Научно–исследовательский радиофизический институт
Министерства общего и профессионального образования
Российской Федерации

Препринт N 447

Геометрические методы в задачах о спектре многочастичных систем в магнитных полях с фиксированным псевдомоментом. III

Г. М. Жислин

Нижний Новгород, 1998

Жислин Г. М.
ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЗАДАЧАХ О СПЕКТРЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ В МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ С ФИКСИРОВАННЫМ ПСЕВДОМОМЕНТОМ. III // *Препринт N 447.* — Нижний Новгород: НИРФИ, 1998. 27 с.

УДК 517.43

В данной работе доказывается применимость полученных в [2] общих результатов о структуре дискретного спектра операторов энергии нейтральных систем в однородном магнитном поле при фиксации псевдомомента к гамильтонианам любых атомов. Решающую роль при этом играет устанавливаемая в препринте теорема о локализации существенного спектра (+)-ионов при фиксации псевдомомента атома. Приводятся вытекающие из [2] и полученных здесь результатов асимптотики дискретного спектра гамильтонианов с однородным магнитным полем для атомов любых элементов таблицы Менделеева.

Работа заканчивает цикл исследований спектральных свойств гамильтонианов нейтральных систем в однородном магнитном поле при фиксации псевдомомента. Ранее для таких систем был найден существенный спектр [1] и получена характеристика дискретного спектра [2], однако вопрос о применимости теорем из [2] к реальным n-частичным системам при $n > 3$ оставался открытым.

Поддержано Грантами РФФИ 96-01-00478 и ИНТАС 95-0414

Введение

Настоящая работа завершает цикл наших публикаций, посвященных применению геометрических методов к исследованию спектра операторов энергии нейтральных систем в однородном магнитном поле после фиксации псевдомомента. Ранее мы доказали (в естественной формулировке) теорему о локализации существенного спектра таких операторов [1] и получили условия конечности и бесконечности дискретного спектра, а также спектральные асимптотики [2]. Однако все результаты [2] о дискретном спектре были установлены при условии, что граница существенного (и дискретного) спектра рассматриваемой системы определяется только ее распадениями $Z_2 = (A_1, A_2)$ на две устойчивых подсистемы A_1, A_2, или, более точно, на такие подсистемы, что нижняя грань спектра соответствующего гамильтониана $H_0(Z_2)$ есть точка его дискретного спектра. Данное предположение является обычным при исследовании дискретного спектра гамильтонианов как в отсутствие, так и при наличии магнитного поля, однако проверка его выполнения для конкретных систем далеко не тривиальна даже для не слишком сложных систем и в [2] нам удалось доказать справедливость данного условия только для атомов водорода и гелия. Таким образом, вопрос о применимости результатов [2] к более сложным системам оставался открытым.

Позднее С. А. Вугальтер установил справедливость этого условия для любых атомов и на этой основе результаты для гамильтонианов атомов были анонсированы в [3]. Однако доказательство С. А. Вугальтера не опубликовано.

В настоящей работе дается полное доказательство предположений, обеспечивающих применимость найденных в [2] спектральных асимптотик к гамильтонианам произвольных атомов, и тем самым обосновываются результаты [3]. Одновременно мы формулируем вытекающие из [2] результаты для атомных гамильтонианов с учетом принципа Паули (в [3] симметрия не учитывалась).

Публикуемое доказательство по существу сводится к исследованию спектральных свойств нижней границы спектра гамильтониана положительного иона, полученного из гамильтониана атома с фиксированным псевдомоментом. Указанное сведение выполнено в §2, и после него показано, что если для гамильтониана иона справедлива ХВЖ-теорема, то дискретный спектр не пуст (именно этот факт обеспечивает применимость к атомному гамильтониану результатов [2]!). Справедливость ХВЖ-теоремы для операторов энергии (+)-ионов доказана в §3. Именно здесь преодолеваются главные трудности. При этом широко используются специальные разбиения конфигурационного пространства, разработанные нами ранее в других целях [4], что позволяет, в частности, сократить техническую часть работы.Ради простоты в приводимом доказательстве мы пренебрегаем перестановочной симметрией, однако все его технические конструкции выполнены так, чтобы они сохраняли перестановочную симметрию тех систем и подсистем, с которыми идет работа. Поэтому учет симметрии может быть осуществлен просто добавлением "симметрийных рассуждений" к уже проведенным.

§1. Основные определения и результаты

1.1. Пусть $Z_1 = \{1, 2, \ldots, N\}$ – произвольная нейтральная система типа атома в однородном магнитном поле $(0, 0, B)$, направленном по оси z; $m_i, e_i, r_i = (x_i, y_i, z_i)$ – масса, заряд и радиусвектор i-ой частицы, $e = e_2 = e_3 = \ldots = e_N$, $e_1 = -(N-1)e$, $m = m_2 = m_3 = \ldots = m_N$, $M = m_1 + (N-1)m$,

$$q_j = (q_{j\perp}, q_{j3}) = (q_{j1}, q_{j2}, q_{j3}) = r_j - \sum_{t=1}^{N} m_t r_t M^{-1}, \quad q = (q_1, \ldots, q_N).$$

Гамильтониан системы Z_1 после отделения движения центра масс в направлении оси z и после сужения на подпространство состояний с фиксированными значениями ν_1, ν_2 компонент псевдомомента может быть записан в следующей форме [2]:

$$H_0 = T_{0\perp} + T_{03} + F + V(q), \tag{1.1}$$

где

$$T_{0\perp} = \sum_{t=1}^{N} m_t \sum_{p=1}^{2} (\frac{1}{i} \nabla_{tp} - D_{tp})^2; \; T_{03} = \sum_{t=1}^{N} m_t (\frac{1}{i} \nabla_{t3})^2.$$

$$\nabla_{tp} = \frac{1}{m_t} \frac{\partial}{\partial q_{tp}} - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial q_{jp}}, \quad p = 1, 2, 3 \tag{1.2}$$

$$D_{tp} = \partial_p (\frac{1}{M} - \frac{1}{n m_t}) + (-1)^{p+1} \sum_{j=1}^{N} (q_{j\bar{p}} - q_{t\bar{p}} (\frac{e_t - e_j}{N m_t} + \frac{2e_j}{M}), \; \bar{p} = 3 - p,$$

$$F = (\nu_1 + \mathcal{E}_2)^2 + (\nu_2 - \mathcal{E}_1)^2, \; \mathcal{E}_j = 2B \sum_{t=1}^{N} e_t q_{tj}, \; V(q) = \sum_{s<t}^{1,N} (V_{st}(|q_s - q_t|)$$
$$V_{st}(|q_1|) = e_s e_t |q_1|^{-\gamma}, \; 0 < \gamma < 2. \tag{1.3}$$

Для простоты будем далее называть рассматриваемую систему атомом, частицу $N1$ – ядром, частицы с номерами $2, 3, \ldots N$ – электронами, хотя случаю атома отвечает только $\gamma = 1$, а мы допускаем любые $\gamma \in (0, 2)$.

1.2. Пусть

$$R_0 = \{q | q = (q_1, \ldots, q_n) | q_i = r_i - \sum_{j=1}^{N} m_j r_j M^{-1}, \; i = 1, 2, \ldots, N\}.$$

В пространстве $L_2(R_0)$ расширим оператор H_0 с области $D(H_0) \equiv C_0^2(R_0)$ до самосопряженного, сохраняя для полученного оператора и его области определения обозначения H_0 и $D(H_0)$.

Пусть S_p – группа перестановок p тождественных элементов и $\alpha_k(p)$, $0 \le k \le p/2$, типы неприводимых представлений этой группы, отвечающие разбиению числа p на k двоек и $p-2k$ единиц, т.е. отвечающие одно- (при $k=0$) или двухстолбцовым схемам Юнга. Пусть $S = S_{N-1}$, $\alpha = \alpha_k = \alpha_k(N-1)$, $0 \le k \le (N-1)/2$. Согласно принципу Паули, только координатные волновые функции симметрии $\alpha = \alpha_k$ могут описывать состояния квантовой системы. Обозначим через $P^{(\alpha)}$ – проектор в $L_2(R_0)$ на подпространство функций симметрии α и положим $H_0^{(\alpha)} = P^{\alpha)} H_0$, $D(H_0^{(\alpha)}) = P^{(\alpha)} D(H_0)$.

В настоящей работе изучается дискретный спектр оператора $H_0^{(\alpha)}$. Далее для произвольного самосопряженного оператора T мы будем обозначать через $\sigma_d(T)$, $\sigma_{ess}(T)$, $\sigma_p(T)$, $\sigma_{pp}(T)$ и $\sigma(T)$ соответственно дискретный, существенный, точечный, чисто точечный и весь спектр оператора T.

1.3. Пусть $Z_t = \{A_1, \dots, A_t\}$ – такое разбиение системы Z_1 на t не пересекающихся кластеров A_j, в котором каждый из кластеров $A_2, \dots, A_t$ состоит из одного электрона, а ядро содержится в кластере A_1. Число $|A_1|$ элементов кластера A_1 обозначим через n. Так как частицы с номерами $2, 3, \dots, N$ – тождественны, то, не ограничивая общностн,можно считать, что $A_1 = \{1, 2, \dots, n\}$, $A_j = \{n+j-1\}$, $j = 2, 3, \dots, t$, где $n > 1$ – некоторое число и $t = N - n + 1$. Положим

$$M[A_1] = \sum_{j=1}^{n} m_j = m_1 + (n-1)m, \; Q[A_1] = \sum_{j=1}^{n} e_j = (n-N)e,$$

$$R_{03}(Z_t) = \{q | q \in R_0, \; \sum_{j=1}^{n} m_j q_{j3} = 0, \; q_{j3} = 0, \; j = n+1, \dots, N\},$$

$$R_{c3}(Z_t) = \{q | q \in R_0, \; q_j = (0, 0, q_{j3}), \; j = 1, \dots, N,$$

$$(q, \tilde{q})_1 = 0 \ \forall \tilde{q} \in R_{03}(Z_t)\},$$

где для любых $q = (q_1, \ldots, q_N)$, $\tilde{q} = (\tilde{q}_1, \ldots, \tilde{q}_N)$ из R_0

$$(q, \tilde{q})_1 = \sum_{j=1}^{N} m_j (q_j, \tilde{q}_j)_{R^3}. \tag{1.4}$$

Оператор энергии составной системы Z_t, состоящей из положительного иона (кластера A_1) и не взаимодействующих между собой и с A_1 электронов с номерами $n+1, n+2, \ldots, N$ (т.е. кластеров $A_2, \ldots, A_t$) после отделения движения центра масс каждого кластера в направлении оси z, записывается в виде

$$H_{03}(Z_t) = T_{0\perp} + T_{03}(Z_t) + F + V_{Z_t}, \tag{1.5}$$

где

$$T_{03}(Z_t) = T_{03}[A_1] = -\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{m_j} \left(\frac{\partial}{\partial q_{j3}(Z_1)} - \frac{m_j}{M[A_1]} \sum_{p=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_{p3}(Z_t)} \right)^2,$$

$$V_{Z_s}(q) = V[A_1] = \frac{1}{2} \sum_{i<j}^{1,n} e_i e_j |q_i - q_j|^{-\gamma},$$

$$q_i - q_j = (q_{i\perp} - q_{j\perp}, q_{i3}(Z_t) - q_{j3}(Z_t)),$$

$$q_{i3}(Z_s) = q_{i3}[A_1] = q_{i3} - \frac{1}{M[A_1]} \sum_{j=1}^{n} m_j q_{j3}, \ i = 1, \ldots, n.$$

Оператор $H_{03}(Z_t)$ будет рассматриваться в пространстве $L_2(R_{03}(Z_t))$.

1.4. Пусть $\hat{S} = \hat{S}(Z_t)$ – группа перестановочной симметрии системы Z_1. Ясно, что $\hat{S}$ является прямым произведением группы S_{n-1} перестановок $n-1$ тождественных электронов из A_1 и группы S_{t-1} перестановок тождественных кластеров – электронов $A_2, \ldots, A_t$. Обозначим возможные типы неприводимых представлений группы $\hat{S}$ в $L_2(R_0)$, $L_2(R_{03}(Z_t))$ и $L_2(R_{03}(Z_t)$ и их матрицы соответственно $\hat{\alpha}, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_c$ и $D_g^{(\hat{\alpha})}, D_g^{(\hat{\alpha}_0)}, D_g^{(\hat{\alpha}_c)}$. Определим понятие индуцирования $\hat{\alpha}_0 = \hat{\alpha}_0(Z_t) \prec \alpha$ так же, как в [2], но в дополнение к [2] отметим, что в частном случае $Z_t = Z_2 = \{A_1, A_2\}$, $A_2 = (N)$, множество $E(\alpha) = \{\hat{\alpha}_)|\hat{\alpha}_0 \prec \alpha_0\}$ легко описать явно ([5]). Пусть $\hat{\alpha}'_0 = \alpha_k(N-2)$ при $k = 0$, $\hat{\alpha}''_0 = \alpha_{k-1}(N-2)$ при $k \geq 1$. Тогда $E(\alpha_k) = \{\hat{\alpha}'_0, \hat{\alpha}''_0\}$ при $0 < k < (N-1)/2$, $E(\alpha_0) = (\hat{\alpha}'_0)$, $E(\alpha_{(N-1)/2}) = (\hat{\alpha}''_0)$ при не четном N. Отметим также, что кратность представлений типа $\hat{\alpha}_0 \in E(\alpha_k)$ группы $\hat{S}$ в представлении типа α_k группы S после сужения последнего с S на $\hat{S}$ равна 1. Обозначим через $P(\hat{\alpha}_0)$ проектор в $L_2(R_{03}(Z_t))$ на подпространство функций симметрии $\hat{\alpha}_0$ и положим

$$H_{03}(\alpha; Z_t) = \sum_{\hat{\alpha}_0 \prec \alpha} H_{03}(Z_t) P^{(\hat{\alpha}_0)},$$

$$\mu^{(\alpha)} = \inf H_{03}(\alpha; Z_2).$$

Теорема 1.1. *Число $\mu^{(\alpha)}$ есть дискретное собственное значение оператора $H_{03}(\alpha; Z_2)$ при любом α и $Z_2 = \{Z_1 \backslash N, N\}$.*

Теорема 1.1 является основным результатом данной работы. Значение ее состоит в том, что она устанавливает справедливость не доказанного ранее соотношения

$$\mu^{(\alpha)} \in \sigma_d(H_{03}(\alpha; Z_2)), \tag{1.7}$$

выполнение которого было условием применимости теоремы об асимптотике дискретного спектра для систем типа атомов [2]. Используя теорему 1.1, легко сформулировать теорему об асимптотике дискретного спектра оператора $H_0^{(\alpha)}$ для атомов, не содержащую никаких дополнительных условий. Эта теорема вытекает из теоремы (1.4) [2] и теоремы 1.1 и формулируется несколько проще и конкретней, чем теорема 1.4 [2] за счет свойств рассматриваемой системы Z_1.

Пусть $W(\alpha; Z_2)$ — собственное подпространство оператора $H_{03}(\alpha; Z_2)$, отвечающее числу $\mu^{(\alpha)}$, и

$$d(\alpha) = \sum_{\hat{\alpha}_0 \prec \alpha} d(\alpha; \hat{\alpha}_0),$$

где $d(\alpha;\hat{\alpha}_0)$ — кратность представления типа $\hat{\alpha}_0$ группы $\hat{S}$ в $W(d;Z_2)$ (т.е. $d(\alpha,\hat{\alpha}_0) = \dim P^{(\hat{\alpha}_0)}W(\alpha;Z_2)/\dim D_g^{(\hat{\alpha}_0)}$). Обозначим через $N(\mu^{(\alpha)}+\lambda; H_0^{(\alpha)})$ размерность линейной оболочки собственных функций оператора $H_0^{(\alpha)}$, отвечающих его собственным значениям, не превосходящим $\mu^{(\alpha)}+\lambda, \lambda < 0$.

Теорема 1.2. *При* $\lambda \to -0$

$$N(\mu^{(\alpha)}+\lambda; H_0^{(\lambda)}) = |\lambda|^{(\gamma-2)/2\gamma} d(\alpha) e^2 \left(\frac{m(M-m)}{M}\right) J(\gamma) + O(|ln\lambda|),$$

где $J(\gamma) = \gamma^{-1} \int\limits_1^\infty (u-1)^{1/2} u^{-(\gamma+1)/\gamma} du$.

Замечания.

1. Для кулоновских взаимодействий $\gamma = 1$ и $J(1) = \pi/2$.
2. Существуют предположения, что

$$d(\alpha_k;\hat{\alpha}_0') = 1,\ d(\alpha_k,\hat{\alpha}_o'') = 0$$

при $k \neq 0, (N-1)/2$,

$$d(\alpha_0;\hat{\alpha}_0') = 1, d_0(\alpha_{\frac{N-1}{2}};\hat{\alpha}_0'') = 1;$$

и, значит, $d(\alpha) = 1$, однако ни одно из этих соотношений пока не доказано.

Доказательство теоремы 1.1 дано в §§2,3.

§2. Доказательство теоремы 1.1

2.1. Мы проведем доказательство без учета симметрии, т.е. вместо оператора $H_{03}(\alpha;Z_t)$ будем рассматривать оператор $H_{03}(Z_t)$. Сначала, используя индукцию по числу n частиц кластера A_1, мы докажем, что

$$\inf H_{03}(Z_t) \in \sigma_{pp}(H_{03}(Z_t)) \tag{2.1}$$

при $Z_t = \{A_1, A_2, ..., A_t\}$, $A_1 = \{1, .., n\}$, $A_j = (n + j - 1)$ для $n = 1, 2, ..., N - 2$ $(t = N, N-1, ..., 3)$, а потом, используя (2.1) для $n = N - 2(t = 3)$, установим справедливость соотношения

$$\mu :\equiv \inf H_{03}(Z_2) \in \sigma_d(H_{03}(Z_2)), \tag{2.2}$$

которое и составляет утверждение теоремы 1.1, когда пренебрегают симметрией.

Предварительно преобразуем оператор $H_{03}(Z_t)$ к новым переменным, выбирая их так, чтобы отделить движение частиц из $A_2, ..., A_t$, т.е. электронов с номерами $n+1, ..., N$. С этой целью в плоскости x, y введем новые координаты $q^0_{j\perp}$ по отношению к центру масс системы $A_2, \ldots, A_t$, а координаты в направлении оси z оставляем прежними, т.е. полагаем

$$q^0_{j\perp} = q^0_{j\perp}(Z_t) = q_{j\perp} - \frac{1}{\omega_n} \sum_{i=n+1}^{N} q_{j\perp},\ j = 1, \ldots N, \tag{2.3}$$

где $\omega_n = N - n$ и

$q^0_{j3} = q_{j3}(Z_t)$, $j = 1, ..., n$; (см. (1.6)), $q^0_{j3} = 0$, $j = n+1, \ldots, N$.

Отметим, что при $n \leq N - 2$ новые координаты линейно зависимы, ибо $\sum\limits_{j=n+1}^{N} m_j q^0_{j\perp} = 0$, а при $n = N - 1$ (т.е. при $t = 2$) $q^0_{N\perp} = 0$. В переменных $q^0_j = (q^0_{j\perp}, q^0_{j3})$ оператор $H_{03}(Z_t)$, определенный в (1.5), запишется в виде

$$H_{03}(Z_t) = \sum_{p=1}^{2} \sum_{k=n+1}^{N} m \Big[\frac{1}{im} \sum_{l=n+1}^{N} \Big(\delta_{kl} - \frac{1}{\omega_n} \Big) \frac{\partial}{\partial q^0_{lp}} + (-1)^p \frac{Be}{m} q^0_{k\bar{p}} -$$

$$- \frac{1}{im\omega_n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q^0_{jp}} + \varphi_{k\bar{p}} \Big]^2 +$$

$$+\sum_{p=1}^{2}\sum_{k=1}^{n} m_k\left(\frac{1}{im_k}\frac{\partial}{\partial q^0_{kp}} - D^0_{kp}\right)^2 + T^0_{03}(Z_t) + V^0_{Z_t} + F^0, \qquad (2.4)$$

где операторы $T^0_{03}(Z_t)$, $V^0_{Z_t}$ и F^0 получаются из $T_{03}(Z_t)$, V_{Z_t} и F, если там вместо q_{jp} написать q^0_{jp},

$$D^0_{kp} = \varphi_{k\bar{p}} + (-1)^p B e_k m_k^{-1} q^0_{k\bar{p}},\ \bar{p} = 3 - p,$$

$$\varphi_{kp} \equiv \nu_p\left(\frac{1}{M} - \frac{1}{m_k N}\right) + (-1)^{p+1} B \sum_{j=1}^{n} q^0_{j\bar{p}}\left(\frac{e_k - e_j}{m_k N} + \frac{2e_j}{M}\right)$$

и $\varphi_{k\bar{p}} = \varphi_{2\bar{p}},\ k = 3, \ldots, N$.

Отметим, что при переходе от (1.5) к (2.4) мы использовали очевидные равенства

$$\frac{\partial}{\partial q_{i\perp}(Z_t)} = \frac{\partial}{\partial q^0_{i\perp}},\ i = 1, \ldots, n,$$

$$\frac{\partial}{\partial q_{i\perp}(Z_t)} = \sum_{k=1}^{N}\frac{\partial}{\partial q^0_{k\perp}}\left(\delta_{ki} - \frac{1}{\omega_n}\right),\ i = n+1, \ldots, N$$

и поэтому

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial q_{i\perp}(Z_t)} = 0.$$

Возводя в квадрат выражение в квадратных скобках в (2.4) и учитывая, что

$$\sum_{j=n+1}^{N} q^0_{jp} = 0,\ \sum_{j=n+1}^{N}\left(\delta_{ij} - \frac{1}{\omega_n}\right) = 0,\ i = n+1, \ldots, N,$$

мы получим, что оператор $H_{03}(Z_t)$ запишется в виде суммы операторов $H_{03}[A_1]$ и $H_{03}(\sum_{t-1})$, являющихся операторами энергии кластера A_1 и $(t-1)$-кластерной составной системы

$$\sum\nolimits_{t-1} = \{A_2, \ldots, A_t\}$$

(состоящей из не взаимодействующих между собой кластеров A_j), и зависящих соответсвенно от переменных q_j^0, $j=1,\dots,n$ и $q_{j\perp}^0$, $j=n+1,\dots,N$, т.е.

$$H_{03}(Z_t)=H_{03}[A_1]\otimes I(\textstyle\sum_{t-1})+I[A_1]\otimes H_{03}(\textstyle\sum_{t-1}), \tag{2.5}$$

где

$$H_{03}[A_1]=T_{0\perp}^0[A_1]+T_{03}^0[A_1]+F^0+V^0[A_1]; \tag{2.6}$$

$$T_{0\perp}^0[A_1]=\sum_{p=1}^{2}\sum_{j=1}^{n}\Big\{m_j\Big(\frac{1}{im_j}\frac{\partial}{\partial q_{jp}^0}-D_{jp}^0\Big)^2+$$

$$+\omega_n m\Big(-\frac{1}{im\omega_n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial q_{jp}^0}+\varphi_{2\overline{p}}\Big)^2\Big\}.$$

$$H_{03}(\textstyle\sum_{t-1})=\displaystyle\sum_{p=1}^{2}\sum_{l=n+1}^{N}\frac{1}{m}\left[\frac{1}{i}\sum_{j=k+1}^{n}\Big(\delta_{jl}-\frac{1}{\omega_n}\Big)\frac{\partial}{\partial q_{jp}^0}+(-1)^p q_{l\overline{p}}^0 Be\right]^2, \tag{2.7}$$

$I[A_1]$ и $I(\sum_{t-1})$ – единичные операторы в пространствах функций, зависящих соответственно от $q_1^0,\dots,q_n^0$ и $q_{n+1\perp}^0,\dots,q_{N\perp}^0$; $T_{03}^0[A_1]=T_{03}^0(Z_t)$, $V^0[A_1]=V_{Z_t}^0$.

2.2. Оператор $H_{03}(\sum_{t-1})$ при $t>2$ имеет чисто точечный спектр (при $t=2$ в силу (2.7) $H_{03}(F)\equiv 0$). Действительно, по построению

$$H_{03}(\textstyle\sum_{t-1})+T_{0\perp}^0[A_1]+F^0=T_{0\perp}+F=H_{03}(Z_N), \tag{2.8}$$

где $H_{03}(Z_N)$ – оператор кинетической энергии движения в плоскости x,y системы N не взаимодействующих между собой частиц, находящихся в однородном магнитном поле с направлением оси z после фиксации псевдомомента. До такой фиксации гамильтониан системы Z_N (отвечающей движению в плоскости x,y) имел бесконечно вырожденный точечный спектр, состоящий из сумм уровней Ландау по всем частицам системы. Поэтому и гамильтониан $H_{03}(Z_N)$, полученный после фиксации псевдомомента, также имеет чисто точечный спектр. Таким образом, в силу (2.8) сумма операторов $H_{03}(\sum_{t-1})$ и $T^0_{0\perp}[A_1] + F^0$ имеет чисто точечный спектр. Так как эти операторы зависят от различных переменных, то

$$\sigma(H_{03}(\sum\nolimits_{t-1})) = \sigma_{pp}(H_{03}(\sum\nolimits_{t-1})).$$

Далее, поскольку оператор $H_{03}(\sum_{t-1})$ зависит только от переменных $q^0_{n+1,\perp}, \ldots, q^0_{N\perp}$, а оператор $H_{03}[A_1]$ – только от $q^0_1, \ldots, q^0_n$, то доказываемое нами включение (2.1) с $Z_t = \{A_2, \ldots, A_t\}$ эквивалентно включению

$$\inf H_{03}[A_1] \in \sigma_{pp}(H_{03}[A_1]). \tag{2.9}$$

Именно (2.9) мы и установим далее.

2.3. Для доказательства (2.9) применим индукцию по числу n элементов кластера A_1. Пусть $n = 1$, т.е. $A_1 = (1)$. Тогда $t = N$, $Z_t = Z_N$ и включения (2.1), (2.9) следуют из уже проведенных рассуждений. Предположим, что для некоторого n, $1 \le n \le N - 2$, и разбиения $Z_t = \{A_1, \ldots, A_t\}$ с $A_1 = (1, \ldots, n)$, $A_j = (n + j - 1)$, $j = 2, \ldots, t$, выполняется включение (2.9) и, следовательно, (2.1). Пусть $Z'_{t-1} = \{A'_1, \ldots A'_{t-1}\}$, $\sum'_{t-2} = \{A'_2, \ldots, A'_{t-1}\}$, где $A'_1 = A_1 \bigcup A_2 = (1, 2, \ldots, n + 1)$, $A'_j = A_{j+1} = (n + j)$, $j = 2, \ldots, t - 1$.

Определим операторы $H_{03}(Z'_{t-1})$, $H_{03}[A'_1]$, $T^0_{0\perp}[A'_1]$, $T_{03}[A'_1]$, $V^0[A'_1]$, $H_{03}(\sum'_{t-2})$, $I[A'_1]$ и $I(\sum'_{t-2})$ так же, как были определены аналогичные операторы для распадений Z_t и $\sum_{t-1}$ и кластера A_1 в (2.3), (2.5)-(2.7), если заменить там n на $n + 1$, A_1 на A'_1, Z_t на Z'_{t-1}, $\sum_{t-1}$ на $\sum'_{t-2}$ и переменные $q^0_j = (q^0_{j1}, q^0_{j2}, q^0_{j3})$ на $q'_j = (q'_{j1}, q'_{j2}, q'_{j3})$, где $q'_{j\perp} = q_{j\perp} - \frac{1}{\omega_{n+1}} \sum\limits_{k=n+2}^{N} q_{k\perp}$ $j + 1, 2, \ldots, N$, $q'_{j3} = q_{j3} - \sum\limits_{k=1}^{n+1} q_{k3} m_k \cdot M[A'_1]$ $j = 1, \ldots, n + 1$. Тогда, аналогично (2.5), получим, что

$$H_{03}(Z'_{t-1}) = H_{03}[A'_1] \otimes I(\sum\nolimits'_{t-2}) + I[A'_1] \otimes H_{03}(\sum\nolimits'_{t-2}). \tag{2.10}$$

Мы будем доказывать включение

$$\inf H_{03}[A_1'] \in \sigma_{pp}(H_{03}[A_1']), \tag{2.11}$$

которое в силу (2.10) эквивалентно включению

$$\inf H_{03}(Z_{t-1}') \in \sigma_{pp}(H_{03}(Z_{t-1}')) \tag{2.12}$$

(по тем же причинам, по которым равносильны соотношения (2.1) и (2.9)).

2.4. Положим

$$\hat{H}_{03}[A_1'] = H_{03}[A_1'] - \sum_{j=1}^{n} \frac{e_j e_{n+1}}{|q_j' - q_{n+1}'|^{\gamma}} - T_{03}^0[A_1'] + T_{03}^0[A_1]. \tag{2.13}$$

$\hat{H}_{03}[A_1']$ – оператор энергии системы, полученной из кластера A_1' после его разделения на не взаимодействующие друг с другом кластеры $A_1 = (1, 2, \ldots, n)$, $A_2 = (n+1)$ и отделения движения центра масс этих кластеров в направлении 3-ей оси. Отметим, что оператор $\hat{H}_{03}[A_1']$ зависит от двух видов координат: $q_{j\perp}'$ и q_{j3}^0 (говоря так, мы учитываем, что для входящих в аргументы потенциалов разностей $q_{j3}' - q_{i3}'$ выполняется равенство $q_{j3}' - q_{i3}' = (q_{i3}^0 - q_{j3}^0)$.

Пусть

$$\hat{\mu} = \inf \hat{H}_{03}[A_1']. \tag{2.14}$$

Согласно теореме 3.1 (см. §3),

$$\sigma_{ess}(H_{03}[A_1']) = [\hat{\mu}, +\infty). \tag{2.15}$$

(Отметим, что именно доказательство утверждения (2.15) составляло главную трудность, преодоленную в работе.) Далее мы покажем, что

$$inf H_{03}[A_1'] < \hat{\mu}$$

и, значит,

$$inf H_{03}[A_1'] \in \sigma_d(H_{03}[A_1']).$$

Чтобы сделать это, сначала убедимся в том, что $\hat{\mu} \in \sigma_{pp}(\hat{H}_{03}[A_1'])$ (п.2.5), а потом, используя это, построим пробную функцию ψ_s, для которой $(H_{03}[A_1']\psi_s, \psi_s) < \hat{\mu}\|\psi_s\|^2$, (пп.2.6–2.8).

2.5. Положим

$$\hat{H}_{03}(Z_t) = \hat{H}_{03}[A_1'] \otimes I(\sum\nolimits_{t-1}') + I[A_1'] \otimes H_{03}(\sum\nolimits_{t-2}'). \qquad (2.16)$$

Операторы $\hat{H}_{03}(Z_t)$ и $H_{03}(Z_t)$ – это операторы энергии одной и той же составной системы $Z_t = \{A_1, A_2, \ldots, A_t\}$, состоящей из не взаимодействующих между собой кластеров A_j после отделения движения центра масс каждого кластера в направлении оси z, но записаны они в разных переменных: оператор $\hat{H}_{03}(Z_t)$ зависит от $q_{j\perp}'$ $j = 1, 2, \ldots, N$, q_{j3}^0 $j = 1, 2, \ldots, n$, а оператор $H_{03}(Z_t)$ – от переменных $q_{j\perp}^0$ $j = 1, \ldots, N$, q_{j3}^0 $j = 1, \ldots, n$. Ясно, что оба этих оператора имеют один и тот же спектр. В силу индукционного предположения (2.1) для системы Z_t $\inf H_{03}(Z_t) \in \sigma_{pp}(H_{03}(Z_t))$ и, значит,

$$\inf \hat{H}_{03}(Z_t) \in \sigma_{pp}(\hat{H}_{03}(Z_t)). \qquad (2.17)$$

В силу (2.16) оператор $\hat{H}_{03}(Z_t)$ есть сумма операторов $\hat{H}_{03}[A_1']$ и $H_{03}(\sum_{t-2}')$, зависящих от различных переменных, и поэтому

$$\hat{\mu} = \inf \hat{H}_{03}[A_1'] \in \sigma_{pp}(\hat{H}_{03}[A_1']). \qquad (2.18)$$

2.6. Пусть u – нормированная собственная функция оператора $\hat{H}_{03}[A_1']$, отвечающая его собственному значению $\hat{\mu}$. Функция u зависит от переменных $q_{j\perp}'$ $j = 1, \ldots, n+1$, q_{j3}^0 $j = 1, 2, \ldots, n$. Пусть $q_{n+1,3}^0 = q_{n+1,3} - M[A_1]^{-1} \sum\limits_{k=1}^{n} m_k q_{k3}^0$ и $\psi_s = s^{1/2} f(s q_{k+1,3}^0) u$, где $f(\cdot)$ – произвольная нормированная гладкая функция одной переменной, равная нулю в окрестности нуля; $s > 0$ – параметр. В п.2.7 мы покажем, что при малых s

$$(H_{03}[A_1']\psi_s, \psi_s) < \hat{\mu}. \qquad (2.19)$$

Тогда, отсюда и из (2.15) будет следовать, что

$$inf H_{03}[A_1'] \in \sigma_d(H_{03}[A_1']), \tag{2.20}$$

а, значит, и справедливость соотношений (2.11), (2.12) для $n = 1, 2, \ldots, N-2$ $(t = N, N-1, \ldots, 3)$. Таким образом, индукция будет завершена. Но одновременно тем самым будет доказано, что из (2.9) следует (2.20).

Возьмем $n = N - 2$. Тогда $t = 3$ и $H_{03}(\sum_{t-2}') = H_{03}[A_2'] \equiv 0$. Поэтому в силу (2.10) для разбиения $Z_2' = \{A_1', A_2'\}$ с $A_1' = (1, 2, \ldots, N-1)$, $A_2' = (N)$ выполняется

$$H_{03}(Z_2') = H_{03}[A_1']. \tag{2.21}$$

Используя теперь (2.9) для $n = 2$,мы в силу (2.20), (2.21) получаем включение (2.2)

$$inf H_{03}(Z_2') \in \sigma_d(H_{03}(Z_2')),$$

которое и требовалось доказать.

2.7. Чтобы доказать (2.19), мы воспользуемся выражением оператора $H_{03}[A_1']$ из (2.13). Предварительно заметим, что после введения в операторе $T_{03}^0[A_1']$ координат q_{j3}^0, вместо q_{j3}' мы получим, что

$$T_{03}^0[A_1'] = T_{03}^0[A_1] - d_0 \frac{\partial^2}{\partial q_{n+1,3}^0},$$

где $d_0 = M[A_1]^{-1} + m^{-1}$. Поэтому и в силу (2.13)

$$H_{03}[A_1'] = \hat{H}_{03}[A_1] + \sum_{j=1}^{n} \frac{e_j e}{|q_j' - q_{n+1}'|^\gamma} - d_0 \frac{\partial^2}{\partial q_{n+1,3}^0}$$

и, значит,

$$(H_{03}[A_1']\psi_s, \psi_s) = \hat{\mu} + d_0 s^2 \int \left| \frac{df}{dq_{n+1,3}^0} \right|^2 dq_{n+1,3}^0 + s^\gamma e \sum_{j=1}^{n} e_j c_j(s), \tag{2.20}$$

где

$$c_j(s) = \int \frac{|u|^2 |f(q^0_{n+1,3})|^2 dq'_1 \ldots dq'_n dq'_{n+1,\perp} dq^0_{n+1,3}}{[s^2(q'_{j1} - q'_{n+1,1})^2 + s^2(q'_{j2} - q'_{n+1,2})^2 + (sq^0_{j3} - q^0_{n+1,3})^2]^{\gamma/2}}.$$

Нетрудно показать, что

$$\lim_{s\to 0} c_j(s) = c_1(0) > 0 \; j = 1, 2, \ldots, n.$$

Поэтому, и так как $\sum\limits_{j=1}^{N} e_j = 0,\; e_j = e$ при $j > 2$, имеем

$$\lim_{s\to 0} e \sum_{j=1}^{n} e_j c_j(s) = -c_1(0)(N-n)e^2 < 0. \qquad (2.21)$$

Поскольку $\gamma < 2$, то из (2.20) и (2.21) при малом s следует (2.19). Таким образом, теорема 1.1 доказана, если верно равенство (2.15), или хотя бы включение

$$\sigma_{ess}(H_{03}[A'_1]) \subseteq [\hat{\mu}, +\infty), \qquad (2.22)$$

ибо именно на нем основан вывод соотношения (2.20) из неравенства (2.19). Мы докажем (2.22) в §3.

§3. О существенном спектре гамильтонианов положительных ионов

3.1. Пусть $A'_1 = (1, 2, \ldots, n+1)$, операторы $H_{03}[A'_1]$, $\hat{H}_{03}[A'_1]$ и число $\hat{\mu}$ – те же, что в п.п. 2.3, 2.4. Имеет место

Теорема 3.1. *Для оператора* $H_{03}[A'_1]$

$$\sigma_{ess}(H_{03}[A'_1]) = [\hat{\mu}, +\infty). \qquad (3.1)$$

Замечание. Данная теорема отвечает на вопрос о локализации существенного спектра оператора энергии $H_{03}[A'_1]$ положительного иона A'_1 с зарядом $(n - N + 1)e$, полученного из оператора нейтрального атома в однородном магнитном поле после фиксации обеих компонент псевдомомента атома, отделения движения центра масс A_1' в направлении оси z и удаления из атома $(N-n-1)$ электронов. Согласно теореме 3.1,граница $\hat{\mu}$ существенного спектра оператора $H_{03}[A_1']$ определяется распадением иона A_1' на ион $A_1 = (1,2,\ldots,n)$ с зарядом $(n-N)e$ и электрон с номером $n+1$. Другими словами, теорема 3.1 утверждает справедливость ХВЖ-теоремы [1] для оператора $H_{03}[A_1']$. Именно этот факт играет решающую роль в доказательстве теоремы 1.1. Однако теорема 3.1 имеет и самостоятельное значение, то есть является первым результатом о спектре гамильтонианов (+)-ионов в однородном магнитном поле после фиксации псевдомомента *атома*. В то же время, если отвлечься от нужд доказательства теоремы 1.1, то следует отметить, что для исследования гамильтонианов положительных ионов в магнитном поле возможен и другой подход, когда изучается оператор, полученный из гамильтониана положительного иона после редукции этого оператора на подпространство состояний с фиксированной компонентой псевдомомента *иона* (фиксировать обе компоненты — как для нейтрального атома нельзя, так как хотя операторы — компоненты псевдомомента перестановочны с оператором энергии иона — но они не коммутируют друг с другом). При таком подходе получается оператор, для которого существенный спектр найден в [6], однако этот оператор отличен от $H_{03}[A_1']$ и поэтому мы не можем воспользоваться результатами [6].

3.2. Доказательство. Мы будем доказывать не равенство (3.1), а только включение

$$\sigma_{ess}(H_{03}[A_1']) \subseteq [\hat{\mu}, +\infty). \tag{3.2}$$

Это связано с тем, что, во-первых, именно оно используется в доказательстве теоремы 1.1 (см. (2.22)) и, во-вторых, противоположное включение проверяется стандартным образом. Для краткости положим далее

$$n_0 = n+1, \ \sigma_1 = A_1' = (1,2,\ldots,n), \ \mathcal{H}_0 = H_{03}[A_1'].$$

Таким образом, $\mathcal{H}_0$ — гамильтониан n_0-частичной подсистемы σ_1 из Z_1, полученный следующим образом: мы фиксировали обе компоненты псевдомомента всей системы Z_1, отбросили взаимодействия частиц из $Z_1 \backslash \sigma_1$ между собой и с частицами из σ_1, отделили движение центров масс σ_1 и каждой частицы из $Z_1 \backslash \sigma_1$ в направлении оси z, ввели относительные координаты (2.2) с заменой там n на n_0 и после этого убрали из полученного гамильтониана (2.10) члены с переменными q_j^0 $j = n+1, \ldots, N$.

Для доказательства соотношения (3.2) здесь используется та же схема разбиения конфигурационного пространства системы, которая была успешно применена нами в [4] для локализации существенного спектра гамильтонианов не нейтральных систем в невозрастающих магнитных полях на подпространство функций фиксированного типа $SO(2)$ симметрии. Идейная сторона этой схемы подробно обсуждается в пп. 3.3–3.5, а ее "привязка" к оператору $\mathcal{H}_0$ сделана в пп. 3.6, 3.7. Однако поскольку оператор $\mathcal{H}_0$ не обладает $SO(2)$ симметрией, применение которой играет в [4] решающую роль, то весьма существенная часть оценок из [4], обеспечения там теоремой 2.2, требует здесь другого доказательства. Мы проводим его в п. 3.8.

3.3. Пусть

$$R_0' = \{q' | q' = (q_1', \ldots, q_{n_0}'), q_j' = (q_{j\perp}', q_{j3}'), \sum_{j=1}^{n_0} m_j q_{j3}' = 0\}$$

и последовательность функций $g_k(q')$ такова, что $g_k(q') \in C_0^2(R_0')$, $\|g_k\| = 1$, $g_k \to 0$ в $L_2(R_0')$. Для доказательства (3.2) достаточно проверить, что

$$\underline{\lim}(\mathcal{H}_0 g_k, g_k) \geq \hat{\mu}. \tag{3.3}$$

Строгий вывод неравенства (3.3) содержится в пп. 3.6, 3.7, а здесь и в пп. 3.4, 3.5 мы обсудим основные идеи этого вывода.

Чтобы получить (3.3), проводится специальное разбиение конфигурационного пространства R_0': мы выделяем в R_0' такие области Ω', Ω'', что

a) в них спектр оператора $\mathcal{H}_0$ с граничными условиями Дирихле дискретен и нормы функций g_k стремятся к нулю,

b) вне $\Omega' \bigcup \Omega''$ каждая точка q' отвечает какому-либо распадению $\sigma_s = \{C_1, \ldots, C_s\}$ системы σ_1 на не взаимодействующие не пересекающиеся между собой кластеры $C_1, \ldots, C_s$.

Тогда в силу b) мы сможем разбить область $R_0' \backslash (\Omega' \bigcup \Omega'')$ на подобласти $\Omega(\sigma_s)$, отвечающие всевозможным распадениям σ_s, и оценить снизу квадратичную форму $(\mathcal{H}_0 g_k u_{\sigma_s}, g_k u_{\sigma_s})$ по всем $\Omega(\sigma_s)$ $s \geq 2$ (здесь u_{σ_s} — сглаживающая функция). Суммируя найденные оценки по всем σ_s, получим

$$\underline{\lim}(\mathcal{H}_0 g_k, g_k) \geq \mu',$$

где $\mu' = \inf \mathcal{H}_{03}(\sigma_s)$, $\mathcal{H}_{03}(\sigma_s)$ — оператор энергии составной системы $\sigma_s = \{C_1, \ldots C_s\}$, после отделения движения центра масс каждого кластера в направлении оси z (см.п. 3.6). Но $\mu = \hat{\mu}$ (см. п.3.5) и тем самым (3.3) будет доказано.

3.4. Опишем теперь идею построения областей Ω', Ω'' с требуемыми свойствами a), b).

Пусть

$$X_3' = \{q_{13}', \ldots, q_{n_0 3}'\}, \ R_{03}' = \{X_3' | \sum_{j=1}^{n_0} m_j q_{j3} = 0\},$$

$$\Omega = \{q' | q' \in R_0', \quad |X_3'|_1 \leq b(1)\}, \quad \overline{\Omega} = R_0' \backslash \Omega,$$

где $|X_3'|_1^2 = \sum\limits_{j=1}^{n_0} m_j q_{j3}^2$, $b(1)$ — большое число. Поскольку 3-я координата центра масс системы σ_1 в R_0' равна нулю, а в области $\overline{\Omega}$ выполняется $|X_3'|_1 > b(1)$, то при нахождении системы σ_1 в $\overline{\Omega}$ расстояние хотя бы одной частицы до центра масс будет велико за счет составляющей этого расстояния в напрвлении оси z. Поэтому область $\overline{\Omega}$ представима в виде суперпозиции областей $\overline{\Omega}_0(\sigma_s)$, отвечающих при $b(1) \gg 1$ всевозможным разбиениям σ_s

$s \geq 2$ системы $\sigma_1 \equiv A_1'$ за счет больших расстояний $|q_{i3}' - q_{j3}'|$ при i, j, принадлежащих различным кластерам из σ_s. Исходя из этого, как и в [4], мы проводим разбиение области $\overline{\Omega}$ по переменным $X_3' \in R_{03}'$ при любых фиксированных значениях остальных переменных.

3.5. Далее осуществляется разбиение области Ω по переменным $q_\perp' = (q_{1\perp}, \ldots, q_{n_0\perp}')$ при фиксированных переменных X_3'. Для этого в пространстве $R^{2n_0} = \{q_\perp' | q_\perp' = (q_{1\perp}', \ldots, q_{n_0\perp}')\}$ введем подпространство относительного движения $R_{0\perp}' = \{q_\perp' | q_\perp' \in R^{2n_0},\ \sum\limits_{j=1}^{n_0} m_j q_{j\perp} = 0\}$, новое скалярное произведение

$$(q', \tilde{q}')_2 = \sum_{j=1}^{n_0} (q_{j1}' \tilde{q}_{j1}' + q_{j2}' \tilde{q}_{j2}') m_j$$

и проекторы – в смысле $(\cdot, \cdot)_2$ – $P_{0\perp}'$ на $R_{0\perp}'$ и $P_{c\perp}'$ на $R^{2n_0} \ominus R_{0\perp}'$. Определим в R^{2n_0} "усеченный конус"

$$K(a; \beta) = \{q_\perp' | q_\perp' \in R^{2n_0},\ |q_\perp'|_2 \geq a,\ |P_{0\perp} q_\perp'|_2 \leq \beta |P_{c\perp} q_\perp'|_2\} \tag{3.4}$$

и области

$$\widehat{\Omega} = \{q_\perp' | q_\perp' \in R^{2n_0},\ |q_\perp'|_2 < a\},\ \Omega^0 = \{q_\perp' | q_\perp' \in R^{2n_0},$$

$$|q_\perp'|_2 \geq a,\ |P_{0\perp} q_\perp'|_2 > \beta |P_{c\perp} q_\perp'|_2\}$$

$$\overline{K}(a, \beta) \equiv R^{2n_0} \backslash K(a, \beta) = \widehat{\Omega} \bigcup \Omega^0,$$

где в силу равенств (1.5) [4]

$$|P_{0\perp} q_\perp'|_2^2 = \sum_{j=1}^{n_0} m_j |q_{j\perp}' - q_{c\perp}'|^2,\ |P_{c\perp} q_\perp'|_2^2 = M[\sigma_1] ||q_{c\perp}||^2, \tag{3.5}$$

$$q_{c\perp}' = \sum_{j=1}^{n_0} m_j q_{j\perp}' M[\sigma_1]^{-1},\ M[\sigma_1] = \sum_{j=1}^{n_0} m_j.$$

Поскольку

$$|P_{0\perp}q'_\perp|_2^2 + |P_{c\perp}q'_\perp|_2^2 = |q'_\perp|_2^2,$$

то в Ω^0 выполняется

$$(1+\beta^{-2})|P_{0\perp}q'_\perp|_2^2 \geq a^2$$

и, значит, при большом $a = a(\beta)$ величина $|P_{0\perp}q'_\perp|_2$ велика. Поэтому и в силу (3.5) при $q'_\perp \in \Omega^0$ расстояние в R^{2n_0}, хотя бы одной частицы из системы σ_1 до ее центра масс,велико. Следовательно, область $\Omega^0 \otimes R'_{03}$ состоит из точек, отвечающих распадениям σ_s системы σ_1 в R'_0 за счет распадений в R^{2n_0}, и оценка квадратичной формы оператора $\mathcal{H}_0$ в $\Omega^0 \otimes R'_{03}$ может быть проведена путем разбиения $\Omega^0 \otimes R'_0$ на области, порождаемые разбиением Ω^0 на подобласти, соответствующие распадениям σ_s в R^{2n_0}.

Таким образом, из всех точек конфигурационного пространства R'_0 у нас остались не рассмотренными только точки, лежащие в областях

$$\Omega' = (\hat{\Omega} \otimes R'_{03}) \bigcap \Omega, \ \Omega'' = (K(a;\beta) \otimes R_{03}) \bigcap \Omega.$$

В этих областях на функциях, равных нулю на $\partial\Omega', \partial\Omega''$, оператор $\mathcal{H}_0$ имеет чисто дискретный спектр. Для области Ω' это очевидно, ибо она ограничена. Для области Ω'' сделанное утверждение доказывается в п. 3.8. Это доказательство является принципиально новым моментом по сравнению с [4]. Действительно, в [4] дискретность спектра в области Ω'' доказывалась только для ограничений рассматриваемых там операторов на подпространства функций фиксированной $SO(2)$ симметрии, в то время как здесь нам необходимо установить дискретность спектра $\mathcal{H}_0$ в Ω'' без ограничения оператора $\mathcal{H}_0$ на какие-либо подпространства; к тому же оператор $\mathcal{H}_0$ вообще не обладает $SO(2)$ симметрией, так что подход [4] для доказательства дискретности спектра $\mathcal{H}_0$ в Ω'' не может быть применен в принципе.

Из свойств спектра $\mathcal{H}_0$ и леммы 3.1 [4] следует, что

$$\lim \|g_k\|_{\Omega'} = \lim \|g_k\|_{\Omega''} = 0.$$

Таким образом, области Ω', Ω'' обладают требуемыми свойствами.

3.6. Обсудив основные идеи доказательства, переходим к их технической реализации.

Пусть $\sigma_s = \{C_1, \dots, C_s\}$, $M[C_k] = \sum\limits_{j \in C_k} m_j$,

$$R_0'(\sigma_s) = \{q' | q' = \{q1', \dots, q_{n_0}'), q_i' = (q_{i\perp}', q_{i3}'), \sum_{j \in Ck} m_j q_{j3}' = 0\,,$$

$$k = 1, 2, \dots, s\},$$

$$V_{\sigma_s} = \sum_{k=1}^{s} \sum_{i,j \in C_k} e_i e_j |q_i' - q_j'|^{-\gamma},$$

$$T_\perp^0(\sigma_s) = T_{0\perp}^0[A_1'],$$

$$T_{03}(\sigma_s) = \sum_{k=1}^{s} \sum_{j \in C_k} \frac{1}{m_j} \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q_{j3}'} - \frac{1}{M[C_k]} \sum_{p \in C_k} \frac{\partial}{\partial q_{p3}'} \right)^2,$$

$$\mathcal{H}_{03}(\sigma_s) = T_\perp^0(\sigma_s) + T_{03}(\sigma_s) + V\sigma_s.$$

Оператор $\mathcal{H}_{03}(\sigma_s)$ мы рассматриваем в пространстве $L_2(R_0'(\sigma_s))$. Пусть

$$\mu(\sigma_s) = \inf \mathcal{H}_{03}(\sigma_s),\ \mu' = \min_{\sigma_s, s \geq 2} \mu(\sigma_s).$$

Прежде всего покажем, что

$$\mu' = \hat{\mu}\ . \tag{3.6}$$

В разбиении $\sigma_s = \{C_1, \dots, C_s\}$ обозначим через C_1 кластер, содержащий ядро (частицу номер 1). Не ограничивая общности, можно считать, что C_1 состоит из частиц с номерами $1, 2, \dots, p$, $p \geq 1$. Тогда кластеры C_s $s \geq 2$, для которых $|C_s| \geq 2$, содержат положительные потенциалы взаимодействия частиц из C_s между собой. Поэтому дробление каждого из них на отдельные частицы может только уменьшить оператор и, следовательно, для распадения $\sigma^{(1)}_{n_0-p+1} = \{C_1, C'_2, \dots, C'_{n_0-p+1}\}$ с $C'_j = p+j-1$ для $j = 2, 3, \dots, n_0-p+1$, выполняется неравенство

$$\mathcal{H}(\sigma^{(1)}_{n_0-p+1}) < \mathcal{H}(\sigma_s). \tag{3.7}$$

Рассмотри далее разбиение $\sigma^{(2)}_{n_0-p} = \{C^{(1)}_1, C'_3, \dots, C'_{n_0-p+1}\}$, полученное из $\sigma^{(1)}_{n_0-p+1}$ объединением кластеров C_1 и C_2: $C^{(1)}_1 = C_1 \bigcup C'_2$, и покажем, что такое объединение не приводит к возрастанию нижней грани оператора энергии, то есть что

$$\inf \mathcal{H}_0(\sigma^{(2)}_{n-p}) \leq \inf \mathcal{H}_0(\sigma^{(1)}_{n_0-p+1}). \tag{3.8}$$

Действительно, пусть функции $\varphi, f \in C^2_0$, φ зависит от переменных $q'_{j\perp}$ $j = 1, \dots, n_0$, q'_{j3} $j = 1, \dots, p$, где $\sum\limits_{j \in C'_1} m_j q'_{j3} = 0$, f зависит от $\hat{q}_{p+1,3} \equiv q'_{p+1,3} - M[C_1]^{-1} \sum\limits_{t=1}^{p} m_t q'_{t3}$, $\|f\| = 1$, $f_\alpha = \alpha^{1/2} f(\alpha \hat{q}_{p+1,3})$ и $\psi_\alpha = \varphi f \alpha$. Тогда легко показать, что

$$\lim_{a \to 0} (\mathcal{H}_0(\sigma^{(2)}_{n_0-p}), \psi_\alpha, \psi\alpha) = (\mathcal{H}_0(\sigma^{(1)}_{n_0-p+1}), \varphi, \varphi).$$

Откуда и следует (3.8). Далее присоединим к $C^{(1)}_1$ кластер $C'_3 = (p+2)$, положим $C^{(2)}_1 = C^{(2)}_1 \bigcup C'_3$ и для разбиения $\sigma^{(3)}_{n_0-p-1} = \{C^{(2)}_1, C'_4, \dots, C_{n_0-p+1}\}$ так же, как (3.8), получим, что

$$\inf \mathcal{H}_0(\sigma^{(3)}_{n_0-p-1}) \leq \inf \mathcal{H}_0(\sigma^{(2)}_{n_0-p})$$

и т.д. вплоть до разбиения

$$\sigma^{(n_0-p)}_2 = \{(1, 2, \dots, n_0-1), (n_0)\} = \sigma_2$$

и, значит, $\mu' = \hat{\mu}$.

3.7. Пусть последовательность g_k — та же, что в п.3.2. Чтобы доказать включение (3.2), нам достаточно установить (3.3). Мы следуем рассуждениям [4], начиная с п.3.2, предварительно заменив там H_0, $\mu^{(m)}$, Z_s, R_0, n, k_i, X_3, x_{i3}, r, r_j, ρ, ρ_j соответственно на $\mathcal{H}_0$, μ', σ_s, R_0', n_0, m_i, X_3', q_{i3}', q', q_j', $q_\perp'$, $q_{j\perp}'$ и проектор $P^{(m)}$ — на единичный оператор. После этого все рассуждения проходят тождественно так же, как и до замены, кроме доказательства того факта, что оператор $\mathcal{H}_0$ в области

$$\Omega_0 = \{q' | q' \in R_0', |X_3'|_1 \le b(1),\ q_\perp' \in K(b(1), b(2))\}$$

с нулевым граничным условием на $\partial\Omega_0$ имеет чисто дискретный спектр. Обозначим замыкание оператора $\mathcal{H}_0$ в пространстве $L_2(\Omega_0)$ с области $C_0^2(\Omega_0)$ через $\mathcal{H}_{0,0}$ и докажем, что $\sigma(\mathcal{H}_{0,0}) = \sigma_d(\mathcal{H}_{0,0})$, или, что то же,

$$\sigma_{ess}(\mathcal{H}_{0,0}) = \emptyset \ . \tag{3.9}$$

3.8. Положим $W_2 = W_1 + V_{\sigma_1}$,

$$W_1 = 0.5(T_\perp^0[\sigma_1] + T_{03}[\sigma_1] + F^0), \tag{3.10}$$

где операторы в правой части (3.10) те же, что в определении $\mathcal{H}_0$. Оператор W_2 полуограничен снизу, так как этим свойством обладал оператор, полученный из оператора энергии системы $Z_1 = \{1, 2, \ldots, N\}$ до фиксации псевдомомента в результате умножения "кинетической части" этого оператора на 0.5. Поэтому для некоторого $c > 0$

$$\mathcal{H}_{0,0} \equiv W_1 + W_2 \ge W_1 - c \ . \tag{3.11}$$

Покажем, что $\sigma_{ess}(W_1) = \emptyset$, откуда в силу (3.11) будет следовать, что $\sigma_{ess}(\mathcal{H}_{0,0}) = \emptyset$. Предположим, что $\sigma_{ess}(W_1) \ne \emptyset$ и $\lambda \in \sigma_{ess}(W_1)$. Тогда найдется такая последовательность функций φ_p из $C_0^2(\Omega_0)$, $\|\varphi_p\| = 1$, $\varphi_p \rightharpoonup 0$ в $L_2(\Omega_0)$, что

$$\lim_{p\to\infty} (W_1\varphi_p, \varphi_p) = \lambda.$$

Так как оператор W_1 есть сумма 3-ёх неотрицательных операторов, то

$$\overline{\lim}(F^0\varphi_p\varphi_p) \leq \lambda. \tag{3.12}$$

Покажем, что (3.12) не выполняется. Для этого оценим функцию F^0 снизу в области Ω_0. Имеем

$$F^0 = M^{-1}[(\nu_1 + 2\mathcal{E}_2^0)^2 + (\nu_2 - 2\mathcal{E}_1^0)^2],$$

где

$$\mathcal{E}_p^0 = \sum_{j=1}^{n_0} q'_{jp}e_j = \sum_{j=1}^{n_0} e_j(q'_{jp} - q'_{cp}) + Q[A_1]q'_{cp} = f_p(q') + Q[A'_1]q'_{cp},$$

$Q[A'_1] = \sum\limits_{j=1}^{n_0} e_j = e_1 + (n_0 - 1)e \neq 0$, и при $q' \in \Omega_0$ в силу (3.5)

$$|f_p(q')| \leq d_1 b(2)|q'_{c\perp}|.$$

Здесь и далее d_j –некоторые константы. Поэтому при малом $b(2)$

$$F^0 = \frac{4Q^2[A'_1]}{M}|q'_{c\perp}|^2 + h(q'_{c\perp}),$$

где $|h(q'_{c\perp})| \leq b(2)[d_2|q_{c\perp}|^2 + d_3]$. Следовательно, при малом $b(2)$ и $|q_{c\perp}| > 1$

$$F^0 \geq 2Q^2[A'_1]M^{-1}|q'_{c\perp}|^2. \tag{3.13}$$

Пусть $L > 0$ — произвольное число,

$\Omega_0(L) = \{q'|q' \in \Omega_0, |q'_{c\perp}| \leq L\}$,

$\omega(L) = \Omega_0 \backslash \Omega_0(L)$.

При $q' \in \Omega_0(L)$ в силу (3.5) выполняется $|q'_\perp|_2^2 \leq (1+b^2(2))M[A'_1]L$ и, значит, область $\Omega_0(L)$ – ограничена при любом L. Поскольку $\varphi_p \rightharpoonup 0$ в $L_2(\Omega_0)$, то в силу теоремы вложения

$$\lim_{p\to\infty} ||\varphi_p||_{\Omega_0(L)} = 0$$

и поэтому $\lim\limits_{p\to\infty} ||\varphi_p||_{\omega(L)} = 1$.

Тогда в силу (3.13)

$$\overline{\lim}_{p\to\infty}(F^0\varphi_p,\varphi_p) \geq \overline{\lim}_{p\to\infty}(F^0\varphi_p,\varphi_p)_{\omega(L)} \geq L\cdot 2Q^2[A_1']M^{-1}.$$

Так как число $L > 0$ – любое, то

$$\lim_{p\to\infty}(F^0\varphi_p,\varphi_p) = +\infty,$$

что противоречит (3.12). Следовательно,

$$\sigma_{ess}(\mathcal{H}_{0,0}) = \emptyset,$$

что и требовалось доказать.

Литература

1. Вугальтер С. А., Жислин Г. М. Спектральные свойства гамильтонианов с магнитным полем при фиксации псевдомомента. I. ТМФ, 113 (1997), N 3, 413–431.

2. Жислин Г. М. Спектральные свойства гамильтонианов с магнитным полем при фиксации псевдомомента, II, ТМФ (в печати).

3. Вугальтер С. А., Жислин Г. М. О дискретном спектре гамильтонианов атомов в однородном магнитном поле. ФАН, в печати.

4. Жислин Г. М. Локализация существенного спектра операторов энергии квантовых систем с невозрастающими магнитными полями, ТМФ, 107 (1996), N 3, 372–387.

5. Жислин Г. М., Сигалов А. Г. О спектре оператора Шредингера для атомов.... Известия АНСССР, 29 (1965), N 4, 835–860.

6. J. E. Avron, J. W. Herbst, B. Simon, Ann. Phys., 114 (1978), New York, 431.