ранее наиболее сильные результаты при $k=2$ получены в [1, 2]; критерии конечности дискретного спектра при $k=n$ для $n=3$ даны в [3], и для любого n в [4]. Общий случай $2 \le k \le n$ исследован в [5-7]. По сравнению с [1], чтобы не усложнять формулировки, мы даем несколько более слабые, но зато и более простые критерии. Результаты [3-5] содержатся в теоремах 1, 2. Полное сравнение с [6,7] затруднено, ибо основные ограничения в [6-7] и у нас несопоставимы+).

+) Исключая $n=3$; при $n=3$ ограничения [6-7] не допускают наличия виртуальных уровней на конце спектра операторов двухчастичных подсистем (см. [13]), в то время как у нас (так же, как и в [3,4]) одна из подсистем такой уровень может иметь.

Укажем однако, что в [6] не учитывалась симметрия, а в [7] имеется отсутствующее у нас требование дилатацион - ной аналитичности [14] потенциалов. Кроме того, резуль - таты [6,7] не применимы при компенсации медленно убы - вающих взаимодействий (системы типа молекул).

Метод доказательства наших утверждений развивает идеи [1, 4].

2. Рассмотрим квантовую систему $Z_1=(1,\dots,n)$ n частиц. Пусть m_i и $z_i=(x_{3i-2},x_{3i-1},x_{3i})$ – масса и радиус-вектор i-ой частицы,

$$(z,\tilde z)_1=\sum_i^{1,n} m_i(z_i,\tilde z_i)_{R^3},\quad |z|_1=\sqrt{(z,z)_1},\quad C\subseteq Z_1,$$

$$R_0(C)=\{z\mid z=(z_1,\dots,z_n)\in R^{3n},\ \sum_{i\in C} m_i z_i=0,\ z_j=0\ \ j\notin C\},\ R_0=R_0(Z_1).$$

Оператор энергии относительного движения системы Z_1 имеет вид

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

где Δ_0 – оператор Лапласа на $C_0^2(R_0)$, $V_{ij}(z_1)=$ $=V_{ji}(-z_1)\in Q(R^3)$ (см. [15], стр. 68). В качестве группы симметрии G оператора H_0 рассмотрим пря- мое произведение группы $S(Z_1)$ перестановок тождест- венных частиц системы Z_1 на любую компактную под- группу $\mathcal{R}$ полной группы вращений, для которой $V_{ij}(gz_1)=V_{ij}(z_1)$ $i,j=1,\dots,n$ при всех $g\in\mathcal{R}$. Типы неприводимых представлений G будем обозначать через σ, проектор из $\mathcal{L}_2(R_0)$ на подпространство функций, преобразующихся по представлениям типа σ – через P^σ и положим $\mathcal{L}_2^\sigma=P^\sigma\mathcal{L}_2(R_0)$, $H_0^\sigma=H_0P^\sigma$.

В настоящей заметке формулируются условия конечнос- ти дискретного спектра оператора H_0^σ.

Условимся далее для произвольного оператора A обозначать через $D(A)$, $S_d(A)$ и $S_{p\infty}(A)$ соответст- венно область определения, дискретный спектр и бесконечно кратный точечный спектр оператора A .

3. Пусть $\mathcal{Z} = (C_1, \ldots, C_s)$ – любое разбиение систем $\mathcal{Z}_1$ на s непересекающихся подсистем, $2 \le s \le n$, $|\mathcal{Z}| = s$, $\mathcal{Z}_s$ – разбиение с $|\mathcal{Z}_s| = s$.

$$a(\mathcal{Z}) = \{i, j \mid i \in C_p, j \in C_l \; p \ne l, C_p, C_l \in \mathcal{Z}\}, \; z_{C_k} = \Big(\sum_{i \in C_k} m_i z_i\Big)\Big(\sum_{i \in C_k} m_i\Big)^{-1},$$

$$\xi_{kl} = z_{C_k} - z_{C_l} \in R^3, \; \mathcal{Z}^{kl} = (C_k, C_l) \subset \mathcal{Z}, \; E_1 = \mathcal{Z}, \; E_2 = \mathcal{Z}^{kl}.$$

$$R_0(E_i) = \bigoplus_{C_\alpha \in E_i} R_0(C_\alpha), \; R(E_i) = R_0\Big(\bigoplus_{C_\alpha \in E_i} C_\alpha\Big), \; R_c(E_i) = R(E_i) \ominus R_0(E_i)$$

Обозначим координаты в $R_0(E_i)$ через $q(E_i)$, а в $R_c(E_i)$ – через $\xi(E_i)$. Далее выберем $\xi(\mathcal{Z}^{kl}) = \xi_{kl}$ (см. [16], стр. 88) и положим $q = q(\mathcal{Z})$, $q_{kl} = q(\mathcal{Z}^{kl})$, $t_{kl} = (q_{kl}, \xi_{kl})$.

Пусть $\Delta(\mathcal{Z}^{kl})$ – оператор Лапласа в пространстве $R(\mathcal{Z}^{kl})$. Оператор энергии относительного движения системы $\mathcal{Z}$ обозначим $H_0(\mathcal{Z})$, группу симметрии $\mathcal{Z}$ – $G(\mathcal{Z})$, типы неприводимых представлений группы $G(\mathcal{Z})$ – $\sigma = \sigma(\mathcal{Z})$, проектор в $\mathcal{L}_2(R_0(\mathcal{Z}))$ на подпространство функций, преобразующихся по представлениям типа $\tilde{\sigma}$ – $P^{\tilde{\sigma}}$.

Следуя [8] (см. также [9], стр. 133), определим понятие индуцирования $\prec$ симметрии $\tilde{\sigma}$ симметрией $\tilde{\sigma}$ и положим

$$H_0'(\sigma; \mathcal{Z}) = \sum_{\tilde{\sigma} \prec \sigma} H_0(\mathcal{Z}) P^{\tilde{\sigma}}; \; \mathcal{H}_1(\sigma; \mathcal{Z}) = \bigoplus_{\tilde{\sigma} \prec \sigma} P^{\tilde{\sigma}} \mathcal{L}_2(R_0(\mathcal{Z}));$$

$$\mu^{\sigma}=\min_{\mathcal{Z}_2}\inf H_0(\sigma;\mathcal{Z}_2)\ ;\quad O(\sigma)=\{\mathcal{Z}\,|\,\inf H_0(\sigma;\mathcal{Z})=\mu^{\sigma}\};$$

$$O_d(\sigma)=\{\mathcal{Z}\,|\,\mu^{\sigma}\in S_d(H_0(\sigma;\mathcal{Z}))\}^{+)};\quad O_e(\sigma)=O(\sigma)\setminus O_d(\sigma);$$

$W^{\sigma}(\mathcal{Z})$ – отвечающее числу $\mu^{\sigma}\neq 0$ собственное подпространство оператора $H_0(\sigma;\mathcal{Z})$ при $\mathcal{Z}\in O_d(\sigma)$; $m=\dim W^{\sigma}(\mathcal{Z})$.

4. Для разбиений $\mathcal{Z}'$, $\mathcal{Z}$ будем писать $\mathcal{Z}'<\mathcal{Z}$, если $\mathcal{Z}'$ получено из $\mathcal{Z}$ дроблением каких-либо подсистем. При $\mathcal{Z}'<\mathcal{Z}$ полагаем $R_c(\mathcal{Z}/\mathcal{Z}')=$
$=\{z\,|\,z\in R_c(\mathcal{Z}')\cap R_0(\mathcal{Z})\}$.
Оператор Лапласа на подпространстве $C_0^2(R_c(\mathcal{Z}/\mathcal{Z}'))$ обозначим $\Delta_c(\mathcal{Z}/\mathcal{Z}')$.

Будем писать $\mathcal{Z}\in A_p(\sigma)$, если $\mathcal{Z}\in O_e(\sigma)$ и существует такое число $\varepsilon_p>0$, что для каждого $\mathcal{Z}'<\mathcal{Z}$, $\mathcal{Z}'\in O(\sigma)$, и всех функций $\varphi\in \mathcal{H}_j(\sigma;\mathcal{Z})\cap D(H_0(\sigma;\mathcal{Z}))$

$$(H_0(\mathcal{Z})\varphi,\varphi)+\varepsilon_p(B_p\varphi,\varphi)\geq \mu^{\sigma}\|\varphi\|^2,\quad p=1,2$$

где

$$B_1=\sum_{(i,j)\in(\alpha(\mathcal{Z}')\setminus\alpha(\mathcal{Z}))^{d}} V_{ij}(r_{ij}),\quad B_2=\Delta_c(\mathcal{Z}/\mathcal{Z}').$$

Пусть $A_p^{(-)}(\sigma)=O_e(\sigma)\setminus A_p(\sigma)$. Можно показать, что $A_1^{(-)}(\sigma)\supseteq A_2^{(-)}(\sigma)$.

+) При $\mu^{\sigma}=0$ считаем $0\in S_d(H_0(\sigma;\mathcal{Z}_n))$.

Определим, наконец, классы функций:

$$\mathfrak{F} = \mathfrak{F}(R^3) = \{ V(z_1) \mid V(z_1) \in Q(R^3),$$

спектр $S_d(-\varepsilon\Delta_1 + V(z_1))$ конечен при любом $\varepsilon > 0\}$;

$$\Phi(R(z^{k\ell})) = \{ U(t_{k\ell}) \mid \bar{U} = U,\ U \in \mathcal{L}_{2,loc}(R(z^{k\ell})),$$

оператор $-\beta\Delta(z^{k\ell}) + U(t_{k\ell})$ ограничен снизу и отрицательный спектр его дискретен при любом $\beta > 0\}$.

Для любых $z^{k\ell}$, $\alpha > 0$ и $B > 0$ положим

$$T_{k\ell}(\alpha, B) = \{ z \mid z \in R(z^{k\ell}),\ |q_{k\ell}| \leq \alpha|\zeta_{k\ell}|,\ |\zeta_{k\ell}| \geq B \}$$

и обозначим через $\varkappa_{k\ell} = \varkappa_{k\ell}(\alpha, B, q_{k\ell}, \zeta_{k\ell})$ характеристическую функцию области $T_{k\ell}(\alpha, B)$.

5. Теорема 1. Пусть для каждого $Z = (C_1, \ldots, C_p) \in O_d(\sigma)$

I. существует не более одного $Z_2 \in A^{(\sigma)}(\sigma)$, $Z < Z_2$;

II. для любого $Z^{k\ell} = (C_k, C_\ell)$ и некоторых чисел $\alpha_0 > 0$, $B > 0$ найдутся такие функции $U_{ij}^{(n)}(z_1) \in Q(R^3)$, $X_{k\ell}^{(n)}(t_{k\ell})$, $\mathcal{V}_{k\ell}(z_1)$, что

1. $V_{ij}(z_1) \geq U_{ij}^{(1)}(z_1) + U_{ij}^{(2)}(z_1)$ $i \in C_k$, $j \in C_\ell$ при $|z_1| \geq B$;

2. а) $\sum\limits_{i \in C_k, j \in C_\ell} U_{ij}^{(2)}(z_1) \geq \mathcal{V}_{k\ell}(z_1)$ при $|z_1| \geq B$,

б) $\sum\limits_{i \in C_k, j \in C_\ell} (U_{ij}^{(2)}(z_{ij}) - U_{ij}^{(2)}(\zeta_{k\ell})) \geq X_{k\ell} = X_{k\ell}^{(1)}(t_{k\ell}) X_{k\ell}^{(2)}(t_{k\ell})$

при $t_{k\ell} \in T_{k\ell}(\alpha_0, B)$;

3. а) для какого-либо ортонормированного базиса $\{\varphi_p\}$ в $\mathcal{W}^\sigma(\chi)$ и всех $\alpha \leq \alpha_0$ и i, s, t, $s \neq t$

$$\pm \mathrm{Re} \int X_{k\ell} \varkappa_{k\ell} \varphi_s \bar{\varphi}_t \, dq, \quad \pm \mathrm{Im} \int X_{k\ell} \varkappa_{k\ell} \varphi_s \bar{\varphi}_t \, dq,$$

$$\int (X_{k\ell} - X_{k\ell}^{(1)2}) \varkappa_{k\ell} |\varphi_i|^2 \, dq \in \mathfrak{F}(R_c(z^{k\ell}));$$

б) $(X_{k\ell} - m X^{(1)^2}_{k\ell})\varkappa_{k\ell} \in \Phi(R(Z^{k\ell}))$;

в) $V_{k\ell}(z_1) \in \mathcal{F}(R^3)$,

г) $U^{(2)}_{ij} = V_{k\ell} = X^{(1)}_{k\ell} = X^{(2)}_{k\ell} = 0$, если существует $Z \notin A^{(-)}_1(\theta), Z < Z_2$; ($|Z| = n$ или)

4. $U^{(1)}_{ij}(z_1) \in \mathcal{F}(R^3)$ при $i \in C_k$, $j \in C_\ell$.

Тогда спектр $S_d(H^3_0)$ конечен и $\mu^0 \notin S_{p\infty}(H^3_0)$.

Замечания 1. Условия включений $V(z_1) \in \mathcal{F}(R^3)$, $U(t_{k\ell}) \in \Phi(R(Z^{k\ell}))$ даны в [10,11]. В частности, $V(z_1) \in \mathcal{F}$, если $V(z_1) = o(|z|^{-2})$, и $U(t_{k\ell}) \in \Phi(R(Z^{k\ell}))$, если $U(t_{k\ell}) \to 0$ при $|t_{k\ell}| \to +\infty$.

2. Теорему 1 можно усилить, заменив класс $\mathcal{F}$ на классы $\mathcal{F}_{\delta_{4p}}$ [1], где числа δ_{4p} подчинены требованию типа условия 5 теоремы 2.1 [1].

3. Для проверки условий 3а теоремы следует использовать симметрию функций φ_p и их суммируемость с весом. Так, если все функции φ_p обладают одной и той же четностью и $X_{k\ell}(q_{k\ell}, \xi_{k\ell}) = -X_{k\ell}(-q_{k\ell}, \xi_{k\ell})$, то требование 3а сводится к выполнению условия

$$-\int X^{(1)^2}_{k\ell}\varkappa_{k\ell}|\varphi_i|^2 dq \in \mathcal{F}(R_c(Z^{k\ell})).$$

Относительно суммируемости функций φ_p заметим, что при $V_{ij}(z_1) \in Q(R^3)$ выполняется $|q|\varphi_p(q) \in \mathcal{L}_2(R_0(Z))$ [8], а при ограничениях типа [7] $\exp(\gamma|q|)\varphi_p(q) \in \mathcal{L}_2$ для некоторого $\gamma > 0$ [12].

4. При $U^{(1)}_{ij} \equiv 0$ в условии теоремы можно заменить $A^{(-)}_1(Z)$ на $A^{(-)}_2(Z)$.

п. 6. Для систем с короткодействием из теоремы 1 вытекает теорема 2.

Теорема 2. Пусть для каждого $\mathfrak{Z} \in O_d(\mathfrak{S})$ существует не более одного $\mathfrak{Z}_2 \in A_2^{(-)}(\mathfrak{S})$, $\mathfrak{Z} \prec \mathfrak{Z}_2$ и $V_{ij}(z_1) \in \mathfrak{F}$ при любых $(i,j) \in a(\mathfrak{Z})$.
Тогда спектр $S_d(H_0^{\mathfrak{S}})$ конечен и $\mu^{\mathfrak{S}} \notin S_{p-}(H_0^{\mathfrak{S}})$.

п. 7. Рассмотрим теперь системы с медленно убывающими потенциалами, или, более точно, такие системы $\mathfrak{Z}_1$ и такие типы симметрии $\mathfrak{S}$, что для любого $\mathfrak{Z} \in O_d(\mathfrak{S})$ и некоторых чисел $B > 0$, e_i: $V_{ij}(z_1) = e_i e_j |z_1|^{-p}$ +) при $|z_1| > B$, $(i,j) \in a(\mathfrak{Z})$, где $p \in (0,2)$ и не зависит от i, j. Положим $\Lambda_k(\mathfrak{Z}) = \sum_{i \in C_k} e_i$, $\Lambda_{k\ell}(\mathfrak{Z}) = \Lambda_k(\mathfrak{Z}) \Lambda_\ell(\mathfrak{Z})$.
Из теоремы 1 вытекает следующее утверждение

Теорема 3. Пусть $O(\mathfrak{S}) = O_d(\mathfrak{S}) \cup A_1(\mathfrak{S})$ и для любого $\mathfrak{Z} \in O_d(\mathfrak{S})$ и каждой пары k, ℓ выполняется хотя бы одно из условий а), б)

а) $\Lambda_{k\ell} \geq 0$, причем, если $p = 1$ и $\Lambda_{k\ell}(\mathfrak{Z}) = 0$, то в пространстве $W^{\mathfrak{S}}(\mathfrak{Z})$ существует такой базис, что каждая функция из него обладает определенной четностью и функции с различной четностью имеют различную перестановочную симметрию,

б) $\Lambda_k(\mathfrak{Z}) = 0$, $\Lambda_\ell(\mathfrak{Z}) = 0$.

Тогда спектр $S_d(H_0^{\mathfrak{S}})$ конечен и $\mu^{\mathfrak{S}} \notin S_{p-}(H_0^{\mathfrak{S}})$

Следствие. Для любой нейтральной молекулы, у которой $O(\mathfrak{S}) = O_d(\mathfrak{S})$ и все распадения $\mathfrak{Z} \in O_d(\mathfrak{S})$ состоят только из нейтральных подсистем, дискретный спектр оператора энергии в пространстве функций симметрии $\mathfrak{S}$ конечен. В частности, дискретный спектр гамильтониана $H_0^{\mathfrak{S}}$ двухатомной нейтральной молекулы конечен, если множество $O(\mathfrak{S})$ исчерпывается распадением на нейтральные атомы.

+) Случай $p = 2$ не рассматривается за недостатком места, а при $p > 2$ действует теорема 2, ибо потенциал $C|z_1|^{-(2+\delta)} \in \mathfrak{F}$ при любых $\delta > 0$ и C.

ЛИТЕРАТУРА

1. С.А.Вугальтер, Г.М.Жислин, ТМФ, 32, № 1 (1977)

2. С.А.Вугальтер, Г.М.Жислин. Сб. "Динамика систем", Горький (в печати).

3. Д.Р.Яфаев, ТМФ, 25, № 2, 185 (1975).

4. С.А.Вугальтер. Функциональный анализ (в печати).

5. М.А.Антонец, Г.М.Жислин, И.А.Шерешевский, ТМФ, 16, 235 (1973).

6. J.M.Sigal, Comm.math.phys.,48,137(1976).

7. J.M.Sigal, Comm.math.phys.,48,155(1976).

8. А.Г.Сигалов, И.М.Сигал, ТМФ, 5, № 1. 73 (1970).

9. М.А.Антонец, Г.М.Жислин, И.А.Шерешевский. Дополнение к книге К.Йоргенс, И.Вайдман "Спектральные свойства гамильтоновых операторов". Мир, 1976.

10. М.Ш.Бирман. Матем. сб., 55, (97). 2, 125 (1961).

11. Г.М.Жислин, УМН, XIX, № 6, 155 (1964).

12. J.M.Combes,L.Thomas, Comm.math.phys., 34, 251(1973).

13. Д.Р.Яфаев. Записки научн.семинаров ЛОМИ, 51, 203 (1975).

14. J.Aguilar,J.M.Combes, Comm.math.phys., 22, 269 (1971).

15. Г.М.Жислин. ТМФ, 21, № 1, 60 (1974).