Министерство высшего и среднего специального образования
Р С Ф С Р

Горьковский ордена Трудового Красного Знамени
научно-исследовательский радиофизический институт (НИРФИ)

Препринт № 263

АСИМПТОТИКА ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СИСТЕМЫ n ЧАСТИЦ НА ПОДПРОСТРАНСТВАХ ЗАДАННОЙ СИММЕТРИИ

С.А. Вугальтер
Г.М. Жислин

Горький 1988

Бугальтер С. А., Жислин Г. М.

АСИМПТОТИКА ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СИСТЕМЫ n ЧАСТИЦ НА ПОДПРОСТРАНСТВАХ ЗАДАННОЙ СИММЕТРИИ.//Препринт № 262.- - Горький, НИРФИ. - 1988. - 12 с.

УДК [illegible]

Для гамильтонианов систем с кулоновским взаимодействием, у которых граница сплошного спектра определяется только распадениями на две устойчивые разноименно заряженные подсистемы, найден главный член асимптотики дискретного спектра в пространствах заданной перестановочной вращательной и отражательной симметрии, а также найдены близкие к неулучшаемым оценки следующего члена.

I. В настоящей работе устанавливается асимптотика числа $N^{\sigma}(\mu^{\sigma}-\lambda)$ собственных значений (с учетом кратности) вблизи границы μ^{σ} существенного спектра гамильтониана H^{σ} системы Z_1 n частиц с кулоновским взаимодействием в пространствах функций заданной симметрии σ.

Рассматриваются системы Z_1 и типы симметрии σ, для которых величина μ^{σ} определяется распределениями Z_1 на две устойчивых разноименно заряженных подсистемы (все атомы и их (+) ионы при любых σ, некоторые молекулы).

Для таких систем найден главный член асимптотики $N^{\sigma}(\mu^{\sigma}-\lambda)$ и близкая к неулучшаемой оценка следующего члена при малых λ (теоремы I-3). Как следствие, установлен аналогичный результат без учета симметрии (теорема 4).

Методика работы, заключающаяся в сведении многочастичной задачи к эффективной двухчастичной (в духе /1/), допускает обобщения на системы с не кулоновскими потенциалами. Ранее главный член асимптотики $\Sigma_{disc}(H^{\sigma})$ для операторов с потенциалами, убывающими быстрее кулоновских, с учетом или перестановочной, или чисто вращательной симметрии был найден в /8/. Без учета симметрии главный член и более грубые, чем у нас в теореме 4, оценки следующего члена асимптотики получены в /2, 3/.

2. Пусть $Z_1 = (1, 2, \ldots, n)$ - квантовая система n частиц, m_i, r_i, q_i - масса, радиус-вектор и заряд i-й частицы, $r_{ij} = r_i - r_j$, $(r,\tilde{r})_1 = \sum_{i=1}^{n} m_i (r_i, \tilde{r}_i)_{R^3}$, $|r|_1 = (r,r)_1^{1/2}$. При $C \subseteq Z_1$ $R_0(C) = \{ r \mid r = (r_1, \ldots, r_n) \in R^{3n}, \ \sum_{i \in C} m_i r_i = 0, \ r_j = 0 \ \ j \notin C \}$, $R_0 = R_0(Z_1)$,

Δ_0 - оператор Лапласа на R_0

Оператор энергии системы Z_1 после отделения движения центра масс имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_0 + \sum_{\substack{i,j=1\\ i<j}}^{n} q_i q_j |r_{ij}|^{-1}.$$

Расширим оператор H с $C_0^2(R_0)$ до самосопряженного , сохраняя прежнее обозначение.

3. Пусть далее $Z_2 = (C_1, C_2)$ - разбиение системы Z_1 на две непустые непересекающиеся подсистемы C_1 и C_2 :

$$M[C_j] = \sum_{i\in C_j} m_i, \quad r_{C_j} = \Big(\sum_{i\in C_j} m_i r_i\Big) M[C_j]^{-1},$$

$$M(Z_2) = M[C_1]\cdot M[C_2]\left(M[C_1] + M[C_2]\right)^{-1},$$

$$Q(Z_2) = -\Big(\sum_{i\in C_1} q_i\Big)\Big(\sum_{j\in C_2} q_j\Big), \quad R_0(Z_2) = \Big\{ r \,\Big|\, \sum_{i\in C_k} m_i r_i = 0,\ k=1,2 \Big\},$$

$\Delta_0(Z_2)$- оператор Лапласа на $R_0(Z_2)$. Оператор энергии относительного движения системы Z_2 имеет вид

$$H(Z_2) = -\frac{1}{2}\Delta_0(Z_2) + \sum_{k=1,2}\ \sum_{(i,j)\in C_k} q_i q_j |r_{ij}|^{-1}.$$

Как известно, /4/, $\mu = \min\limits_{Z_2} \inf H(Z_2) = \inf \Sigma_{ess}(H)$.

4. Пусть далее $S(C)$ - группа перестановок тождественных частиц подсистемы $C \subseteq Z_1$, $S = S(Z_1)$; α, l, ω - типы неприводимых представлений соответственно группы S , группы чистых вращений в R^3 - $SO(3)$

и группы инверсий W. P^{α}, $P^{(l)}$, P_{ω} - проекторы в $\mathcal{L}^2(R_0)$ на подпространства функций, преобразующихся операторами T_g: $T_g\psi(r) = \psi(g^{-1}r)$; $g\in S$, $g\in SO(3)$, $g\in W$ по представлениям соответственно типов α, l, ω.

Через σ будем обозначать любой из наборов (α, l, ω), (α, l), α; через $\dim\sigma$ - размерность неприводимого представления типа σ. При этом полагаем соответственно $P^{\sigma}=P^{\alpha}\cdot P^{(l)}P_{\omega}$, $P^{\sigma}=P^{\alpha}P^{(l)}$ или $P^{\sigma}=P^{\alpha}$ и $H^{\sigma}\equiv HP^{\sigma}$.

5. Пусть $S(Z_2)$ - подгруппа S, порождаемая подгруппой $S(C_1)\times S(C_2)$, и, если подсистемы C_1, C_2 тождественны, перестановкой $C_1\leftrightarrow C_2$; α', l', ω' - типы неприводимых представлений соответственно групп $S(Z_2)$, $SO(3)$ и W в $\mathcal{L}^2(R_0(Z_2))$. $m^{\alpha}_{\alpha'} = m^{\alpha}_{\alpha'}(Z_2)$ - кратность представления типа α' в представлении типа α при сужении последнего с S на $S(Z_2)$. $P^{\alpha'}$, $P^{(l')}$, $P_{\omega'}$ - отвечающие α', l', ω' проекторы в $\mathcal{L}^2(R_0(Z_2))$. Аналогично предыдущему, полагаем $\sigma'=(\alpha', l', \omega')$ или $\sigma'=(\alpha', l')$ или $\sigma'=\alpha'$ и для всех σ' $H^{\sigma'}(Z_2)=H(Z_2)P^{\sigma'}$.

Следуя /5, 6/, определим индуцирование симметрии σ' симметрией σ $(\alpha'\prec\sigma)$ и положим

$$H(\sigma; Z_2)=\sum_{\sigma'\prec\sigma} H^{\sigma'}(Z_2), \quad \mu^{\sigma}=\min_{Z_2}\inf H(\sigma; Z_2).$$

Как известно (см.например /7/), $\mu^{\sigma} = \inf\sum_{ess}(H^{\sigma})$. Пусть $0(\sigma) = \{Z_2 \mid \inf H(\sigma; Z_2) = \mu^{\sigma}\}$.

6. Всюду далее рассматриваются такие операторы H и типы симметрии σ, для которых:

А. Для $\forall Z_2\in 0(\sigma)$ μ^{σ}- точка дискретного спектра $H(\sigma; Z_2)$;

Б. Для $\forall Z_2=(C_1,C_2)\in O(\sigma)$ подсистемы C_1 и C_2 разноименно заряжены, т.е. $Q(Z_2)>0$. Условия А, Б выполняются, например, для всех атомов и (+) ионов, ибо там $O(\sigma)=\{Z_2 \mid Z_2=((1,2,\ldots$ $\ldots, i-1, i+1,\ldots,n), i) \quad i=2,\ldots,n$, где 1-я частица - ядро, а остальные - электроны.

Обозначим через Z_2^i , $i=1,2\ldots,t$ такие распадения из $O(\sigma)$, что любое $Z_2\in O(\sigma)$ получается из какого-либо Z_2^i перестановкой из S и ни одно Z_2^i не может быть получено из Z_2^j при $j\neq i$ с помощью перестановок из S .

При $Z_2=(C_1,C_2)\in O(\sigma)$ обозначим через $W(\sigma, Z_2)$ собственное подпространство $H(\sigma; Z_2)$, отвечающее числу μ^σ .

Пусть $A(\sigma; Z_2)=\{\sigma'=\sigma'(Z_2) \mid P^{\sigma'}W(\sigma; Z_2)\neq\emptyset\}$, причем каждый тип σ' содержится в $A(\sigma, Z_2)$ столько раз, какова кратность неприводимого представления типа σ' в $W(\sigma; Z_2)$.

7. Пусть далее $\{\varphi_i\}$ - ортонормированный базис в $W(\sigma, Z_2)$,

$$\rho(Z_2)=\sum_{k\in C_1, k'\in C_2} q_k q_{k'}(r_k-r_{C_1}-r_{k'}+r_{C_2})\in R^3 ,$$

$$d_{ij}(Z_2)=(\rho(Z_2)\varphi_i,\varphi_j)_{\mathcal{L}^2(R_0(Z_2))} , \qquad d_t(Z_2,a) -$$

- собственные значения вещественной симметричной матрицы

$$\| d_{ij}(Z_2,a)\| , \qquad d_{ij}(Z_2,a)=(d_{ij}(Z_2), a|a|^{-1})_{R^3} ,$$

a - вектор в R^3, $\overset{\circ}{d}(Z_2)=\min_t \inf_a d_t(Z_2,a)$.

Будем говорить, что выполняется условие (В), если для $\forall Z_2\in O(\sigma)$.

$$\text{В.} \quad 2M(Z_2)\dot{d}(Z_2)+\left[L(\sigma;Z_2)(L(\sigma;Z_2)+1)\right] > -\frac{1}{4} ,$$

где $L(\sigma;\dot{Z}_2)=\inf\{l'' \mid \exists\, l',\ P^{(l')}W(\sigma;Z_2)\neq\emptyset,\ |l'-l''|\leq$

$$\leq l \leq l' + l''\} \text{ при } \quad \sigma = (\alpha, l);$$

$$L(\sigma, z_2) = \inf\{ l'' \mid \exists l', \quad P^{(l')} P_{\omega'} W(\sigma; z_2) \neq \phi,$$

$$\omega' = \omega(-1)^{l'}, \ |l' - l''| \leq l \leq l' + l''\} \text{ при } \quad \sigma = (\alpha, l, \omega).$$

Величина $d(z_2)$ не зависит от базиса в $W(\sigma; z_2)$, поэтому, выбирая функции φ_l, обладающие определенной четностью, получим, что условие (B) заведомо выполняется, если все φ_l с одинаковой перестановочной симметрией имеют одинаковую четность, ибо тогда $d(z_2) = 0$. Можно показать также, что условие (B) выполнено при любых α, если l достаточно велико.

8. Теорема I. Пусть $\sigma = \alpha$. Тогда для любого $\varepsilon > 0$ можно указать $\lambda_0(\varepsilon) > 0$ так, что при $0 < \lambda < \lambda_0(\varepsilon)$

$$\Big| N^{\alpha}(\mu^{\alpha} - \lambda) - (\sigma\sqrt{2})^{-1} \dim \alpha \sum_{i=1}^{t} \sum_{\alpha' \in A(\alpha, z_2^i)} m_{\alpha'}^{\alpha}(z_2^i) \times$$

$$\times Q^3(z_2^i) M(z_2^i)^{3/2} \lambda^{-3/2} \Big| \leq (1+\varepsilon) 4^{-1} \dim \alpha \sum_{i=1}^{t} \sum_{\alpha' \in A(\alpha; z_2^i)} m_{\alpha'}^{\alpha}(z_2^i) \times$$

$$\times Q^2(z_2^i) M(z_2^i) \lambda^{-1}.$$

Теорема 2. Пусть $\sigma = (\alpha, l)$. Тогда при малом $\lambda > 0$

$$\Big| N^{\sigma}(\mu^{\sigma} - \lambda) - 2^{-1/2} \dim \sigma \sum_{i=1}^{t} Q(z_2^i) M(z_2^i)^{1/2} \times$$

$$\sum_{\sigma'\in A(\sigma;z_2^i)} m_{\alpha'}^{\alpha}(z_2^i)\,(l+l'+1-|l-l'|)\,\lambda^{-1/2}\,| \le C(\lambda),$$

$$C(\lambda)=\begin{cases}\text{const}, & \text{если условие (B) выполнено,}\\ \text{const}\,|\ln\lambda|, & \text{если условие (B) не выполнено.}\end{cases}$$

Теорема 3. Пусть $\sigma = (\alpha, l, \omega)$. Тогда при достаточно малом $\lambda > 0$

$$|\,N^{\sigma}(\mu^{\sigma}-\lambda)-2^{-3/2}\dim\sigma\sum_{i=1}^{t} Q(z_2^i)M(z_2^i)^{1/2}\sum_{\sigma'\in A(\sigma;z_2^i)} m_{\alpha'}^{\alpha}(z_2^i)\times$$

$$\times(l+l'+1-|l-l'|-\omega\omega'(-1)^{l+l'})\,| \le C(\lambda),$$

где $C(\lambda)$ то же, что и в теореме 2 (при этом в условии (B) $\sigma = (\alpha, l, \omega)$).

Замечание. Для систем, в которых $S(z_2)$ при $z_2\in O(\sigma)$ состоит только из перестановок электронов, для физически реализуемых типов симметрии α (отвечающих двухстолбцовым схемам Юнга). $m_{\alpha'}^{\alpha} = 1$ при $\alpha' \prec \alpha$.

Из теоремы I, как следствие, может быть получена следующая оценка числа $N(\mu-\lambda)$ собственных значений оператора H меньших $\mu-\lambda$ без учета симметрии.

Теорема 4. Для любого $\varepsilon > 0$ существует $\lambda_0(\varepsilon) > 0$ такое, что при $0 < \lambda < \lambda_0(\varepsilon)$

$$|\,N(\mu-\lambda)-(6\sqrt{2})^{-1}\sum_{z_2\in O} Q^3(z_2)M^{3/2}(z_2)\,\lambda^{-3/2}\,| <$$

$$< (1+\varepsilon)4^{-1} \sum_{z_2 \in O} Q^2(z_2)M(z_2)\lambda^{-1}.$$

Главный член асимптотики $N(\mu-\lambda)$ совпадает с полученным в /3/, однако оценка остстка в теореме 4 более точная.

9. Приведенные в теоремах I-3 асимптотические оценки близки к неулучшаемым в том смысле, что можно указать оператор с известным спектром для которого:

а) при $\sigma = \alpha$ оценки $N^{\alpha}(\mu^{\alpha}-\lambda)$ совпадают с получаемыми в теореме I, если там заменить ($1+\varepsilon$) на 1,*) и не могут быть улучшены;

б) при $\sigma = (\alpha, l)$ и $\sigma = (\alpha, l, \omega)$ условие (B) выполнено и оценки совпадают с приведенными в теоремах 2, 3.

Для построения такого оператора заметим, что все результаты останутся справедливыми, если в качестве потенциалов в H вместо $q_i q_j |r_{ij}|^{-1}$ взять $q_{ij}|r_{ij}|^{-1}$. При этом $Q(z_2) = -\sum_{i\in C_1}\sum_{j\in C_2} q_{ij}$. Пусть $M_1 = +\infty$, $q_{1j} < 0$, $j = 2,\dots,n$, $q_{ij} = 0$, $i,j \geq 2$ (атом с бесконечной массой ядра и невзаимодействующими между собой электронами). Для такой системы спектр известен и утверждения а), б) проверяются непосредственно.

*) и добавить слагаемое $O(1)\lambda^{-1/2}$

Литература

1. Вугальтер С.А., Жислин Г.М.//ТМФ. - 1977. - Т.32, № 1. - С.70.
2. Simon B.//Comm.Math.Phys. - 1977. - V.55, N . - P.259.
3. Иврий В.Я.//ДАН. - 1984. - Т.277, № 4. - С.785.
4. Жислин Г.М.//ДАН. - 1959. - Т.128, № 2. - С.231.
5. Vugalter S.A., Zhislin G.M.//ROMP. - 1984. - V.19. - N 1. - P.39.
6. Вугальтер С.А., Жислин Г.М.//Труды Мос.Мат.общ. - 1986. - Т. 49, № 1. - С.
7. Сигалов А.Г., Сигал И.М.//ТМФ. - 1970. - Т.5, № 1. - С.73.
8. Муртазин Х.Х., Садовничий В.А. Спектральный анализ многочастичного оператора Шредингера. - М., МГУ, 1988.

Дата поступления статьи
1 июня 1988 г.

Семен Абрамович Вугальтер

Григорий Моисеевич Жислин

АСИМПТОТИКА ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА
ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СИСТЕМЫ n ЧАСТИЦ
НА ПОДПРОСТРАНСТВАХ ЗАДАННОЙ СИММЕТРИИ

Подписано к печати 21.07.88 г. МЦ 00903. Формат 60x84/16
Бумага писчая. Печать офсетная. Объем 0,7 п. л. Тираж 120.

Заказ 4761. Бесплатно

Отпечатано на ротапринте в НИРФИ