Научно-исследовательский радиофизический институт
Министерства образования России

Препринт N 460

О ДИСКРЕТНОМ СПЕКТРЕ ПСЕВДОРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛ С НЕПОДВИЖНЫМИ ЯДРАМИ

Г. М. Жислин
С. А. Вугальтер

Нижний Новгород 2000

Жислин Г. М., Вугальтер С. А. О дискретном спектре псевдорелятивистских электронов молекул с неподвижными ядрами. // Препринт N 460. — Нижний Новгород: НИРФИ, 2000. 50 с.

УДК 517.9

Рассматривается гамильтониан H системы n псевдорелятивистских электронов в кулоновском поле n_0 неподвижных ядер. В предположении, что суммарный заряд электронов и ядер неотрицателен, доказана бесконечность дискретного спектра H и найдена спектральная асимптотика (без учета запрета Паули). Результат распространен на системы того же типа и с более общими, чем кулоновские, длиннодействующими потенциалами; в случае короткодействия доказана конечность дискретного спектра.

Работа поддержана грантом 97-0-14.3-65 Минобразования РФ

ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является исследование структуры дискретного спектра оператора энергии n псевдорелятивистских электронов, находящихся в потенциальном поле n_0 неподвижных ядер. Псевдорелятивистские (ПР) гамильтонианы являются математическими моделями, находящимися на пути от моделей не релятивистских к моделям релятивистским. Именно поэтому их изучение представляет существенный интерес (см., например, [1–4]). Однако, если для нерелятивистских (НР) гамильтонианов и существенный и дискретный спектр исследованы для широкого класса систем, то для ПР гамильтонианов лишь существенный спектр найден в достаточно общей ситуации [2]. Дискретный же спектр изучен абсолютно недостаточно. Его структура была найдена лишь для системы двух ПР частиц с конечными массами [4] и, кроме того, были анонсированы результаты о спектре систем типа атома с фиксированным ядром [3].

В настоящей работе устанавливается структура дискретного спектра ПР электронов нейтральных и положительно заряженных молекул (и атомов) в предположении бесконечности масс их ядер; одновременно доказываются и результаты [3].

Главным результатом работы является получение двусторонних оценок спектральной асимптотики n-электронной ПР системы через спектральные асимптотики некоторых эффективных одночастичных ПР операторов (Теорема 1.1). Отсюда и из [4] выводится бесконечность дискретного спектра и получается главный член спектральной асимптотики n электронной системы (Теорема 1.2). Наконец, мы показываем, что условие Теорем 1.1 и 1.2 выполняется для любых нейтральных и положительно заряженных систем рассматриваемого типа.

Для доказательства используются геометрические методы, аналогичные примененным в [5]. Именно они позволяют редуцировать многочастичную ПР задачу к изученной ранее [4] одночастичной с эффективным кулоновским потенциалом. Однако в ПР случае реализация схемы [5] связана с преодолением ряда существенных трудностей, отсутствовавших в [5].

Во-первых, редукция n-частичной задачи к одночастичной требует достаточно тонких оценок локализационного члена для операторов кинетической энергии. Общий вид такого члена, возникающего при локализации одночастичной системы в трехмерном пространстве, найден в [1]. Его обобщение на случай n частичной системы и локализации в $3n$-мерном пространстве не требует новых идей, однако установить нужные оценки полученного члена весьма трудно, и не случайно им посвящена значительная часть работы.

Во-вторых, при редукции n-частичной задачи к некоторой одночастичной в НР случае существенно использовалась суммируемость с весом собственных функций дискретного спектра $(n-1)$-частичной НР задачи [6]. Для псевдорелятивистских систем аналогичные результаты о суммируемости имеются только для $n = 2$ [7] и методы получения их для $n \geq 3$ не ясны. Поэтому нам пришлось искать пути построения эффективных операторов, не зависящие от свойств функций дискретного спектра подсистемы с $(n-1)$ электроном. Такие пути были найдены и эффективные операторы построены, но "плата" за это оказалась не малой: получив в эффективной одноэлектронной системе главный член эффективного кулоновского потенциала, мы не смогли найти никаких оценок следующих членов (кстати, в этом кроется одна из причин того, что в отличие от [5] мы не нашли здесь никаких оценок следующих за главным членов спектральной асимптотики; подробнее см. §1).

Формулировка основных результатов работы — Теорем 1.1–1.3 — и главные определения введены в §1. Там же дан вывод Теоремы 1.2 из Теоремы 1.1 и [4] и Теоремы 1.3 из Теоремы 1.2 и [4]. Доказательство Теоремы 1.1 дано в основном в §2, но ряд важных оценок вынесен в §3. Необходимые локализационные оценки устанавливаются в §4.

Наши доказательства приведены только для кулоновских потенциалов взаимодействия. Однако эти доказательства при некоторых условиях почти без изменений могут быть применены к ПР операторам системы тождественных частиц в потенциальном поле неподвижных центров и при более общих, чем кулоновские, потенциалах взаимодействия. Соответствующие формулировки даны в п.1.6.

Перестановочная симметрия в данной работе не учитывается, ибо такой учет связан с преодолением дополнительных трудностей, что пока не сделано.

§1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

п.1.1. Рассмотрим систему D_1 n электронов, находящихся в кулоновском поле n_0 неподвижных ядер. Пусть m и $e < 0$ — масса и заряд электрона, $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ — радиус-вектор i-го электрона, $r_{ij} = r_i - r_j$, e_s и $A_s = (A_{s1}, A_{s2}A_{s3})$ — заряд и радиус-вектор s-го ядра. Псевдорелятивистский гамильтониан системы D_1 записывается в виде

$$H'_n = T' + V,$$

где

$$T' = \sum_{j=1}^{n} T'_j, \quad T'_j = \sqrt{-\Delta_j + m^2},$$

$$V = \sum_{i=1}^{n} \sum_{s=1}^{n_0} e_s e |A_s - r_i|^{-1} + e^2 \sum_{i,j;\, i<j}^{1,n} |r_{ij}|^{-1}.$$

Оператор T'_j в импульсном представлении имеет вид $\hat{T}'_j = \sqrt{p_j^2 + m^2}$, где p_j — импульс j-й частицы; в координатном представлении

$$T'_j f(r_j) = \int T_j^0(r_j - z)\, f(z)\, dz,$$

где ядро $T_j^0(r_j)$ есть Фурье-прообраз функции $\sqrt{p_j^2+m^2}$, $f(z)\in\mathcal{L}^2$, $z\in R^3$. Чтобы описать действие оператора T_j' на функции $\psi(r)$, $r=(r_1,\dots,r_n)$, положим $r_z(\overline{j}\,)=(r_1,\dots,r_{j-1},z,r_{j+1},\dots,r_n)$. Тогда

$$T_j'\psi(r)=\int T_j^0(r_j-z)\,\psi\Big(r_z(\overline{j}\,)\Big)dz.$$

Технически удобнее вместо операторов T_j', $\hat{T}_j'$, T' и H_n' рассматривать операторы $T_j=T_j'-m$, $\hat{T}_j=\hat{T}_j'-m$, $T=\sum\limits_{j=1}^{n}T_j=T-nm$ и

$$H=H_n=T+V. \tag{1.1}$$

Будем предполагать, что заряды ядер e_s удовлетворяют неравенству

$$e_s<-2/\pi e,\quad s=1,2,\dots,n_0, \tag{1.2}$$

которое обеспечивает полуограниченность оператора H снизу [1]. В выбранной системе единиц $e^2=137^{-1}$ —постоянная тонкой структуры. Поскольку заряд s-го ядра $e_s=-Z_se$, где Z_s — номер в таблице Менделеева того элемента, ядро атома которого расположено в точке A_s, то условие (1.2) означает, что мы рассматриваем ядра атомов только тех элементов, для которых $Z_s<87$, $s=1,\dots,n_0$.

Полуограниченный снизу оператор H определим на $C_0^\infty(R^{3n})$ и расширим по Фридрихсу до самосопряженного, сохраняя прежнее обозначение. Наша цель — исследование дискретного спектра оператора H.

п.1.2. Обозначим через I_j оператор, отвечающий взаимодействию j-го электрона с остальными частицами системы, через $V(\overline{j}\,)$, $T(\overline{j}\,)$, $H(\overline{j}\,)$ — соответственно операторы потенциальной, кинетической и полной энергии системы $D_1(\overline{j}\,)$, получающейся из исходной после изъятия j-го электрона. Очевидно

$$I_j=\sum_{s=1}^{n_0}e_se\,|A_s-r_j|^{-1}+\sum_{m=1;\,m\neq j}^{n}e^2\,|r_{mj}|^{-1},\quad V(\overline{j}\,)=V-I_j,$$
$$T(\overline{j}\,)=T-T_j,\quad H(\overline{j}\,)=H(\overline{j}\,)=T(\overline{j}\,)+V(\overline{j}\,).$$

Ясно, что операторы $H(\bar{j}\,)$, $j = 1, 2, \dots, n$ отличаются друг от друга лишь обозначением переменных и, следовательно, их спектры совпадают. Положим

$$\mu \equiv \mu_{n-1} := \inf H_{n-1} = \inf H(\bar{j}\,).$$

Согласно [2] существенный спектр $\sigma_{ess}(H)$ оператора H совпадает с полуосью $[\mu, +\infty)$. Если μ есть собственное значение оператора $H(\bar{j}\,)$, то обозначим через $U_\mu(\bar{j}\,)$ — собственное подпространство $H(\bar{j}\,)$, отвечающее μ, и положим $d = \dim U_\mu(\bar{j}\,)$.

Пусть $S_k = \sum_{s=1}^{n_0} e_s + ke$, $Q_k = S_k e$. Очевидно, S_k — заряд системы из n_0 ядер и k электронов. Важную роль в данной работе будет играть условие

$$Q_{n-1} < 0. \tag{1.3}$$

Чтобы оно выполнялось, достаточно рассматривать только нейтральные ($S_n = 0$) или положительно заряженные ($S_n > 0$) системы, ибо при любом m, $n \geq m \geq 1$, $S_{n-m} = S_n - me \geq -me > 0$, ибо $e < 0$.

Аналогично, условие $Q_{n-1} \leq 0$ означает, что $S_{n-1} \geq 0$, т. е. $S_n \geq e$.

Для произвольных чисел $\varepsilon > 0$, $R > 0$ введем в пространстве $R_j^3 = \{r_j\}$ одночастичные ПР операторы

$$h_j^{\pm}(\varepsilon, R) = T_j + (Q_{n-1} \pm \varepsilon)\,|r_j|^{-1}, \tag{1.4}$$

которые будем рассматривать на гладких функциях $f(r_j)$ с носителями в области $|r_j| \geq R$ с граничным условием $f(r_j) \equiv 0$ при $|r_j| = R$. Наконец, для произвольного оператора A обозначим через D_A, $\sigma_d(A)$ и $N(\nu, A)$ соответственно область определения A, его дискретный спектр и размерность линейной оболочки собственных векторов A, отвечающих его собственным значениям, не превосходящим ν.

п.1.3. Основным результатом данной работы является

Теорема 1.1. *Пусть $\mu \in \sigma_d(H_{n-1})$. Тогда по $\forall \varepsilon > 0$, $\lambda_0 > 0$ можно указать такие числа $R > 0$, $C = C(\varepsilon, R) > 0$, что при $\forall \lambda$, $0 < \lambda \le \lambda_0$*

$$dnN\Big(-\lambda;\, h_j^+(\varepsilon, R)\Big) \le N(\mu - \lambda;\, H) \le C + dnN\Big(-\lambda;\, h_j^-(\varepsilon, R)\Big). \tag{1.5}$$

Используя известные спектральные свойства операторов (1.4) [4] мы можем получить из Теоремы 1.1 следующий результат.

Теорема 1.2. *Пусть $Q_{n-1} < 0$ и $\mu \in \sigma_d(H_{n-1})$. Тогда дискретный спектр оператора H_n бесконечен и*

$$\lim_{\lambda \to 0+0} \frac{N(\mu - \lambda;\, H)}{G_d(\lambda)} = 1, \tag{1.6}$$

где $G_d(\lambda) = 6^{-1} 2^{-1/2} m^{3/2} |Q|^3 \lambda^{-3/2} nd$, $d = \dim U_\mu(j)$ (см. п.1.2).

Доказательство Теоремы 1.1 дано в §§2, 3; вывод Теоремы 1.2 из Теоремы 1.1 и [4] приведен в п.1.5.

Условием применимости Теорем 1.1, 1.2 является включение $\mu \in \sigma_d(H_{n-1})$. Его выполнение при $Q_{n-1} \le 0$ обеспечивается следующим простым утверждением.

Теорема 1.3. *Пусть $n \ge 2$ фиксировано и $Q_{n-1} \le 0$. Тогда*

$$\mu_k \in \sigma_d(H_k), \quad k = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{1.7}$$

Теорема 1.3 элементарно следует из Теоремы 1.2 и [4]. Действительно, т.к. $Q_1 < 0$, то включение $\mu_1 \in \sigma_d(H_1)$ вытекает из [4], если там положить $p_0 = 0$, $m_1 = m_2 = m$, $\gamma = 1$ (подробнее см. п.1.5). Если для некоторого k выполняется соотношение $\mu_k \in \sigma_d(H_k)$, то поскольку $Q_k < 0$, $k = 1, 2, \ldots, n-2$ (см. п.1.2), вследствие Теоремы 1.2 при $n = k+1$ имеем $\mu_{k+1} \equiv \inf H_{k+1} \in$ $\in \sigma_d(H_{k+1})$. Полагая последовательно $k = 1, 2, 3, \ldots, n-2$ получаем утверждение Теоремы 1.3.

В силу Теоремы 1.3, Теоремы 1.1 и 1.2 применимы к *любым* нейтральным молекулам и положительным молекулярным ионам, а Теорема 1.1 и к однократным отрицательным молекулярным ионам (ядра атомов всегда фиксированы).

п.1.4. Замечания.

1. Условие $Q_{n-1} \leq 0$ не требуется для доказательства Теоремы 1.1. В силу Теоремы 1.3 оно является лишь достаточным для выполнения единственного условия Теоремы 1.1 — включения $\mu \in \sigma_d(H_{n-1})$.

2. Случай $Q_{n-1} = 0$, т.е. случай однократных отрицательных псевдорелятивистских ионов ($S_n = e$), мы здесь не рассматриваем, хотя в этом случае, в принципе, можно было бы доказать конечность спектра $\sigma_d(H_n)$. Дело в том, что такое доказательство носило бы слишком условный характер, ибо опиралось бы на два пока не доказанных свойства пространства $U_\mu(\bar{j})$: одномерность и суммируемость в $\mathcal{L}^2$ функции $\varphi \in U_\mu(\bar{j})$ с весом $\left(\sum_{s=1,s\neq j}^{n} |r_s|^2\right)^{1/2}$ (последнее известно только при $n = 2$ [7]).

3. Если сравнить полученную в Теореме 1.2 асимптотику дискретного спектра ПР системы с аналогичным результатом для НР системы ([5], оценки (2.4), (2.5)), то мы увидим следующие отличия

a) главный член спектральной асимптотики в [5] есть функция $G_1(\lambda)$, отличающаяся от нашей функции $G_d(\lambda)$ отсутствием множителя d, $d \geq 1$ (см. п.1.2);

b) в [5] получена близкая к неулучшаемой оценка членов спектральной асимптотики, следующих за главным, а здесь вообще нет оценки этих членов.

Причиной отличия (a) является отсутствие в псевдорелятивистском случае теорем о не вырожденности основного состояния рассматриваемых систем, в то время как в нерелятивистском случае эта невырожденность давно доказана [8]. При $d = \dim U_\mu = 1$ главные члены спектральных асимптотик здесь и в [5] совпадут. Отличие (b) порождается двумя обстоятельствами, каждое из которых является "роковым". Во-первых, мы не можем получить точные оценки следующих членов эффективных потенциалов в (1.4), ибо для этого надо знать характер убывания на бесконечности или суммируемость с весом собственных функций дискретного спектра многочастичных ПР систем, а такие результаты, как мы уже говорили, известны лишь для одночастичных систем [7]. Во-вторых, — отсутствуют оценки следующих за главным членов спектральной асимптотики эффективных ПР операторов (1.4).

п.1.5. Для вывода Теоремы 1.2 из Теоремы 1.1 мы применяли результаты [4], относящиеся к системам двух частиц с конечными массами m_1, m_2 в отсутствие внешних полей при фиксированном значении p_0 полного импульса. Чтобы использовать здесь эти результаты положим в [4] $m_1 = m_2 = m$, $\gamma = 1$ и $p_0 = 0$. Тогда исследованный в [4] оператор после преобразования координат запишется в виде

$$\tilde{H}_0 = 2\sqrt{p_1^2 + m^2} - 2m + V(r_1) = 2\left(T_1 + \frac{1}{2}V_0(r_1)\right),$$

где

$$V_0(r_1) \leq 0, \quad V_0(r_1) = Z|r_1|^{-1} \quad \text{при} \quad |r_1| \gg 1, \quad Z < 0.$$

Поэтому нужные нам спектральные асимптотики операторов $h_1^{\pm}(\varepsilon, R)$ получаются из найденных в [4] спектральных асимптотик оператора $\tilde{H}_0$ элементарным пересчетом.

Далее, при доказательстве Теоремы 1.3, мы использовали со ссылкой на [4] не пустоту множества $\sigma_d(H_1)$, где

$$H_1 = T_1 + \tilde{V}(r_1), \quad \tilde{V}(r_1) = \sum_{s=1}^{n_0} e_s e \frac{1}{|A_s - r_1|} < 0.$$

В силу Леммы 3.1 по $\forall\varepsilon > 0$ $\exists R > 0$ так, что при $|r_1| \geq R$ $\tilde{V}(r_1) \leq V_+ \equiv (Q_1 + \varepsilon)|r_1|^{-1}$. Поскольку $Q_1 < 0$, то $Q_1 + \varepsilon < 0$ при малом ε и согласно Теоремам 1, 2 из [4] $\sigma_d(T_1 + V_+) \neq \emptyset$, а значит и $\sigma_d(H_1) \neq \emptyset$.

п.1.6. Полученные в статье результаты можно распространить на системы тождественных частиц в потенциальном поле нескольких источников с потенциалами взаимодействия более общими, чем кулоновские. Пусть $V_0(r_1) < 0$, $V_1(r_1) > 0$ — такие функции, что $V_0(r_1), V_1(r_1) \in \mathcal{L}^2_{loc}(R^3)$, и $\exists N > 0$, такое, что при $|r_1| \geq N$

$$V_0(r_1) = \sum_{s=1}^{n_0} e_s e\,|A_s - r_1|^{-\gamma}, \quad V_1(r_1) = e^2 |r_1|^{-\gamma},$$

где $\gamma > 0$ — некоторая константа, A_s, e_s, e — те же, что в п.1.1. Пусть

$$V = \sum_{j=1}^{n} V_0(r_j) + \sum_{i,j=1;\, i<j}^{n} V_1(r_{ij}), \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_n = T + V,$$

$$J_j = V_0(r_j) + \sum_{m,m\neq j}^{1,n} V_1(r_{mj}), \quad V(\bar{j}\,) = V - J_j,$$

$$\mathcal{H}(\bar{j}\,) = T(\bar{j}\,) + V(\bar{j}\,), \quad \nu = \inf \mathcal{H}_{n-1},$$

$$\mathfrak{h}_j^{\pm}(\varepsilon, R) = T_j + (Q_{n-1} \pm \varepsilon)\,|r_j|^{-\gamma} \tag{1.8}$$

и области определения операторов $\mathcal{H}$ и $\mathfrak{h}_j^{\pm}(\varepsilon, R)$ введены так же, как и раньше. Тогда вместо Теоремы 1.1 будет справедлива более общая

Теорема 1.1a. *Пусть $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$ и d — размерность собственного подпространства оператора $\mathcal{H}_{n-1}$, отвечающего числу ν. Тогда по $\forall\varepsilon > 0$, $\lambda_0 > 0$ можно указать такие числа $R > 0$, $C = C(\varepsilon, R) > 0$, что при $\forall\lambda$, $0 < \lambda \leq \lambda_0$*

$$dnN\Big(-\lambda; \mathfrak{h}_j^{+}(\varepsilon, R)\Big) \leq N(\nu - \lambda;\, \mathcal{H}_n) \leq C + dnN\Big(-\lambda;\, \mathfrak{h}_j^{-}(\varepsilon, R)\Big). \tag{1.9}$$

Доказательство Теоремы 1.1a проводится в точности так же, как Теоремы 1.1. Из (1.9) и результатов [4], примененных к операторам $\mathfrak{h}_j^{\pm}(\varepsilon, R)$ (см. п.1.5) в зависимости от γ и Q_{n-1} мы получаем теоремы о конечности или бесконечности спектра $\sigma_d(\mathcal{H})$ и спектральные асимптотики, когда спектр $\sigma_d(\mathcal{H})$ бесконечен.

Теорема 1.2a. *Пусть* $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$ *и либо* $\gamma < 2$, $Q_{n-1} < 0$, *либо* $\gamma = 2$, $Q_{n-1} < -\dfrac{1}{8m}$. *Тогда дискретный спектр* $\sigma_d(\mathcal{H}_n)$ *бесконечен и*

$$\lim_{\lambda \to 0} \frac{N(\nu - \lambda; \mathcal{H}_n)}{g_{\gamma,\mathrm{d}}(\lambda)} = 1, \tag{1.10}$$

где

$$g_{\gamma,\mathrm{d}}(\lambda) = \frac{2^{5/2}}{3\pi} u^{3/2} |Q_{n-1}|^{3/\gamma} |\lambda|^{3/2-3/\gamma} B\left(\frac{3}{\gamma} - \frac{3}{2}; \frac{5}{2}\right) \gamma^{-1} d, \ \gamma < 2,$$

$$g_{2,\mathrm{d}}(\lambda) = |\ln 2\lambda| \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) \sqrt{|2Q|\, m - \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2}\, d, \tag{1.11}$$

$B(\tau_1, \tau_2)$ — *бета-функция*, $\ell_0 = \left[\sqrt{2\,|Q|\, m} - \dfrac{1}{2}\right]$.

Теорема 1.2b. *Пусть* $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$ *и либо* $\gamma > 2$, *либо* $\gamma = 2$, $Q_{n-1} > -\dfrac{1}{8m}$, *либо* $0 < \gamma < 2$, $Q_{n-1} > 0$. *Тогда спектр* $\sigma_d(\mathcal{H}_n)$ *конечен.*

Выполнение условия $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$ в некоторых случаях обеспечивается следующим утверждением.

Теорема 1.3a. *Пусть* $n \geq 2$ *фиксировано и либо* $\gamma < 2$, $Q_{n-1} < 0$, *либо* $\gamma = 2$, $Q_{n-1} < -\dfrac{1}{8m}$. *Тогда* $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$.

Теорема 1.3а устанавливается так же, как Теорема 1.3 (см. п.1.3, п.1.5). Из Теоремы 1.3а следует, что при $\gamma < 2$, $Q_{n-1} < 0$ и при $\gamma = 2$, $Q_{n-1} < -\dfrac{1}{8m}$ выполняются оценки (1.9), (1.10).

§2. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 1.1

п.2.1. Пусть $\lambda < 0$, $\varepsilon > 0$ — произвольные числа. Доказательство Теоремы 1.1 состоит в построении таких пространств $M_1(\lambda, \varepsilon)$ и $M_2(\lambda, \varepsilon)$, что

$$(H\psi, \psi) \leq (\mu + \lambda)\, \|\psi\|^2 \quad \psi \in M_1(\lambda, \varepsilon) \tag{2.1}$$

и
$$(H\psi,\psi) > (\mu+\lambda)\,\|\psi\|^2, \quad \psi \perp M_2(\lambda,\varepsilon), \tag{2.2}$$
и, кроме того, для некоторых констант $C > 0$, $R = R(\varepsilon)$
$$\dim M_1(\lambda,\varepsilon) \geq nd\,N\Bigl((\lambda;\ h_1^+(\varepsilon;\ R)\Bigr), \tag{2.3}$$
$$\dim M_2(\lambda,\varepsilon) \leq C + nd\,N\Bigl(\lambda;\ h_1^-(\varepsilon;\ R)\Bigr). \tag{2.4}$$
Тогда утверждение Теоремы 1.1 будет следовать из (2.1)–(2.4).

п.2.2. Введем ряд определений. Пусть k — произвольный набор различных чисел из $\mathsf{n} = (1,2,\ldots,n)$, $|\mathsf{k}|$ — число элементов в k, $r = (r_1,\ldots,r_n)$, $r(\mathsf{k}) = \{\tilde r_1,\ldots,\tilde r_n\}$, где $\tilde r_i = r_i$, $i \in \mathsf{k}$, $\tilde r_i = (0,0,0)$, $i \notin \mathsf{k}$, $R(\mathsf{k}) = \{r(\mathsf{k})\}$, $r(\overline{\mathsf{k}}) = \{r_1',\ldots,r_n'\}$, где $r_i' = r_i$, $i \notin \mathsf{k}$, $r_i' = (0,0,0)$, $i \in \mathsf{k}$, $R(\overline{\mathsf{k}}) = \{r(\overline{\mathsf{k}})\}$, $d(\mathsf{k}) = |r(\mathsf{k})|$, $d(\overline{\mathsf{k}}) = |r(\overline{\mathsf{k}})|$, $t_{\mathsf{k}} = t_{\mathsf{k}}(r) = \dfrac{d(\overline{\mathsf{k}})}{d(\mathsf{k})}$. При $|\mathsf{k}| = 1$ мы вместо k будем писать то единственное число, которое содержится в k, т. е. при $\mathsf{k} = \langle j\rangle$, $t_{\mathsf{k}} = t_j = |r(\overline{j})|\cdot|r_j|^{-1}$. Для любого $z \in R^3$ и $j, s \in \mathsf{n}$ полагаем
$$r_z(\overline{j}) = \{\hat r_1,\ldots,\hat r_n\} \quad \hat r_i = r_i, \quad i \neq j, \quad \hat r_j = z,$$
$$t_{jz} = \frac{|r(\overline{j})|}{|z|}, \quad t_{jsz} = t_{jz} \ \text{ при } \ s = j,$$
$$t_{jsz} = \frac{\left(|r(\overline{j},\overline{s})|^2 + |z|^2\right)^{1/2}}{|r_j|} \ \text{ при } \ s \neq j.$$
Пусть $0 < \beta_{11} < \beta_{21} < 1/3$ — некоторые числа, $u_1(t) \in C^1$, $u_1(t) \equiv 1$, $0 \leq t \leq \beta_{11}$; $u_1(t) \equiv 0$, $t \geq \beta_{21}$, $0 < u_1(t) < 1$, $t \in (\beta_{11},\beta_{21})$, $u_{1j} = u_1(t_j)$, $v_1(t) = \sqrt{1-u_1^2(t)}$, $v_{1j} = v_1(t_j)$. Для каждого $j \in \mathsf{n}$ будем обозначать через $\varphi_i\bigl(r(\overline{j})\bigr)$, $i = 1,2,\ldots,d$ — ортонормированный базис в собственном подпространстве $U_\mu(\overline{j})$ (см. п.1.2.) и через $f_s^{\pm}(r_j) = f_s^{\pm}(\varepsilon;\ R;\ r_j)$, $s = 1,2,\ldots,s_\lambda^{\pm}$, —

ортонормированные собственные функции операторов $h_j^{\pm}(\varepsilon, R)$ (см. п.1.4), образующие базисы в пространствах $E_{\lambda}^{\pm}(j)\, R_j^3$, где $E_j^{\pm}(j)$ — спектральные проекторы операторов $h_j^{\pm}(r, R)$, $\lambda < 0$ и, очевидно, $s_{\lambda}^{\pm} = N\Big(\lambda;\, h_j^{\pm}(\varepsilon, R)\Big)$.

п.2.3. Пусть $\varepsilon > 0$, $\lambda < 0$ — фиксированные числа. Доказательство начнем с построения пространства $M_1(\lambda;\varepsilon)$. Положим

$$\begin{aligned} M_1(\lambda;\varepsilon) \;\; = \;\; &\mathcal{L}\Big(\varphi_i\Big(r(\bar{j})\Big)\, f_s^+(r_j)\, u_{1j},\;\; i = 1, 2, \ldots, d, \\ &\qquad s = 1, 2, \ldots, s_{\lambda}^+,\;\; j = 1, 2, \ldots, n\Big), \end{aligned} \tag{2.5}$$

где $\mathcal{L}(\ldots)$ означает линейную оболочку, и докажем, что число R в определении оператора $h_j^+(\varepsilon, R)$ можно выбрать по $\varepsilon > 0$ так, чтобы подпространство $M_1(\lambda, \varepsilon)$ обладало свойствами (2.1), (2.3). При этом существенно будет использоваться тот факт, что $f_s^+(r_j) \equiv 0$ при $|r_j| \le R$.

Пусть $\psi \in M_1(\lambda, \varepsilon)$. Очевидно, $\psi(r) = \sum\limits_{j=1}^{n} \psi_j\, u_{1j}$, где

$$\psi_j = \sum_{i=1}^{d} \varphi_i\Big(r(\bar{j})\Big) F_{ij}(r_j), \qquad F_{ij}(r_j) = \sum_{s=1}^{s_{\lambda}^+} c_{is,j}\, f_s^+(r_j),$$

$c_{is,j}$ — некоторые константы. Для любой функции $\omega \in D_H$ положим $L[\omega] = (H\omega, \omega)$. Очевидно,

$$L[\psi] = \sum_{j=1}^{n} L[\psi_j\, u_{1j}] + 2 \sum_{j,m;\, j<m}^{1,n} \operatorname{Re}\Big((T+V)\,\psi_j\, u_{1j}, \psi_m\, u_{1m}\Big). \tag{2.6}$$

Так как $u_1(t_j)\, u_1(t_m) = 0$ при $j \ne m$, то при $j \ne m$ $(V\psi_j\, u_{1j}, \psi_m\, u_{1m}) = 0$, но, в общем случае члены $(T\psi_j\, u_{1j}, \psi_m\, u_{1m}) \ne 0$ вследствие нелокальности оператора T. Для их оценки воспользуемся Леммой 4.1 (см. п.4.1) с $\omega_\ell = \psi_\ell\, u_{1\ell}$, $\ell = i, j$. Используя её, по $\forall \varepsilon_1 > 0$ $\exists R > 0$ так, что

$$2\left|\operatorname{Re} \sum_{j,m;\, j<m}^{1,n} (T\psi_j\, u_{1j}, \psi_m\, u_{1m})\right| \le \varepsilon_1 \sum_{j=1}^{n} \mathcal{F}_j,$$

где $\mathcal{F}_j = \sum_i^d \left\| F_{ij}(r_j) \left| r_j \right|^{-1} \right\|^2$. Поэтому из (2.6) следует, что

$$L[\psi] \leq \sum_{j=1}^{n} (L[\psi_j u_j] + \varepsilon_1 \mathcal{F}_j). \tag{2.7}$$

п.2.4. Пусть $j \in \mathsf{n}$ — фиксировано. Для $j, s \in \mathsf{n}$ положим $æ_1(r_z(\overline{s})) = u_1(t_{jsz})$, $æ_2(r_z(\overline{s})) = v_1(t_{jsz})$, $z = x, y \in R^3$ (см. п.2.2). Для дальнейших оценок используем следующее равенство, справедливое для $\forall g(r) \in D_H$:

$$(T_s g, g) = (T_s g u_{1j}, g u_{1j}) + (T_s g v_{1j}, g v_{1j}) + \Phi_{sj}[g], \tag{2.8}$$

где

$$\Phi_{sj}[g] = \int\limits_{R^{3n-3}(\overline{s})} \iint L(x, y; r(\overline{s}); j)\, g\left(r_y(\overline{s})\right) g^*\left(r_x(\overline{s})\right) dx\, dy\, dr(\overline{s}),$$

$$(2.9)$$

$$\begin{aligned} L(x, y; r(\overline{s}); j) \;\; &= \;\; (2\pi)^{-2} m^2 \left| x - y \right|^{-2} K_2(m \left| x - y \right|) \times \\ &\times \sum_{i=1}^{2} \left(æ_i\left(r_x(\overline{s})\right) - æ_i\left(r_y(\overline{s})\right) \right)^2, \end{aligned}$$

K_2 — функция Макдональда.

Равенство (2.8) получается с помощью интегрирования по $r(\overline{s}) = \{r_1, \ldots, r_{s-1}, r_{s+1}, \ldots r_n\}$ локализационной формулы (3.8) [1], примененной к функции $g(r)$ как к функции r_s при фиксированном $r(\overline{s})$. Используя (2.8) с $g = \psi_j$, получаем, что

$$\begin{aligned} L[\psi_j u_{1j}] \;\; &= \;\; (T\psi_j, \psi_j] - (T\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}) - \\ &- \sum_{s=1}^{n} \Phi_{sj}[\psi_j] + (V\psi_j, \psi_j) - (V\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}). \end{aligned}$$

Поскольку (см. п.1.2) $T = T(\overline{j}) + T_j$, $V = V(\overline{j}) + I_j$, $H(\overline{j}) = T(\overline{j}) + V(\overline{j})$ и

$$(H(\overline{j})\psi_j, \psi_j) = \mu(\psi_j \psi_j), \quad (H(\overline{j})\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}) \geq \mu \left\| \psi_j v_{1j} \right\|^2,$$

то

$$L[\psi_j u_{1j}] \le \mu\Big(\|\psi_j\|^2 - \|\psi_j v_{1j}\|^2\Big) + (T_j\psi_j, \psi_j) - (T_j\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}) +$$
$$+ \sum_{s=1}^{n} \Phi_{sj}[\psi_j] + (I_j\psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j}). \tag{2.10}$$

п.2.5. Для оценки членов, содержащих I_j, заметим, что в силу Леммы 3.1 при любом p, $p = 1, 2, \ldots, n_0$ и $\ell \ne j$, $\ell = = 0, 1, \ldots, n$ по $\forall \varepsilon_1 > 0$ $\exists R$ так, что

$$\left|\left(\left(\frac{1}{|r_\ell - r_j|} - \frac{1}{|A_p - r_j|}\right)\psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j}\right)\right| \le \varepsilon_1 \sum_{i=1}^{d} \left(F_{ij}, F_{ij}\,|r_j|^{-1}\right), \tag{2.11}$$

где $r_0 = (0, 0, 0)$. Поэтому

$$(I_j\psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j}) \le Q\left(\psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j}\,|r_j|^{-1}\right) +$$
$$+ \varepsilon_1 c_1 \sum_{i=1}^{d} \left(F_{ij}, F_{ij}\,|r_j|^{-1}\right) = (Q + \varepsilon_1 c_1) \sum_{i=1}^{d} \left(F_{ij}, F_{ij}\,|r_j|^{-1}\right) -$$
$$- Q\left(\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}\,|r_j|^{-1}\right). \tag{2.12}$$

Здесь и далее через c_1, c_2 и т. д. обозначены различные константы, которые не зависят от оцениваемых функций и величины которых для нас не существенны, $Q = Q_{n-1}$.

Пусть $\Omega(r_j) = \{r(\bar{j}) \mid r \in \operatorname{supp} \psi_j v_{1j}\}$. Так как при $r(\bar{j}) \in \Omega(r_j)$ выполняется $|r(\bar{j})| \ge \beta_{11}\,|r_j| \ge \beta_{11}\,R$, то

$$\int\limits_{\Omega(r_j)} \left|\varphi_i\big(r(\bar{j})\big)\right|^2 dr(\bar{j}) \to 0 \quad \text{при} \quad R \to \infty.$$

Учитывая это, легко получаем, что при больших R

$$\left|Q\left(\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}\,|r_j|^{-1}\right)\right| \le \varepsilon_1 \sum_{i=1}^{d} \left(F_{ij}, F_{ij}\,|r_j|^{-1}\right). \tag{2.13}$$

Наконец, в силу следствия 2 Леммы 4.2 при большом R

$$\left|\sum_{s=1}^{n} \Phi_{sj}[\psi_j]\right| \le \varepsilon_1 \sum_{s=1}^{d} \left(F_{sj}, F_{sj}\,|r_j|^{-1}\right). \tag{2.14}$$

Из неравенства (2.10) и оценок (2.12)–(2.14) вытекает, что

$$L[\psi_j u_{1j}] + \varepsilon_1 \mathcal{F}_j \;\le\; \mu\,\|\psi_j u_{1j}\|^2 + \sum_{i=1}^{d} \Big[(T_j F_{ij}, F_{ij}) + \\ + (Q + \varepsilon_1 c_2)(F_{ij}, F_{ij}\,|r_j|^{-1})\Big]. \tag{2.15}$$

Выбирая $\varepsilon_1 = \varepsilon/c_2$ мы получаем, что выражение в квадратных скобках есть $(h_j^+(\varepsilon, R)\,F_{ij}, F_{ij})$, где R столь велико, что обеспечивает выполнение (2.7), (2.11), (2.13), (2.14). Пусть такое R было выбрано с самого начала и поскольку F_{ij} есть линейная комбинация ортонормированных собственных функций оператора $h_j^+(\varepsilon, R)$, отвечающих его собственным значениям, не превосходящим λ, мы имеем

$$L[\psi_j u_{1j}] + \varepsilon_1 \mathcal{F}_j \le \mu\,\|\psi_j u_{1j}\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{d} \|F_{ij}\|^2. \tag{2.16}$$

Так как $\lambda < 0$ и

$$\sum_{i=1}^{d} \|F_{ij}\|^2 = \|\psi_j\|^2 \ge \|\psi_j u_{1j}\|^2,$$

то

$$L[\psi_j u_{1j}] + \varepsilon_1 \mathcal{F}_j \le (\mu + \lambda)\,\|\psi_j u_{1j}\|^2$$

и в силу (2.7)

$$L[\psi] \le (\mu + \lambda)\,\|\psi\|^2. \tag{2.17}$$

Таким образом, для $\forall \psi \in M_1(\lambda, \varepsilon)$ неравенство (2.1) доказано.

п.2.6. Чтобы оценить $\dim M_1(\lambda, \varepsilon)$, отметим, что поскольку

$$\operatorname{supp} \varphi_i\left(r(\bar{j})\right) f_s^+(r_j)\, u_{1j} \cap \operatorname{supp} \varphi_{i_1}\left(r(\bar{j}_1)\right) f_{s_1}(r_{j_1})\, u_{1j_1} = \emptyset$$

при $j \neq j_1$ и $\forall i, i_1, s, s_1$, то

$$\dim M_1(\lambda, \varepsilon) = n \dim \mathcal{L}\Big(\varphi_i\Big(r(\overline{j})\Big) f_s^+(r_j)\, u_{1j}, \quad i = 1, \dots, d, \quad s = 1, \dots, s_\lambda^+\Big),$$

где j — фиксировано. Далее, функции $\varphi_i\Big(r(\overline{j})\Big) f_s^+(r_j)\, u_{1j}$, $i = 1, \dots, d$, $s = 1, \dots, s_\lambda^+$, — линейно независимы, ибо если для каких-то коэффициентов $c_{is,j}$

$$\sum_{i,s} c_{is,j}\, \varphi_i\Big(r(\overline{j})\Big) f_s^+(r_j)\, u_{1j} \equiv 0$$

— т.е. $\psi_j u_{1j} \equiv 0$ с $\psi_j = \sum\limits_{i=1}^{d} \varphi_i\Big(r(\overline{j})\Big) F_{ij}$, $F_{ij} = \sum\limits_{s=1}^{s_\lambda^+} c_{is,j}\, f_s^+(r_j)$, то в силу (2.16) выполнялось бы неравенство

$$\varepsilon \mathcal{F}_j \leq \lambda \sum_{i=1}^{d} \|F_{ij}\|^2.$$

Но так как $\mathcal{F}_j \geq 0$, $\lambda < 0$, то $\|F_{ij}\| = 0$ при $\forall i$ и, значит, все коэффициенты $c_{is,j} = 0$, т.е. функции $\varphi_i\, f_s^+\, u_{1j}$ — линейно-независимы. Поэтому $\dim M_1(\lambda; \varepsilon) = nds_\lambda^+ = nd\, N\Big(\lambda;\ h_j^+(\varepsilon, R)\Big)$ и (2.3) — доказано.

п.2.7. Переходим к построению пространства $M_2(\lambda, \varepsilon)$ со свойствами (2.2), (2.4). Пусть $R_0 > 0$, $t \in R_+^1$, $u(t), v(t) \in C^2$, $u(t) = 1$ при $0 \leq t \leq 1$, $u(t) = 0$ при $t \geq 2$, $0 < u(t) < 1$ при $t \in (1, 2)$, $v(t) = \sqrt{1 - u^2(t)}$, $\tau = t_0 = \dfrac{|r|}{R_0}$, $u_0 = u(t_0)$, $v_0 = v(t_0)$, $\tau_{sz} = \dfrac{|r_z(\overline{s})|}{R_0} \in R^3$, (ср. с п.2.2).

Применяя локализационную формулу (2.8) с $g = \psi$ и беря вместо u_{1j} и v_{1j} функции u_0, v_0, получим

$$(T_s\psi, \psi) = (T_s\psi_{00}, \psi_{00}) + (T_s\psi_0, \psi_0) + \Phi_{s0}[\psi], \tag{2.18}$$

где $\psi_{00} = \psi u_0$, $\psi_0 = \psi v_0$, и функционал $\Phi_{s0}[\psi]$ определен соотношением (2.9) с $j = 0$, если там в ядре $L(x, y, r(\overline{s}), j)$ положить $j = 0$, $æ_1\Big(r_z(\overline{s})\Big) = u(\tau_{sz})$, $æ_2\Big(r_z(\overline{s})\Big) = v(\tau_{sz})$. В силу Леммы 4.3 по $\varepsilon_1 > 0$ можно найти $R_0 > 0$, константу $c_3 > 0$ и функции $u(t)$, $v(t)$ так, что для всех ψ

$$|\Phi_{s0}[\psi]| \le c_3 \left\|\psi_{0,0}\right\|^2 + \varepsilon_1 \left\|\psi_0 \left|r\right|^{-1}\right\|^2.$$

Отсюда и из (2.18) следует, что

$$(H\psi, \psi) \ge L_1[\psi_{0,0}] + L_2[\psi_0], \tag{2.19}$$

где

$$L_1[\psi_{0,0}] = (H\psi_{0,0}, \psi_{0,0}) - c_4 \left\|\psi_{0,0}\right\|^2, \tag{2.19a}$$

$$L_2[\psi_0] = (H\psi_0, \psi_0) - \varepsilon_1 n \left\|\psi_0 |r^{-1}|\right\|^2. \tag{2.19b}$$

Оценка снизу функционала $L_1[\psi_{0,0}]$ дана в п.2.8, функционала $L_2[\psi_0]$ — в пп.2.9–2.12.

п.2.8. Пусть $\omega \equiv \psi_{0,0}$. Для оценки функционала $L_1[\omega]$ мы действуем аналогично [4]. Заметим сначала, что для некоторого $\delta_0 > 0$ оператор $(1 - \delta_0)T + V$ ограничен снизу, поэтому для некоторой константы $c_5 > 0$

$$L_1[\omega] \ge -c_5 \left\|\omega\right\|^2 + \delta_0 \Big(\hat{T}(p)\,\hat{\omega}(p), \hat{\omega}(p)\Big), \tag{2.20}$$

где $\hat{T}(p) = \sum_{j=1}^{n} \hat{T}_j$, и знак $\hat{}$ над функцией $\hat{\omega}(p)$ означает, что $\hat{\omega}(p)$ есть Фурье-преобразование функции $\omega(r)$. Обозначим через $M_1'(N)$ линейную оболочку собственных функций оператора $-\Delta$, отвечающих его собственным значениям, не превосходящим N, в гиперкубе

$$K(R_0) \;=\; \Big\{r \mid r = (r_1, \ldots, r_n),\ r_j = (x_j, y_j, z_j),\ |x_j| \le 2R_0,\ |y_j| \le 2R_0,\ |z_j| \le 2R_0,\ j = 1 \ldots n\Big\}$$

с нулевыми граничными условиями на границе $K(R_0)$. Обобщая лемму п.2.8 [4], можно указать число N столь большим, что при $\omega \perp M_1'(N)$

$$\|\hat{\omega}\|^2_{|p|\geq N} \geq 0{,}5\,\|\hat{\omega}\|^2 = 0{,}5\,\|\omega\|^2$$

и, следовательно,

$$\Big(T(p)\,\hat{\omega},\hat{\omega}\Big) \geq \Big(T(p)\,\hat{\omega},\hat{\omega}\Big)_{|p|\geq N} \geq 0{,}5b(N)\,\|\omega\|^2,$$

где

$$b(N) = \min_{|p|\geq N} \hat{T}(p) \to \infty \quad \text{при} \quad N \to \infty.$$

Поэтому и в силу (2.20) при большом N

$$L_1[\omega] \geq 0, \quad \text{если} \quad \omega \perp M_1'(N).$$

Отсюда и из (2.19) следует, что при $\psi u_0 \perp M_1'(N)$ выполняется

$$(H\psi,\psi) \geq L_2[\psi_0]. \tag{2.21}$$

п.2.9. Начинаем оценку снизу функционала $L_2[\psi_0]$. Именно здесь преодолеваются основные трудности доказательства Теоремы 1.1. Общая идея данной части работы состоит в разбиении пространства R^{3n} на области, отвечающие различным распадениям исходной системы, с последующей оценкой функционала $L_2[\psi_0]$ на функциях с носителями в этих областях.

Пусть числа β_{11}, β_{21} и функции u_1, v_1, $u_{1j} = u_1(t_j)$, $v_{1j} = v_1(t_j)$ — те же, что в п.2.2. Основой для дальнейшего является следующее неравенство, справедливое для больших $R_0 = R_0(\varepsilon_1)$

$$\begin{aligned} L_2[\psi_0] \;\; \geq \;\; & \sum_{j=1}^{n} \left\{ (H\psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j}) - \varepsilon_1 \left\| \psi_0 u_{1j}\, |r_j|^{-1} \right\|^2 \right\} + \\ & + \mu \left(\|\psi_0\|^2 - \sum_{j=1}^{n} \|\psi_0 u_{1j}\|^2 \right) \end{aligned} \tag{2.22}$$

Вывод неравенства (2.22) достаточно громоздок, поэтому он вынесен в § 3 (пп.3.1–3.5), а здесь мы лишь объясним, почему оно должно выполняться.

п.2.10. Пусть $\hat{v} = \prod_{j=1}^{n} v_{1j}$. Ясно, что $\hat{v}^2 + \sum\limits_{j=1}^{n} u_{1j}^2 = 1$ при $|r| > 0$. Учитывая это, имеем

$$(H\psi_0, \psi_0) = \sum_{j=1}^{n}(H\psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j}) + (H\psi_0\hat{v}_1, \psi_0\hat{v}_1) + G[\psi_0], \quad (2.23)$$

где $G[\psi_0]$ включает локализационные члены и перекрестные члены, возникшие за счет нелокальности оператора T. Пусть $\Omega = \operatorname{supp}\psi_0\hat{v}_1$. Покажем, что при больших R_0 каждая точка $r \in \Omega$ отвечает "уходу" от ядер не менее чем двух электронов. Пусть $r = (r_1, \dots, r_n) \in \Omega$ и индексы $i_1, \dots, i_n$ таковы, что $|r_{i_1}| \geq |r_{i_2}| \geq \ldots \geq |r_{i_n}|$, $i_m \neq i_k$, $m \neq k$, $i_s \in \mathrm{n}$. Тогда, поскольку $|r|^2 \geq R_0^2$, то $n|r_{i_1}|^2 \geq R_0^2$. Так как $r \in \operatorname{supp} v_{1i_1}$, то $|r(\bar{i}_1)|^2 \geq \beta_{11}^2 |r_{i_1}|^2$, и, значит, $(n-1)|r_{i_2}|^2 \geq |r(\bar{i}_1)|^2 \geq \beta_{11}^2 |r_{i_1}|^2 \geq \beta_{11}^2 n^{-1} R_0^2$. Таким образом $|r_{i_1}| \geq R_0 |n|^{-1/2}$, $|r_{i_2}| \geq \sqrt{\beta_{11}^2 n^{-1}(n-1)^{-1}}\, R_0$. Следовательно, рассматриваемая точка r отвечает "уходу" от ядер, по крайней мере, электронов с номерами i_1, i_2. Поэтому в точке $r \in \Omega$

$$V \geq V[\bar{i}_1, \bar{i}_2]^{*)} - \varepsilon(R_0), \quad (2.24)$$

где $\varepsilon(R) \to 0$ при $R \to \infty$. Поскольку $\mu_{n-1} \in \sigma_d\Big(H(\bar{i}_1)\Big)$, то согласно ХВЖ-теореме для ПР систем [2], примененной к оператору $H(\bar{i})$, $\mu_{n-2} = \inf H[\bar{i}_1, \bar{i}_2] > \mu_{n-1}$. Разбивая Ω на подобласти, отвечающие "уходу" различного числа s, $s \geq 2$, электронов и оценивая квадратичную форму $(H_n\psi_0\hat{v}_1, \psi_0\hat{v}_1)$, по этим областям, мы получим в итоге, что

$$(H_n\psi_0\hat{v}_1, \psi_0\hat{v}_1) \geq \mu_{n-2}\|\psi_0\hat{v}_1\|^2 - \varepsilon_2\|\psi_0\hat{v}_1\|^2,$$

где член $\varepsilon_2\|\psi_0\hat{v}_1\|^2$ возникает как вследствие (2.24), так и в результате оценок локализационных членов при выделении из Ω

*) Операторы $V[\bar{i}_1, \bar{i}_2]$ здесь и $H[\bar{i}_1, \bar{i}_2]$ далее определены в п.3.5.

подобластей. Величина функционала $G[\psi_0]$ оценивается членами вида $\varepsilon_1 \sum_{j=1}^{n} \left\|\psi_0 u_{1j} |r_j|^{-1}\right\|^2 + \varepsilon_2 \left\|\psi_0 \hat{v}_1\right\|^2$. Подставляя эти оценки в (2.23) и затем (2.23) в (2.19b), получим (2.22).

п.2.11. Считая неравенство (2.22) доказанным, оценим снизу входящие туда члены $(H\psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j})$. Пусть индекс j фиксирован и $\tilde{\psi} = \psi_0 u_{1j} = \psi v_0 u_{1j}$. Выделим в функции $\tilde{\psi}$ её проекцию на собственное подпространство $U_\mu(\bar{j})$ оператора $H(\bar{j})$ (см. п.1.2). Имеем

$$\tilde{\psi}(r) = \sum_{i=1}^{d} \varphi_i\Big(r(\bar{j})\Big) F_{ji}(r_j) + g_j(r), \tag{2.25}$$

где $F_{ji}(r_j) = (\tilde{\psi}, \varphi_i)_{R(\bar{j})}$, $(g_j, \varphi_i)_{R(\bar{j})} = 0$ при любом фиксированном r_j, $R(\bar{j}) = \{r_1, \ldots, r_{j-1}, r_{j+1}, \ldots, r_n\}$. При $r \in \operatorname{supp} \tilde{\psi}$, очевидно, $|r(\bar{j})| \le \beta_{21} |r_j|$, $|r| \ge R_0$. Поэтому при $r \in \operatorname{supp} \tilde{\psi}$ $|r_j| \ge R_0 (1 + \beta_{21}^2)^{-1/2}$ и, значит,

$$\tilde{\psi}(r) \equiv F_{ji}(r_j) \equiv g_j(r) \equiv 0 \quad \text{при} \quad |r_j| < R_0 \left(1 + \beta_{21}^2\right)^{-1/2}. \tag{2.26}$$

Таким образом, функция $\tilde{\psi}(r)$ отвечает "уходу" j-го электрона от ядер (и от других электронов, но последнее для нас не существенно и мы это не доказываем). Оценим снизу квадратичную форму $(H\tilde{\psi}, \tilde{\psi})$, используя для H разложение $H = H(\bar{j}) + T_j + I_j$, а для $\tilde{\psi}$ равенство (2.25). Пусть μ^0 — ближайшая к μ точка спектра оператора $H(\bar{j})$. В силу свойств функций φ_i и g_j

$$(H(\bar{j})\, \varphi_i F_{ji}, \varphi_{i_1} F_{ji_1}) = \mu (\varphi_i, \varphi_{i_1})_{R(\bar{j})} (F_{ji}, F_{ji_1})_{R_j} = \mu \delta_{ii_1} \left\|F_{ji}\right\|^2,$$

$$(H(\bar{j})\, \varphi_i F_{ji}, g_j) = (H(\bar{j})\, g_j, \varphi_i F_{ji}) = 0, \quad (H(\bar{j})\, g_j, g_j) \ge \mu^0 \left\|g_j\right\|^2,$$

$$(T_j \varphi_i F_{ji}, \varphi_{i_1} F_{ji_1}) = \delta_{ii_1} (T_j F_{ji}, F_{ji}),$$

$$(T_j \varphi_i F_{ji}, g_j) = (T_j F_{ji} \varphi_i, g_j) = 0.$$

Поэтому

$$(H\tilde{\psi}, \tilde{\psi}) \ge \mu \left\|\tilde{\psi}\right\|^2 + \delta \left\|g_j\right\|^2 + \sum_{i=1}^{d} (T_j F_{ji}, F_{ji}) + (T_j g_j, g_j) + (I_j \tilde{\psi}, \tilde{\psi}), \tag{2.27}$$

где $\delta = \mu - \mu^0 > 0$, так как $\mu \in \sigma_d\Big(H(\bar{j})\Big)$.

п.2.12. Оценки в (2.27) начнем с члена $(I_j\tilde{\psi},\tilde{\psi})$. Очевидно

$$(I_j\tilde{\psi},\tilde{\psi}) = \left((I_j - Q\,|r_j|^{-1})\tilde{\psi},\tilde{\psi}\right) + Q\sum_{i=1}^{d}\left(F_{ji},F_{ji}\,|r_j|^{-1}\right) + \\ + Q\left(g_j,g_j\,|r_j|^{-1}\right), \qquad (2.28)$$

где $Q = Q_{n-1}$ (см. п.1.2).

Чтобы оценить первое слагаемое в (2.28), достаточно оценить величины $\left((|r_{kj}|^{-1}-|r_j|^{-1})\tilde{\psi},\tilde{\psi}\right)$ и $\left((|A_s - r_j|^{-1}-|r_j|^{-1})\tilde{\psi},\tilde{\psi}\right)$. Так как при $r \in \operatorname{supp}\tilde{\psi}$ и большом R_0 выполняется $|r_j| \gg 1$, то, очевидно,

$$\left|\left((|A_s - r_j|^{-1} - |r_j|^{-1})\tilde{\psi},\tilde{\psi}\right)\right| \leq c(|r_j|^{-2}\tilde{\psi},\tilde{\psi}). \qquad (2.29)$$

Пусть $\tilde{\chi}(r)$ — характеристическая функция области $\operatorname{supp}\tilde{\psi}$. Применяя неравенство Буняковского и Лемму 3.1 по $\forall\varepsilon_1 > 0$ $\exists R_0$ так, что

$$\left|\left((|r_{kj}|^{-1} - |r_j|^{-1})\varphi_i F_{ji},\varphi_s F_{jt}\tilde{\chi}\right)\right| \leq \varepsilon_1\,(F_{ji},F_{ji}\,|r_j|^{-1}) + \\ + \varepsilon_1\,(F_{jt},F_{jt}\,|r_j|^{-1}),$$

$$\left|\left((|r_{kj}|^{-1} - |r_j|^{-1})\varphi_i\, F_{ji},g_j\tilde{\chi}\right)\right| \leq \varepsilon_1\,\|g_j\|^2 + \varepsilon_1\,(F_{ji},F_{ji}\,|r_j|^{-1}).$$

Наконец, поскольку при $\tilde{\chi}(r) \neq 0$ выполняется $|r_{kj}| \geq$ $\geq |r_j|\,(1-\beta_{21}) \geq R_0\,(1-\beta_{21})(1+\beta_{21}^2)^{-1/2}$, то при большом R_0

$$\left|\left((|r_{kj}|^{-1} - |r_j|^{-1})g_j,g_j\tilde{\chi}\right)\right| \leq \varepsilon_1\,\|g_j\|^2.$$

Используя эти оценки и учитывая, что

$$\tilde{\psi}(r) = \sum_{i=1}^{d}\varphi_i F_{ji}\tilde{\chi} + g_j\tilde{\chi},$$

имеем

$$\left|\left((|r_{kj}|^{-1} - |r_j|^{-1})\tilde{\psi},\tilde{\psi}\right)\right| \leq \varepsilon_1 c\sum_{i=1}^{d}(F_{ji},F_{ji}\,|r_j|^{-1}) + \varepsilon_1 c\,\|g_j\|^2. \qquad (2.30)$$

В силу (2.29), (2.30) из (2.28) следует, что по $\varepsilon > 0$ можно указать такое $\varepsilon_1 > 0$ и $R_0 > 0$, что

$$\left((I_j - \varepsilon_1 |r_j|^{-2})\tilde{\psi}, \tilde{\psi}\right) \geq (Q - \varepsilon) \sum_{i=1}^{d} (F_{ji}, F_{ji} |r_j|^{-1}) - \varepsilon \|g_j\|^2. \quad (2.31)$$

Вспоминая, что $\tilde{\psi} = \psi_0 u_{1j}$, и подставляя в (2.22) оценки (2.27), (2.31), получаем:

$$\begin{aligned} L_2[\psi_0] \quad &\geq \quad \mu\left(\|\psi_0\|^2 - \sum_{j=1}^{n} \|\psi_0 u_{1j}\|^2\right) + \\ &+ \quad \sum_{j=1}^{n} \Bigg(\mu \|\psi_0 u_{1j}\|^2 + (\delta - \varepsilon) \|g_j\|^2 + \\ &+ \quad \sum_{i=1}^{d} \left(\left(T_j + (Q - \varepsilon) |r_j|^{-1}\right) F_{ji}, F_{ji}\right)\Bigg). \end{aligned}$$

Отсюда при $\varepsilon < \delta$ имеем

$$L_2[\psi_0] \geq \mu \|\psi_0\|^2 + \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{d} \left(h_j^-(\varepsilon, R_0) F_{ji}, F_{ji}\right), \quad (2.32)$$

где $h_j^-(\varepsilon, R_0) = T_j + (Q - \varepsilon) |r_j|^{-1}$ (см. (1.4)).

Пусть $\overline{M}_{2,j}(\lambda) = \mathcal{L}\left(\varphi_i\left(r(\bar{j})\right) f_s^-(r_j), \quad i = 1, 2, \ldots, d, \; s = 1, 2, \ldots, s_\lambda^-\right)$. Потребуем, чтобы выполнялись соотношения

$$\psi v_0 \dot{u}_{1j} \perp \overline{M}_{2,j}(\lambda) \quad j = 1, 2, \ldots, n. \quad (2.33)$$

Тогда в разложениях (2.25) для каждого j функции $F_{ji}(r_j)$ должны быть ортогональны ко всем собственным функциям оператора $h_j^-(\varepsilon, R_0)$, отвечающим его собственным значениям, не превосходящим λ. Поэтому

$$\left(h_j^-(\varepsilon, R_0) F_{ji}, F_{ji}\right) \geq \lambda \|F_{ji}\|^2, \quad j = 1, 2, \ldots, n. \quad (2.34)$$

Положим

$$M_2(\lambda) = \sum_{j=1}^{n} v_0 u_{1j}\, \overline{M}_{2,j}(\lambda) + u_0 M_2'(N).$$

Тогда при $\psi \perp M_2(\lambda)$ в силу (2.21), (2.32) и(2.33)

$$(H\psi, \psi) \geq (\mu + \lambda) \left\|\psi_0\right\|^2 \geq (\mu + \lambda) \left\|\psi\right\|^2$$

и

$$\dim M_2(\lambda) \leq C + dn\, N\Big(\lambda;\, h_j^-(\varepsilon, R_0)\Big).$$

Теорема доказана полностью.

§3. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 1.1 (ОКОНЧАНИЕ)

п.3.1. В настоящем параграфе мы устанавливаем неравенство (2.22), лежавшее в основе доказательства второй части Теоремы 1.1 и доказываем вспомогательную лемму. Предварительно введем ряд обозначений и определений (их частные случаи см. в пп.2.2, 2.7). Пусть $\beta_{1i} < \beta_{2i} \ll 1$, $i = 1 \ldots n-1$ и $R_0 > 0$ — некоторые числа, $\beta_{10} = 1$, $\beta_{20} = 2$, функции $u_i(t)$ и $v_i(t)$ определены равенствами: $u_i(t) \equiv 1$, $0 \leq t \leq \beta_{1i}$, $u_i(t) = 0$ при $t \geq \beta_{2i}$, $0 < u_i(t) < 1$, $t \in (\beta_{1i}, \beta_{2i})$, $v_i(t) = (1 - u_i^2(t))^{1/2}$, $u_i(t), v_i(t) \in C^1(0, \infty)$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$. Через k будем обозначать произвольное подмножество из $\mathsf{n} = (1, 2, \ldots, n)$ или число 0, через $|\mathsf{k}|$ — число элементов в k при $\mathsf{k} \neq (0)$; при $\mathsf{k} = (0)$ полагаем $|\mathsf{k}| = 0$. Пусть $t_0 = \dfrac{|r|}{R_0}$, $t_{\mathsf{k}} = \dfrac{|r(\bar{\mathsf{k}})|}{|r(\mathsf{k})|}$ при $\mathsf{k} \neq (0)$, $u_{i\mathsf{k}} = u_i(t_{\mathsf{k}})$, $v_{i\mathsf{k}} = v_i(t_{\mathsf{k}})$, $\hat{v}_i = \prod_{\mathsf{k}, |\mathsf{k}|=i} v_{i\mathsf{k}}$; здесь и далее в функциях $u_{m\mathsf{k}}, v_{m\mathsf{k}}$ считаем $|\mathsf{k}| = m$, если не оговорено иное. Покажем, что числа β_{1i+1}, β_{2i+1} можно выбрать так, что для любых $\mathsf{k}', \mathsf{k}''$ при $|\mathsf{k}'| = |\mathsf{k}''| = i+1$, $\mathsf{k}' \neq \mathsf{k}''$ выполняется

$$\hat{v}_i\, v_{i+1,\mathsf{k}'}\, u_{i+1,\mathsf{k}''} = \hat{v}_i\, u_{i+1,\mathsf{k}''}. \tag{3.1}$$

Для этого достаточно показать, что $v_{i+1,\mathrm{k}'} \equiv 1$ при $r \in \in \operatorname{supp} \hat{v}_i \, u_{i+1,\mathrm{k}''}$, т. е. что

$$|r(\overline{\mathrm{k}}')| \geq \beta_{2,i+1} \, |r(\mathrm{k}')|. \tag{3.2}$$

Так как $\mathrm{k}' \neq \mathrm{k}''$, то $\exists s$, $s \in \mathrm{k}'$, $s \notin \mathrm{k}''$. Набор $\mathrm{k} = \mathrm{k}' \setminus s$ состоит из i чисел и поэтому при $r \in \operatorname{supp} \hat{v}_i$ выполняется неравенство

$$|r(\overline{\mathrm{k}})| \geq \beta_{1i} \, |r(\mathrm{k})|, \quad \text{т. е.} \quad |r(\overline{\mathrm{k}}')|^2 + |r_s|^2 \geq |r(\mathrm{k}' \setminus s)|^2 \beta_{1i}^2,$$

откуда

$$|r(\overline{\mathrm{k}}')|^2 \geq |r(\mathrm{k}')|^2 \beta_{1i}^2 - |r_s|^2 \beta_{1i}^2 - |r_s|^2. \tag{3.3}$$

С другой стороны, поскольку $s \notin \mathrm{k}''$, то при $r \in \operatorname{supp} u_{i+1,\mathrm{k}''}$ имеем $|r_s| \leq \beta_{2,i+1} \, |r(\mathrm{k}'')|$. Поэтому из (3.3) следует неравенство

$$|r(\overline{\mathrm{k}}')|^2 \geq |r(\mathrm{k}')|^2 \beta_{1i}^2 - (1 + \beta_{1i}^2) \, \beta_{2,i+1}^2 \, |r(\mathrm{k}'')|^2. \tag{3.4}$$

Так как $|r(\mathrm{k}'')|^2 \leq |r|^2 = |r(\mathrm{k}')|^2 + |r(\overline{\mathrm{k}}')|^2$, то из (3.4) вытекает оценка

$$[1 + (1 + \beta_{1i}^2) \, \beta_{2,i+1}^2] \, |r(\overline{\mathrm{k}}')|^2 \geq [\beta_{1i}^2 - (1 + \beta_{1i}^2) \, \beta_{2,i+1}^2] \, |r(\mathrm{k}')|^2.$$

Отсюда видно, что для справедливости (3.2) достаточно подчинить число $\beta_{2,i+1}$ условию:

$$\beta_{2,i+1}^2 \leq [\beta_{1i}^2 - (1 + \beta_{1i}^2) \, \beta_{2,i+1}^2][1 + (1 + \beta_{1i}^2) \, \beta_{2i+1}]^{-1}, \tag{3.5}$$

которое будет выполнено, если положить, например, $\beta_{2i+1} = = \beta_{1i}/3$. Таким образом, возможность выбора чисел β_{1i}, β_{2i}, обеспечивающего справедливость равенства (3.1), доказана.

п.3.2. Фиксируем число i, $0 \leq i \leq n-2$, и пусть для функции $g(r)$ $\operatorname{supp} g(r) \subseteq \operatorname{supp} \hat{v}_i$. Рассмотрим различные наборы k, $\mathrm{k} \subset \mathrm{n}$, $|\mathrm{k}| = i+1$, занумеруем их произвольным образом $\mathrm{k}_1, \mathrm{k}_2 \ldots \mathrm{k}_m$, где $m = m(|\mathrm{k}|)$ и определим функции v_{i+1,k_ℓ} $\ell = 1, \ldots, m$ согласно п.3.1; кроме того, положим $v_{i+1,\mathrm{k}_0} \equiv 1$. Применим локализационную формулу (3.8) [1] последовательно к функциям

$\omega_\alpha = g \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{i+1,\mathsf{k}_\ell}$ $\alpha = 0, 1, \ldots, m-1$. Тогда, учитывая, что в силу (3.1)

$$\omega_\alpha u_{i+1,\mathsf{k}_{\alpha+1}} = g u_{i+1,\mathsf{k}_{\alpha+1}}, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, m-1,$$

и действуя аналогично п.2.4, получим

$$\begin{aligned}(T_s\omega_\alpha, \omega_\alpha) &= (T_s g u_{i+1,\mathsf{k}_{\alpha+1}}, g u_{i+1,\mathsf{k}_{\alpha+1}}) + (T_s\omega_{\alpha+1}, \omega_{\alpha+1}) + \\ &+ \Phi_{s,\mathsf{k}_{\alpha+1}}[\omega_\alpha], \quad \alpha = 0, 1, \ldots, m-1, \end{aligned} \tag{3.6}$$

где локализационные члены $\Phi_{s,\mathsf{k}_{\alpha+1}}$ определяются формулой (2.9) с ω_α вместо g, $\mathsf{k} = \mathsf{k}_{\alpha+1}$ вместо j,

$$\begin{aligned}&æ_1\Big(r_z(\bar{s})\Big) = u_{i+1}(t_{\mathsf{k}sz}), \quad æ_2\Big(r_z(\bar{s})\Big) = v_{i+1}(t_{\mathsf{k}sz}),\\ &t_{\mathsf{k}sz} = |r(\bar{\mathsf{k}})|\Big(|r(\mathsf{k}\setminus s)|^2 + |z|^2\Big)^{-1/2} \quad \text{при} \quad s \in \mathsf{k},\\ &t_{\mathsf{k}sz} = \Big(|r(\,\overline{\mathsf{k}\cup s}\,)|^2 + |z|^2\Big)^{1/2}|r(\mathsf{k})|^{-1} \quad \text{при} \quad s \notin \mathsf{k}.\end{aligned}$$

Суммируя соотношения (3.6) по α и учитывая, что $\prod_{\ell=0}^{m} v_{i+1,\mathsf{k}_\ell} = \hat{v}_{i+1}$, имеем

$$\begin{aligned}(T_s g, g) = &\sum_{\mathsf{k},|\mathsf{k}|=i+1} (T_s g u_{i+1,\mathsf{k}}, g u_{i+1,\mathsf{k}}) + (T_s g\hat{v}_{i+1}, g\hat{v}_{i+1}) + \\ &+ \sum_{\alpha=0}^{m-1} \Phi_{s\mathsf{k}_{\alpha+1}}[\omega_\alpha],\end{aligned}$$

откуда после суммирования по s получаем

$$\begin{aligned}(Tg, g) = &\sum_{\mathsf{k},|\mathsf{k}|=i+1} (Tg u_{i+1,\mathsf{k}}, g u_{i+1,\mathsf{k}}) + (Tg\hat{v}_{i+1}, g\hat{v}_{i+1}) + \\ &+ \sum_{\alpha=0}^{m-1} \Phi_{\mathsf{k}_{\alpha+1}}[\omega_\alpha],\end{aligned} \tag{3.7}$$

где

$$\Phi_{\mathsf{k}_{\alpha+1}}[\omega_\alpha] = \sum_{s=1}^{n} \Phi_{s\mathsf{k}_{\alpha+1}}.$$

Кроме того, для функции g, очевидно,

$$|g|^2 = \sum_{\mathsf{k},|\mathsf{k}|=i+1} |gu_{i+1,\mathsf{k}}|^2 + |g\hat{v}_{i+1}|^2. \tag{3.8}$$

п.3.3. Пусть $\psi \in D_H$, $\varepsilon_2 > 0$ — произвольное число. Положим в (3.7) $i = 0$, $g = \psi_0 = \psi\hat{v}_0 = \psi v_0$. Так как $|\mathsf{k}| = i+1 = 1$, то $m = n$ и можно считать $\mathsf{k}_\ell = (\ell)$, $\ell = 1, 2, \ldots, n$. Тогда в силу (3.7)

$$\begin{aligned}(T\psi_0, \psi_0) &= \sum_{\ell=1}^{n}(T\psi_0 u_{1,\ell}, \psi_0 u_{1\ell}) + (T\psi_0\hat{v}_1, \psi_0\hat{v}_1) + \\ &+ \sum_{\alpha=0}^{n-1} \Phi_{\alpha+1}\left[\psi_0 \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{1\ell}\right].\end{aligned}$$

Используя Лемму 4.2 с $\psi = \psi_0 \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{1,\ell}$, $\mathsf{k} = (\alpha+1)$ и равенство (3.8), получим, что по $\forall\varepsilon_2 > 0$ $\exists R_1(\varepsilon_2)$ так, что при $R_0 > R_1(\varepsilon_2)$

$$\begin{aligned}|\Phi_{\alpha+1}[\psi]| &\le \varepsilon_2 n \int |\psi_0|^2 |r|^{-2} dr + c_1 \int_{t_{\alpha+1}\le\beta_{21}} |\psi_0|^2 |r|^{-2} v_1^2(t_{\alpha+1})\, dr \le \\ &\le \varepsilon_2 n \sum_{\ell=1}^{n} \int |\psi_0|^2 u_{1\ell}^2 |r|^{-2}\, dr + 2\varepsilon_2 n \int |\psi_0|^2\, \hat{v}_1^2\, dr.\end{aligned} \tag{3.9}$$

Пусть теперь $i \ge 1$, $g \equiv \psi_i := \psi_0 \prod_{\ell=0}^{i} \hat{v}_\ell$. Тогда в силу Леммы 4.2 при любых k, $|\mathsf{k}| = i+1$, и α, $0 \le \alpha \le m-1$, аналогично предыдущему получим, что по $\forall\varepsilon_2 > 0$ $\exists R_2(\varepsilon_2)$ так, что при $R_0 > R_2(\varepsilon_2)$

$$\begin{aligned}\left|\Phi_{\mathsf{k}_{\alpha+1}}\left[\psi_i \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{i+1,\mathsf{k}_\ell}\right]\right| &\le \varepsilon_2 n \int |\psi_i|^2 |r|^{-2}\, dr + \\ &+ c_2 \int |\psi_i|^2 |r|^{-2}\, dr \le 2\varepsilon_2 \int |\psi_1|^2\, dr.\end{aligned} \tag{3.10}$$

п.3.4. Положим в (3.7) и (3.8) $g = \psi_i = \psi\hat{v}_0 \ldots \hat{v}_i$ и просуммируем эти равенства по i от нуля до $n-1$. Тогда, оценивая локализационные члены из (3.7) с помощью (3.9), (3.10), мы получим, что

$$(T\psi_0, \psi_0) \geq \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{\mathrm{k}, |\mathrm{k}|=i+1} (T\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}, \psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}) -$$

$$- \varepsilon_2 c_3 \sum_{\ell=1}^{n} \int |\psi_0 u_{1,\ell}|^2 |r|^2 \, dr - \varepsilon_2 c_4 \int |\psi_1|^2 \, dr. \quad (3.11)$$

Суммирование соотношений (3.8) приводит к равенству

$$|\psi_0|^2 = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{\mathrm{k}, |\mathrm{k}|=i+1} |\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}|^2; \quad (3.12)$$

здесь $u_{n,\mathrm{k}} \equiv 1$ при $\mathrm{k} = \mathrm{n}$. Так как

$$|\psi_0|^2 = \sum_{\mathrm{k}, |\mathrm{k}|=1} |\psi_0 u_{1\mathrm{k}}|^2 + |\psi_1|^2, \quad (3.13a)$$

то из (3.12) следует, что

$$|\psi_1|^2 = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{\mathrm{k}, |\mathrm{k}|=i+1} |\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}|^2. \quad (3.13b)$$

В силу (3.12)

$$(V\psi_0, \psi_0) = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{\mathrm{k}, |\mathrm{k}|=i+1} (V\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}, \psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}). \quad (3.14)$$

Далее сложим почленно (3.11) и (3.14), выделим в правой части полученного неравенства слагаемые, содержащие функции

$\psi_0 u_{1\mathrm{k}}$ при $|\mathrm{k}| = 1$ и заменим в $\|\psi_1\|^2$ функцию $|\psi_1|^2$ по формуле (3.13b). Тогда мы получим, что

$$(H\psi_0, \psi_0) \geq \sum_{j=1}^{n} \left(\left(H - \varepsilon_2 c_2 |r|^{-2}\right) \psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j} \right) + \\ + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{\mathrm{k}, |\mathrm{k}|=i+1} \left((H - \varepsilon_2 c_4)\, \psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}, \psi_i u_{i+1,\mathrm{k}} \right). \quad (3.15)$$

п.3.5. Неравенство (3.15) является исходным для получения (2.22). Оценим снизу правую часть (3.15), начиная со слагаемых, содержащих ψ_i при $1 \leq i \leq n-2$. Пусть $r \in \operatorname{supp} \psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}$. Тогда

$$|r(\bar{\mathrm{k}})| \leq |r(\mathrm{k})|\, \beta_{2,i+1} \quad (3.16)$$

и, значит, для любого $p \in \mathrm{k}$ и $\mathrm{k}' = \mathrm{k} \setminus p$

$$|r(\mathrm{k})|^2 = |r_p|^2 + |r(\mathrm{k}')|^2 \geq R_0^2 (1 + \beta_{2,i+1}^2)^{-1}. \quad (3.17)$$

Так как $|\mathrm{k}'| = i$, то

$$|r(\bar{\mathrm{k}})|^2 + |r_p|^2 = |r(\bar{\mathrm{k}}')|^2 \geq |r(\mathrm{k}')|^2 \beta_{1,i}^2$$

и в силу (3.16)

$$\left(|r_p|^2 + |r(\mathrm{k}')|^2 \right) \beta_{2,i+1}^2 + |r_p|^2 \geq |r(\mathrm{k}')|^2 \beta_{1i}^2.$$

Поэтому

$$|r_p|^2 \geq |r(\mathrm{k}')|^2 (\beta_{1i}^2 - \beta_{2,i+1}^2)(1 + \beta_{2,i+1}^2)^{-1}$$

и вследствие (3.17)

$$|r_p|^2 (1 + \beta_{1,i}^2) \geq (\beta_{1i}^2 - \beta_{2,i+1}^2)(1 + \beta_{2,i+1}^2)^{-1} R_0.$$

Отсюда следует, что для больших R_0 величины $|r_p|$, $|r_p - A_s|$ при $p \in \mathrm{k}$ велики. Значит, по $\varepsilon_2 > 0$ можно выбрать R_0 так, что

$$(V - \varepsilon_2 c_4) |\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}|^2 \geq V[\bar{\mathrm{k}}]\, |\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}|^2 - \varepsilon_2 c_5\, |\psi_i u_{i+1,\mathrm{k}}|^2, \quad (3.18)$$

где $V[\overline{\mathsf{k}}]$ есть сумма потенциалов взаимодействия электронов из $\mathsf{n}\setminus\mathsf{k}$ между собой и с ядрами. Пусть

$$T[\overline{\mathsf{k}}]=\sum_{i,\,i\notin\mathsf{k}}^{1,n} T_i,\quad H[\overline{\mathsf{k}}]=T[\overline{\mathsf{k}}]+V[\overline{\mathsf{k}}],\quad \mu[\overline{\mathsf{k}}]=\inf H[\overline{\mathsf{k}}].$$

В силу (3.18)

$$\Big((H-\varepsilon_2c_4)\,\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}},\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}}\Big)\geq (H[\overline{\mathsf{k}}]\,\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}},\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}})-$$
$$-\varepsilon_2c_5\left\|\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}}\right\|^2\geq(\mu[\overline{\mathsf{k}}]-\varepsilon_2c_5)\left\|\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}}\right\|^2=$$
$$=(\mu_{n-i-1}-\varepsilon_2c_5)\left\|\psi_i\,u_{i+1,\mathsf{k}}\right\|^2,$$

где $\mu_m=\inf H_m$ (см. §1). Согласно [2], $\mu_m=\inf\sigma_{ess}(H_{m+1})$ и $\mu_{n-i-1}\geq\mu_{n-2}$. Поэтому при $1\leq i\leq n-2$

$$\Big((H-\varepsilon_2c_5)\,\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}},\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}}\Big)\geq(\mu_{n-2}-\varepsilon_2c_5)\left\|\psi_iu_{i+1,\mathsf{k}}\right\|^2. \quad (3.19)$$

В случае $i=n-1$ оценки упрощаются. При $r\in\operatorname{supp}\psi_{n-1}$ для $\forall p\ \ |r_p|^2\geq|r(\mathsf{n}\setminus p)|^2\beta_{1,n-1}^2$ и, значит,

$$R_0\leq|r|^2=|r_p|^2+|r(\mathsf{n}\setminus p)|^2\leq|r_p|^2(1+\beta_{1,n-1}^{-2}),\ \ .$$

откуда $|r_p|^2\geq R_0^2(1+\beta_{1,n-1}^{-2})^{-1}$. Поэтому при больших R_0 величины $|r_p|$ и $|r_p-A_s|$ велики для $\forall p,s$ и, значит, при больших R_0

$$\Big((H-\varepsilon_1c_4)\,\psi_{n-1},\psi_{n-1}\Big)\geq-\varepsilon_2c_5\left\|\psi_{n-1}\right\|^2\geq(\mu_{n-2}-\varepsilon_2c_5)\left\|\psi_{n-1}\right\|^2, \quad (3.20)$$

ибо $n\geq2$ и $\mu_{n-2}\leq0$. Подставляя (3.19) и (3.20) в (3.15) и учитывая (3.13a, b), получим, что

$$(H\psi_0,\psi_0)\geq\sum_{j=1}^{n}\Big((H-\varepsilon_2c_4\,|r|^{-2})\,\psi_0u_{1j},\psi_0u_{1j}\Big)+$$
$$+(\mu_{n-2}-\varepsilon_2c_5)\left(\left\|\psi_0\right\|^2-\sum_{j=1}^{n}\left\|\psi_0u_{1j}\right\|^2\right). \quad (3.21)$$

Наконец, поскольку $\mu = \mu_{n-1} \in \sigma_d(H_{n-1})$, то в силу [2] $\mu_{n-1} < < \mu_{n-2} = \inf \sigma_{ess}(H_{n-1})$. Поэтому при малом ε_2 $\mu_{n-2} - \varepsilon_2 c_5 \geq \geq \mu_{n-1}$ и (2.22) следует из (3.21) при $\varepsilon_2 c_4 \leq \varepsilon_1$.

п.3.6. **Лемма 3.1.** *Пусть $j \in \mathsf{n}$, функции $\varphi\left(r(\bar{j})\right)$, $f(r_j)$, $\omega(r)$ таковы, что $\|\varphi\|_{R(\bar{j})} = \|f\|_{R_j} = 1$, $f(r_j) \equiv 0$ при $|r_j| \leq R$, $0 \leq \omega(r) \leq 1$ и $\omega(r) \equiv 0$ при $|r(\bar{j})| \leq \beta |r_j|$ для некоторых чисел $\beta < 8^{-1}$, $R > 1$.*

Тогда по $\forall \varepsilon_1 > 0$ можно указать число $R_0 = R_0(\varepsilon_1)$ так, что при $R \geq R_0$ и всех s и i для функции $\psi = \varphi f \omega$ равномерно по f выполняются оценки

$$\left|\left(\left(|r_j|^{-1} - |A_s - r_j|^{-1}\right)\psi, \psi\right)\right| \leq \varepsilon\left(f, f\,|r_j|^{-1}\right) \tag{3.22a}$$

$$\left|\left((|r_j|^{-1} - |r_{ij}|^{-1})\psi, \psi\right)\right| \leq \varepsilon\left(f, f\,|r_j|^{-1}\right) \tag{3.22b}$$

Доказательство. Пусть $r \in \operatorname{supp}\psi$. Тогда $|r_i| \leq \beta\,|r_j|$, $|r_j| \geq R$ и при малых β и больших R мы можем использовать для оценок (3.22) формулу Тейлора. Имеем

$$\begin{aligned} |A_s - r_j|^{-1} &= |r_j|^{-1}\left(|A_s|^2\,|r_j|^{-2} - 2(A_s, r_j)\,|r_j|^{-2} + 1\right)^{-1/2} = \\ &= |r_j|^{-1}\left(1 + \delta_1(R)\right), \end{aligned} \tag{3.23a}$$

$$\begin{aligned} |r_i - r_j|^{-1} &= |r_j|^{-1}\left(|r_i|^2\,|r_j|^{-2} - 2(r_i, r_j)\,|r_j|^{-2} + 1\right)^{-1/2} = \\ &= |r_j|^{-1}\left(1 + \frac{|r_i|}{|r_j|}\,g(r_i, r_j)\right), \end{aligned} \tag{3.23b}$$

где $\delta_1(R) \to 0$ при $R \to \infty$ и функция $g(r_i, r_j)$ равномерно ограничена при $|r_i|\,|r_j|^{-1} \leq \beta$. Ясно, что (3.22a) следует из (3.23a) при больших R. Чтобы получить (3.22b), в силу (3.23b) достаточно доказать, что $\left|\left(|g(r_i, r_j)|\,|r_i|\,|r_j|^{-1}\psi, \psi\right)\right| < \varepsilon\left(f, f\,|r_j|^{-1}\right)$.

Пусть $G_1 = \left\{ r \mid r \in \operatorname{supp}\psi,\ |r_i| \le |r|^{1/2} \right\}$, $G_2 = \operatorname{supp}\psi \setminus G_1$. Тогда

$$\left|(\psi, |r_i|\, |r_j|^{-2} g\psi)_{G_1}\right| \le c_0 \left(|r_j|^{-3/2}\psi, \psi \right) \le \frac{c_0}{\sqrt{R}} \left(|r_j|^{-1} f, f \right),$$
$$\left|(\psi, |r_i|\, |r_j|^{-2} g\psi)_{G_2}\right| \le c_0\beta \left(|r_j|^{-1}\psi, \psi \right) \le c_0\beta \left(|r_j|^{-1} f, f\, \delta_2(r_j) \right), \tag{3.24}$$

где

$$c_0 = \sup |g(r_i, r_j)|, \quad \delta_2(r_j) = \int\limits_{|r_i| \ge \sqrt{|r_j|}} |\varphi|^2 \omega^2\, dr(\bar{j}) \le \int\limits_{|r_i| \ge \sqrt{R}} |\varphi|^2\, dr(\bar{j}).$$

Складывая неравенства (3.24), получаем, что

$$\left| \left(\psi(r_j), |r_i|\, |r_j|^{-2} g\psi \right) \right| \le \delta_3(R) \left(|r_j|^{-1} f, f \right) \tag{3.25}$$

с $\delta_3(R) \to 0$ при $R \to \infty$ и поэтому (3.22b) следует из (3.25).

§4. ЛОКАЛИЗАЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ

п.4.1. В настоящем параграфе собраны вспомогательные предложения, отражающие особенности применения геометрических методов в случае нелокальных операторов T кинетической энергии. Эти предложения включают оценки билинейной формы T на функциях с не пересекающимися носителями (Лемма 4.1) и оценки локализационной ошибки (Леммы 4.2, 4.3). Отметим, что многие из получаемых здесь оценок являются более тонкими, чем это требуется для доказательств в §§2, 3. Мы не загрубляем их в надежде, что в будущем они могут быть востребованы для оценки второго члена в эффективных потенциалах в операторах (1.4), (1.8).

Лемма 4.1. *Пусть T_s' — оператор кинетической энергии s-го электрона, $\omega_\ell(r)$ — функции из D_H с носителями в областях*

$$\Omega_\ell = \{ r \mid |r| \ge R,\ |r(\bar{\ell})| \le \beta\, |r_\ell| \},\ \ell = i, j,\ 1 \le i, j \le n,\ i \ne j,$$

где $\beta < 1/3$, $R > 1$ *— произвольные числа. Тогда*
при $s \neq i, j$ *и любом* R

$$\mathrm{Re}\,(T_s'\omega_i, \omega_j) = 0; \tag{4.1}$$

при $s = i, j$ *по* $\forall\varepsilon > 0\ \exists R_0 > 0$ *так, что при* $R > R_0$

$$|\mathrm{Re}\,(T_s'\omega_i, \omega_j)| \leq \varepsilon \left(\left\|\omega_i\, e^{-\gamma_0\,|r_i|}\right\|^2 + \left\|\omega_j\, e^{-\gamma_0\,|r_j|}\right\|^2\right), \tag{4.2}$$

где $\gamma_0 = m/10$.

Замечания. 1. Лемма оценивает перекрестные члены, возникающие при вычислении формы $\left(T' \sum\limits_{i=1}^{n} \psi_i, \sum\limits_{j=1}^{n} \psi_j\right)$ (см. п.2.3).

2. Поскольку $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ при $i \neq j$ (см.(4.6)), то вместо операторов T_s' в (4.1), (4.2) можно написать $T_s = T_s' - m$.

п.4.2. Доказательство. Прежде всего заметим, что для любых функций $f(r)$, $g(r)$, которые для почти всех фиксированных значений $r(\overline{s})$ принадлежат D_{T_s}, выполняется равенство

$$4\mathrm{Re}\,(T_s'f, g) = (T_s'(f+g), f+g) - (T_s'(f-g), f-g). \tag{4.3}$$

Далее, для любой функции $\psi(r)$, с теми же свойствами, что у f и g, в силу формулы (2.14) [1]

$$(T_s'\psi, \psi) = \int\limits_{R^{3n-3}(\overline{s})} \iint \left|\psi\left(r_x(\overline{s})\right) - \psi\left(r_y(\overline{s})\right)\right|^2 F(|x-y|)\, dx\, dy\, dr(\overline{s}), \tag{4.4}$$

где $F(|x-y|) = 4^{-1}\pi^{-2}m^2|x-y|^{-2}K_2(m\,|x-y|)$, $x, y \in R^3$, K_2 — функция Макдональда. Полагая в (4.4) $\psi = f \pm g$ и подставляя полученное выражение в (4.3), получим

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\,(T_s'f, g) \;=\; 2\mathrm{Re} \int\limits_{R^{3n-3}(\overline{s})} \iint \Big[f\left(r_x(\overline{s})\right) g^*\left(r_x(\overline{s})\right) - \\ - f\left(r_x(\overline{s})\right) g^*\left(r_y(\overline{s})\right)\Big] F(|x-y|)\, dx\, dy\, dr(\overline{s}).\end{aligned} \tag{4.5}$$

Далее полагаем $f(r) = \psi_i(r)$, $g(r) = \psi_j(r)$ и переходим к оценкам правой части (4.5). В первую очередь заметим, что

$$\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset. \tag{4.6}$$

Действительно, если $r = (r_1, \ldots, r_n) \in \Omega_i \cap \Omega_j$, то $|r_j| \leq \beta |r_i|$ и $|r_i| \leq \beta |r_j|$. Поэтому $|r_j| = 0$, но это невозможно, так как из включения $r \in \Omega_j$ следует, что $|r(\bar{j})| \leq \beta |r_j| = 0$ и, значит, $|r| = 0$, а по условию $|r| \geq R$. Из (4.6) следует, что в (4.5) член $f\Big(r_x(\bar{s})\Big) g^*\Big(r_x(\bar{s})\Big) \equiv 0$ при $\forall x, r(\bar{s})$, и поэтому

$$\mathrm{Re}\,(T_s' f, g) = 2\mathrm{Re} \int\limits_{R^{3n-3}(\bar{s})} \iint E\Big(r(\bar{s}), x, y\Big) F(|x-y|)\, dx\, dy\, dr(\bar{s}), \tag{4.7}$$

где $E\Big(x, y, r(\bar{s})\Big) = -\omega_i\Big(r_x(\bar{s})\Big)\omega_j^*\Big(r_y(\bar{s})\Big)$.

Пусть

$$\begin{aligned} \Omega_{msz} &= \{r_z(\bar{s}) \mid |r_z(\bar{s})| \geq R,\ |z|^2 + |r(\bar{s}, \overline{m})|^2 \leq \beta^2 |r_m|^2\}, \\ & \quad s \neq m, \\ \Omega_{s,z} &= \Omega s, s, z = \{r_z(\bar{s}) \mid |r_z(\bar{s})| \geq R,\ |r_z(\bar{s})| \leq \beta |z|\}, \\ & \quad z = x, y, \quad s = i, j. \end{aligned}$$

Ясно, что $\Omega_{msz} \supseteq \mathrm{supp}\, \omega_m\Big(r_z(\bar{s})\Big)$ $s, m = i, j$.

Если $s \neq i, j$, то компоненты r_i, r_j векторов $r_x(\bar{s})$ и $r_y(\bar{s})$ — одни и те же. Поэтому при $r_x(\bar{s}) \in \Omega_{isx}$ выполняется $|r_j| \leq \beta |r_i|$, и при $r_y(\bar{s}) \in \Omega_{jsy}$ имеем $|r_i| \leq \beta |r_j|$. Следовательно, как и ранее $|r_j| = 0$, и как и ранее это невозможно, ибо в Ω_{jsy} должно выполняться неравенство

$$R^2 = |r_y(\bar{s})|^2 = |y|^2 + |r(\bar{s}, \bar{j})|^2 + |r_j|^2 \leq (1 + \beta^2)\, |r_j|^2.$$

Поэтому при $s \neq i, j$ и любых x, y

$$\Omega_{isx} \cap \Omega_{jsy} = \emptyset$$

и, значит, $E\Big(x, y, r(\bar{s})\Big) \equiv 0$. Таким образом, (4.1) доказано.

п.4.3. Рассмотрим теперь случай $s = i$ (при $s = j$ рассуждаем аналогично). Так как $\operatorname{supp}\psi_m\Big(r_z(\bar{s})\Big) \subseteq \Omega_{msz}$, то при оценке $\operatorname{Re}(T'_s f', g)$ в (4.7) $(3n+3)$-кратный интеграл достаточно брать только по области $\Omega = \{x, y, r(\bar{s}) \mid r_x(\bar{i}) \in \Omega_{iix},\ r_y(\bar{i}) \in \Omega_{jiy}\}$. Полагая для произвольной точки r из Ω $a_1^2 = \sum\limits_{\ell,\ell\neq i,j}^{1,n} |r_\ell|^2$, $a^2 = |r_j|^2$, имеем $a_1^2 + a^2 \leq \beta^2|x|^2$, $a_1^2 + a^2 + |x|^2 \geq R^2$, $a_1^2 + |y|^2 \leq \beta^2 a^2$, $a_1^2 + a^2 \geq R$. Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} |x-y|^2 &\geq 0{,}5\,|x|^2 + |y|^2 + 4^{-1}|x|^2 - 2\,|x|\,\beta a + 4^{-1}a^2\beta^{-2} \geq \\ &\geq 0{,}5\left(|x|^2 + |y|^2 + a^2\right) \geq \frac{1}{4}\,R^2 \end{aligned}$$

и $|x-y| \geq 5^{-1}(|x| + |y| + |a|)$. Поэтому при большом R величина $|x-y|$ велика и мы можем воспользоваться для оценки бесселевой функции $K_2(m\,|x-y|)$, входящей в $F(|x-y|)$, асимптотической формулой ([9], с. 32)

$$|K_2(m|x-y|)| \leq d_0\, e^{-m\,|x-y|}\,|x-y|^{-1/2}, \tag{4.8}$$

где d_0 — некоторая константа. В силу (4.8) по $\forall\varepsilon_1 > 0$ $\exists R_0$ так, что при $R > R_0$

$$|F(|x-y|)| \leq \varepsilon_1\, e^{-\gamma(|x|+|y|+|a|)}, \tag{4.9}$$

где $\gamma = m/5$. Используя в (4.7) оценку (4.9) и применяя неравенство Буняковского, имеем

$$\begin{aligned} |\operatorname{Re}(T'_i\omega_i, \omega_j)| &\leq 2\varepsilon_1 \Bigg| \int\limits_{R^{3n-3}(\bar{i})} \iint \omega_i\Big(r_x(\bar{i})\Big)\omega_j\Big(r_y(\bar{i})\Big) \times \\ &\times e^{-\gamma(|x|+|y|+a)}\,dx\,dy\,dr(\bar{i})\Bigg| \leq \\ &\leq 2\varepsilon_1 \iint e^{-\gamma\,|y|}\left(\int\limits_{R^{3n-3}(\bar{i})} \left|\omega_i\Big(r_x(\bar{i})\Big)\right|^2 dr(\bar{i})\right)^{1/2} \times \end{aligned}$$

$$\times e^{-\gamma|x|/2}\left(\int\limits_{R^{3n-3}(\bar{i})}\left|\omega_j\left(r_y(\bar{i})\right)\right|^2 e^{-2\gamma a}\right)^{1/2} e^{-\gamma|x|/2}dx\,dy \leq$$

$$\leq \varepsilon_1 d_1 \int\limits_{R^{3n-3}(\bar{i})}\left|\omega_i\left(r_x(\bar{i})\right)\right|^2 e^{-\gamma|x|}dx\,dr(\bar{i}) +$$

$$+\varepsilon_1 d_2 \int\limits_{R^{3n-3}(\bar{i})}\left|\omega_j\left(r_y(\bar{i})\right)\right|^2 e^{-2\gamma|r_j|}dy\,dr(\bar{i}),$$

где $d_1 = \int e^{-2\gamma|y|}dy$, $d_2 = \int e^{-\gamma|x|}dx$. Выбирая $\varepsilon_1 = \varepsilon/d_2$ и переобозначая переменные интегрирования $x = r_i$, $y = r_i$, получаем утверждение Леммы.

п.4.4. Определим функции $u_i(t)$, $v_i(t)$ так же, как в п.3.1. и для произвольного набора $\mathsf{k} \subset \mathsf{n}$ и числа $s \in \mathsf{n}$ введем числа $d(\mathsf{k})$, $d(\bar{\mathsf{k}})$, t_{k} согласно п.2.2, числа $t_{\mathsf{k}sz}$ согласно п.3.2. Так как число s — фиксировано, то мы будем его опускать, полагая $t_{\mathsf{k}z} = t_{\mathsf{k}sz} = t_{\mathsf{k}}\left(r_z(\bar{s})\right)$. Пусть $j = |\mathsf{k}| \geq 1$,

$$æ_1(t_{\mathsf{k}z}) = u_j(t_{\mathsf{k}z}), \quad æ_2(t_{\mathsf{k}z}) = v_j(t_{\mathsf{k}z}),$$

$$L_{s\mathsf{k}}(x,y) = L(x,y,d(\bar{s}),\mathsf{k}) = (2\pi)^{-2}m^2|x-y|^{-2}K_2(m|x-y|)\times$$
$$\times\sum_{i=1}^{2}[æ_i(t_{\mathsf{k}x}) - æ_i(t_{\mathsf{k}y})]^2, \quad x,y \in R^3$$

и для любой функции $\psi(r) \in \mathcal{L}^2(R^{3n})$

$$\Phi_{s,\mathsf{k}}[\psi] = \int\limits_{R^{3n-3}(\bar{s})}\int\int L_{s\mathsf{k}}(x,y)\,\psi\left(r_y(\bar{s})\right)\psi^*\left(r_x(\bar{s})\right)dx\,dy\,dr(\bar{s}).$$

п.4.5. **Лемма 4.2.** *По* $\forall\varepsilon_1 > 0$ $\exists R > 0$ *так, что для* $\forall\psi(r)$, $\psi \in C^1$, $\psi(r) \equiv 0$ *при* $|r| \leq R$, *выполняется неравенство*

$$|\Phi_{s,\mathsf{k}}[\psi]| \leq \varepsilon_1 \int |\psi|^2|r|^{-2}dr + c\int|\psi|^2|r|^{-2}v_j^2(t_{\mathsf{k}})\chi_{j\mathsf{k}}\,dr \qquad (4.10)$$

где $\chi_{j\mathsf{k}}$ *— характеристическая функция области* $\beta_{1j} \leq t_{\mathsf{k}} \leq \leq \beta_{2j}$ *в* R^{3n} *и константа* c *не зависит от* ψ, ε *и* R.

Замечание. Согласно локализационной формуле Либа – Лосса (см. (3.8) [1]),

$$(T_s\psi u_j, \psi u_j) + (T_s\psi v_j, \psi v_j) = (T_s\psi, \psi) + \Phi_{s\mathsf{k}}[\psi]. \tag{4.11}$$

Поэтому Лемма 4.2 дает оценку ошибки при локализации функциями $u_j(t_{\mathsf{k}})$, $v_j(t_{\mathsf{k}})$.

Следствие. Пусть $j = |\mathsf{k}| = 1, \mathsf{k} = (m)$ и функция $\psi(r)$ имеет вид

$$\psi(r) = \sum_{i=1}^{d} \varphi_i\Big(r(\overline{m})\Big) F_i(r_m),$$

где $\varphi_i \in \mathcal{L}^2\Big(R^{3n-3}(\overline{m})\Big)$, $(\varphi_i, \varphi_p) = \delta_{ip}$, $F_i(r_m) \in \mathcal{L}^2(R^3_m)$ — произвольные функции, $F_i(r_m) \equiv 0$ при $|r_m| \leq R$. Тогда по $\forall \varepsilon_1 > 0$ $\exists R > 0$ так, что

$$|\Phi_{s,\mathsf{k}}[\psi]| \leq 2\varepsilon_1 \sum_{i=1}^{d} \Big\| F_i(r_m)\, |r_m|^{-1} \Big\|^2.$$

Действительно, поскольку $|r| \geq |r_m|$, то первое слагаемое в правой части (4.10) дает $\varepsilon_1 \sum\limits_{i=1}^{d} \Big\| F_i\, |r_m|^{-1} \Big\|^2$. Для второго слагаемого мы имеем

$$c \int \psi|^2\, |r|^{-2} v_1^2(t_m)\, \chi_1(t_m)\, dr \leq c^0 \sum_{i=1}^{d} \int |\varphi_i|^2\, |F_i|^2\, |r_m|^{-2} v_1^2(t_m)\, dr,$$

где c^0 — некоторая константа. Так как $|r(\overline{m})| \geq \beta_{11}\, |r_m| \geq \beta_{11} R$ при $r \in \operatorname{supp} v_1(t_m)\, F_i(r_m)$, то при большом R

$$c^0 \int \Big|\varphi_i\Big(r(\overline{m})\Big)\Big|^2 v_1^2(t_m)\, dr(\overline{m}) \leq \varepsilon_1.$$

Поэтому

$$\left| c \int |\psi|^2 |r|^{-2} v_1^2(t_m)\, \chi_{1m}(t_m)\, dr \right| \leq \varepsilon_1 \sum_{i=1}^{d} \Big\| F_i(r_m)\, |r_m|^{-1} \Big\|^2.$$

Собирая вместе оценки 1-го и 2-го членов в (4.10) получаем утверждение Следствия.

п.4.6. Доказательство. Для произвольной области $D \subseteq R^6$ положим

$$J\Big(r(\overline{s});\, D\Big) = \iint\limits_{D} L_{s\mathsf{k}}(x,y)\,\psi\Big(r_y(\overline{s})\Big)\,\psi^*\Big(r_x(\overline{s})\Big)\,dx\,dy,$$

$$J\Big(r(\overline{s})\Big) = J\Big(r(\overline{s});\, R^6\Big), \quad \Phi(D) = \int\limits_{R^{3n-3}(\overline{s})} J\Big(r(\overline{s});\, D\Big)\,dr(\overline{s}).$$

Очевидно, $\Phi(R^6) = \Phi_{s\mathsf{k}}[\psi]$. Доказательство леммы состоит в разбиении пространства R^6 на области D специального вида и в последующей оценке функционалов $J(r(\overline{s});\, D)$ и $\Phi(D)$ по этим областям.

Прежде всего заметим, что согласно определению $æ_i(t_{\mathsf{k}x}) = æ_i(t_{\mathsf{k}y})$, $i = 1,2$, если одновременно $t_{\mathsf{k}x}, t_{\mathsf{k}y} \leq \beta_{ij}$ или $t_{\mathsf{k}x}, t_{\mathsf{k}y} \geq \beta_{2j}$. Поэтому в областях $G_1 = \{x,y \mid t_{\mathsf{k}x}, t_{\mathsf{k}y} \leq \beta_{1j}\}$, $G_2 = \{x,y \mid t_{\mathsf{k}x}, t_{\mathsf{k}y} \geq \beta_{2j}\}$ выполняется $L_{s\mathsf{k}}(x,y) \equiv 0$ и, значит,

$$J\Big(r(s)\Big) = J\Big(r(s);\, G\Big), \quad \text{где} \quad G = R^6 \setminus (G_1 \cup G_2).$$

Заметим, что здесь и далее некоторые из вводимых нами в R^6 областей зависят от координат $r(\overline{s})$ как от параметров и при определенных значениях $r(\overline{s})$ могут оказаться пустыми (например, область G_1 при $s \notin \mathsf{k}$ и $d(\overline{\mathsf{k}}, \overline{s}) > \beta_{1j}\, d(\mathsf{k})$). Поскольку это приводит лишь к упрощению выкладок, мы, как правило, данную ситуацию отдельно не рассматриваем.

Пусть $\beta > 0$, $2\beta < \beta_{ij}$, $2\beta < \beta_2 - \beta_1$, $\delta_i = [\beta_{ij} - \beta, \beta_{ij} + \beta]$, $i = 1,2$, $\delta_3 = [\beta_{1j} + \beta/2, \beta_{2j} - \beta/2]$. По $\forall \varepsilon_2 > 0$ выберем число β так, что $|u_j'(t)| \leq \varepsilon_2$, $|v_j'(t)| \leq \varepsilon_2$ при $t \in \delta_1 \cup \delta_2$ (это можно сделать, так как $u_j'(\beta_{ij}) = v_j'(\beta_{ij}) = 0$, $i = 1,2$ и $u_j(t), v_j(t) \in C^1$). Положим $\Omega_i = \{x,y \mid t_{\mathsf{k}x}, t_{\mathsf{k}y} \in \delta_i\}$, $i = 1,2,3$, $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$, $E = G \setminus \Omega \cap G$. Так как $G \subset E \cup \Omega$, то нам достаточно оценить $J(r(\overline{s}), D)$ только для $D = \Omega, E$.

п.4.7. Рассмотрим сначала случай $s \notin \mathrm{k}$. Начнем с оценок функционала $J\Big(r(\bar{s}), E\Big)$. Пусть $\gamma_{11} = \beta_{2j} + \beta$, $\gamma_{21} = \beta_{2j}$, $\gamma_{12} = \beta_{2j} - 0{,}5\beta$, $\gamma_{22} = \beta_{2j} - \beta$, $\gamma_{13} = \beta_{1j} + \beta$, $\gamma_{23} = \beta_{1j} + 0{,}\beta$, $\gamma_{14} = \beta_{1j}$, $\gamma_{24} = \beta_{1j} - \beta$, $\gamma_{25} = 0$. Разобьем область E на подобласти

$$E_{xi} = \{x, y \mid t_{\mathrm{k}x} \geq \gamma_{1i}, \quad \gamma_{2,i+1} \leq t_{\mathrm{k}y} \leq \gamma_{2i}\},$$

$$E_{yi} = \{x, y \mid t_{\mathrm{k}y} \geq \gamma_{1i}, \quad \gamma_{2,i+1} \leq t_{\mathrm{k}x} \leq \gamma_{2i}\}, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

и положим

$$E_x = \sum_{i=1}^{4} E_{xi}, \quad E_y = \sum_{i=1}^{4} E_{yi}.$$

Очевидно, $E = E_x \cup E_y$. Оценим величину $|x - y|$ при $(x, y) \in E$. Пусть сначала $(x, y) \in E_x$ и i таково, что $(x, y) \in E_{xi}$. Так как при $d(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s}) > \gamma_{2i}\, d(\bar{\mathrm{k}})$ область E_{xi} пустая, то далее считаем, что $d(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s}) \leq \gamma_{2i}\, d(\bar{\mathrm{k}})$. Очевидно, при $(x, y) \in E_{xi}$

$$\begin{aligned} |x - y| &\geq \sqrt{\gamma_{1i}^2\, d^2(\mathrm{k}) - d^2(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s})} - \sqrt{\gamma_{2i}^2\, d^2(\mathrm{k}) - d^2(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s})} \geq \\ &\geq (\gamma_{1i}^2 - \gamma_{2i}^2)\, d(\mathrm{k})\, (2\gamma_{1i})^{-1} \end{aligned}$$

и

$$|x - y| \geq |x| \left[1 - \left(\frac{\gamma_{2i}^2\, d^2(\mathrm{k}) - d^2(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s})}{\gamma_{1i}^2\, d^2(\mathrm{k}) - d^2(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s})}\right)^{1/2}\right] \geq |x|\, \frac{\gamma_{1i}^2 - \gamma_{2i}^2}{2\gamma_{1i}^2}\,.$$

Взяв в полученных оценках минимум по i $(1 \leq i \leq 4)$ и полагая $\beta_0 = 8^{-1}\beta\beta_{2j}^{-1}$, получим, что при $(x, y) \in E_x$

$$|x - y| \geq \beta_0\, d(\mathrm{k}), \tag{4.12a}$$

$$|x - y| \geq \beta_0\, |x| \geq \beta_0\, |y|. \tag{4.12b}$$

Так как $\psi(r) \equiv 0$ при $|r| \leq R$, то при $r_z(s) \in \operatorname{supp} \psi\Big(r_z(\bar{s})\Big)$ выполняется неравенство $d^2(\mathrm{k}) + d^2(\bar{\mathrm{k}}, \bar{s}) + |z|^2 > R^2$, $z = x, y$.

В области E_x $d^2(\overline{\mathrm{k}},\overline{s}) + |y|^2 \le \gamma_{21}^2 d^2(\mathrm{k})$, значит, при $r_y(s) \in \operatorname{supp}\psi\left(r_y(\overline{s})\right)$ выполняется $d^2(\mathrm{k})\,(1+\gamma_{21}^2) \ge R^2$, т.е.

$$d(\mathrm{k}) \ge R\,(1+\gamma_{21}^2)^{-1/2}. \tag{4.13}$$

Кроме того, заметим, что поскольку $d(\mathrm{k}) \ge \gamma_{21}^{-1} d(\overline{\mathrm{k}},\overline{s})$, то

$$(1+\gamma_{21}^2)^{1/2}\, d(\mathrm{k}) \ge \left(d^2(\overline{\mathrm{k}},\overline{s}) + d^2(\mathrm{k})\right)^{1/2} = d(\overline{s})$$

и в силу (4.12)

$$|x-y| \ge \beta_0'\, d(\overline{s}) = \beta_0'\, |r(\overline{s})|, \tag{4.14}$$

где $\beta_0' = \beta_0(1+\gamma_{21}^2)^{-1/2}$. Вследствие (4.12a), (4.13) величина $|x-y|$ велика при большом R и поэтому, пользуясь для оценки функции $K_2(m\,|x-y|)$ неравенством (4.8) и учитывая (4.12b), (4.14), получим, что

$$|L_{s\mathrm{k}}(x,y)| \le \frac{c_1}{R^{5/2}}\, e^{-c_0\,|x|}\, e^{-c_0\,|y|}\, e^{-c_0\,|r(\overline{s})|}, \tag{4.15}$$

где c_0, c_1 — некоторые константы.

В силу (4.15) имеем

$$|\Phi(E_x)| \le \frac{c_1}{R^{5/2}} \int\limits_{R^{3n-3}(\overline{s})} e^{-c_0\,|r(\overline{s})|} \left[\iint\limits_{E_x} \left|\psi\left(r_y(\overline{s})\right)\right|^2 e^{-c_0(|x|+|y|)} dx\, dy + \right.$$

$$\left. + \iint\limits_{E_x} \left|\psi\left(r_x(\overline{s})\right)\right|^2 e^{-c_0(|x|+|y|)} dx\, dy \right] \le$$

$$\le \frac{c_2}{R^{5/2}} \int |\psi(r)|^2\, e^{-c_0\,|r|/2}\, dr,$$

где c_2 — некоторая константа (здесь мы положили в первом слагаемом $y = r_s$, а во втором $x = r_s$ и учли, что $|r(\overline{s})| + |r(s)| \ge$ $\ge |r|$).

Так как область E_y получается из E_x заменой $x \leftrightarrow y$, то при $(x, y) \in E_y$ мы можем провести аналогичные оценки, заменяя всюду $x \leftrightarrow y$. В результате убеждаемся, что для $\Phi(E_y)$ верна та же оценка, что и для $\Phi(E_x)$, и поэтому

$$|\Phi(E)| \le \frac{2c_2}{R^{5/2}} \int |\psi(r)|^2 e^{-c_0 |r|/2} \, dr. \tag{4.16}$$

п. 4.8. Переходим к оценке функционалов $J(r(\bar{s}), \Omega_i)$, $\Phi(\Omega_i)$, $i = 1, 2, 3$, по-прежнему предполагая, что $s \notin \mathsf{k}$. Сначала оценим разность $æ_\ell(t_{\mathsf{k}x}) - æ_\ell(t_{\mathsf{k}y})$. Имеем

$$|æ_\ell(t_{\mathsf{k}x}) - æ_\ell(t_{\mathsf{k}y})| \le |æ'_\ell(\tilde{t})| \, |t_{\mathsf{k}x} - t_{\mathsf{k}y}|,$$

где $\tilde{t}$ — некоторое число, зависящее от $t_{\mathsf{k}x}$ и $t_{\mathsf{k}y}$, $t_{\mathsf{k}x} \le \tilde{t} \le t_{\mathsf{k}y}$. Далее

$$|t_{\mathsf{k}x} - t_{\mathsf{k}y}| = \frac{|t^2_{\mathsf{k}x} - t^2_{\mathsf{k}y}|}{t_{\mathsf{k}x} + t_{\mathsf{k}y}} \le \frac{\big||x| - |y|\big|(|x| + |y|)}{2d(\mathsf{k})\, 2(\beta_1 - \beta)} \le \frac{\big||x| - |y|\big|(\beta_2 + \beta)}{d(\mathsf{k})(\beta_1 - \beta)}.$$

Поэтому при $(x, y) \in \Omega_i$

$$|æ_\ell(t_{\mathsf{k}x}) - æ_\ell(t_{\mathsf{k}y})| \le 4q_i \, \frac{|x - y|}{d(\mathsf{k})} \, \frac{\beta_2}{\beta_1},$$

где $q_i = \max\limits_{t \in \delta_i} \{|æ'_1(t)|, |æ'_2(t)|\}$. Следовательно, при $(x, y) \in \Omega_i$

$$|L_{s\mathsf{k}}(x, y)| \le c_4 q_i^2 \, |K_2(m\,|x - y|)| \, d^{-2}(\mathsf{k}). \tag{4.17}$$

Пусть $\chi_i(t)$ — характеристическая функция интервала δ_i,

$$\begin{aligned} K[r(\bar{s});\, \Omega_i] \; &= \; \iint \Big|(K_2(m\,|x - y|)\, \psi\big(r_y(\bar{s})\big) \times \\ &\times \chi_i(t_{\mathsf{k}y})\, \psi^*\big(r_x(\bar{s})\big) \chi_i(t_{\mathsf{k}x})\Big| dx\, dy. \end{aligned} \tag{4.18}$$

В силу (4.18)

$$|J(r(\bar{s});\, \Omega_i)| \le c_4 q_i^2 \, d^{-2}(\mathsf{k}) \, K[r(\bar{s});\, \Omega_i]. \tag{4.19}$$

Используя для оценки величины $K[r(\overline{s}); \Omega_i]$ сначала неравенство Буняковского, а потом Юнга, мы получим

$$\begin{aligned} K[r(\overline{s}); \Omega_i] \quad &\leq \quad \|K_2\|_{\mathcal{L}^1} \left\| \psi\Big(r_x(\overline{s})\Big)\chi_i(t_{\mathrm{k}x})\right\|_{\mathcal{L}^2(R^3_x)} \times \\ &\times \left\| \psi\Big(r_y(\overline{s})\Big)\chi_i(t_{\mathrm{k}y})\right\|_{\mathcal{L}^2(R^3_y)}. \end{aligned} \tag{4.20}$$

Заменяя в (4.20) переменные интегрирования x и y на r_s и подставляя (4.20) в (4.19), имеем

$$\begin{aligned} |\Phi(\Omega_i)| \quad &\leq \int\limits_{R^{3n-3}(\overline{s})} \left| J\Big(r(\overline{s}); \Omega_i\Big)\right| dr(\overline{s}) \leq \\ &\leq \quad c_5 q_i^2 \int\limits_{R^{3n}} |\psi(r)|^2 \chi_i(t_{\mathrm{k}})\, d^{-2}(\mathrm{k})\, dr, \end{aligned} \tag{4.21}$$

где учтено, что $t_{\mathrm{k}x} = t_{\mathrm{k}}$ при $x = r_s$. По определению, при $r \in$ $\in \operatorname{supp} \chi_i(t_{\mathrm{k}})$

$$(\beta_1 - 0{,}5\beta)\, d(\mathrm{k}) \leq d(\overline{\mathrm{k}}) \leq (\beta_2 + 0{,}5\beta)\, d(\mathrm{k}),$$

и, значит,

$$5d^2(\mathrm{k}) \geq d^2(\mathrm{k}) + d^2(\overline{\mathrm{k}}) = |r|^2.$$

Поэтому из (4.21) следует неравенство

$$|\Phi(\Omega_i)| \leq c_6 q_i^2 \int\limits_{R^{3n}} |\psi(r)|^2 \chi_i(t_{\mathrm{k}})\, |r|^{-2}\, dr \quad i = 1, 2, 3. \tag{4.22}$$

п.4.9. Дальнейшие оценки для областей Ω_i проводятся по разному в зависимости от i. При $i = 1, 2$ в силу выбора числа β выполняется $q_i \leq \varepsilon_2$ и вследствие (4.22)

$$|\Phi(\Omega_i)| \leq c_6 \varepsilon_2^2 \left\| \psi\, \chi_i(t_{\mathrm{k}})\, |r|^{-1} \right\|^2 \quad i = 1, 2. \tag{4.23}$$

Пусть $i = 3$. В области $\operatorname{supp} \chi_3(t_{\mathrm{k}})$ для некоторого $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\beta)$ выполняется $\varepsilon_0 \leq v_j(t_{\mathrm{k}})$. Поэтому и в силу (4.22)

$$|\Phi(\Omega_3)| \leq c_7 \int |\psi(r)|^2 \chi_3(t_{\mathrm{k}})\, v_j^2(t_{\mathrm{k}})\, |r|^{-2}\, dr, \tag{4.24}$$

где $c_7 = c_6 q_3^2 \varepsilon_0^{-2}$. Из (4.16), (4.23) и (4.24) получаем, что при малом ε_2 и большом R

$$|\Phi(R^6)| = |\Phi_{s\mathsf{k}}[\psi]| \le \varepsilon \left\| \psi\, |r|^{-1} \right\|^2 + c \left\| \psi\, |r|^{-1} v_j \chi_3 \right\|^2,$$

т. е. при $s \notin \mathsf{k}$ неравенство (4.10) доказано.

п.4.10. Пусть $s \in \mathsf{k}$. При $(x, y) \in E_{xi}$

$$d^2(\bar{\mathsf{k}}) \ge \gamma_{1i}^2 \Big(|x|^2 + d^2(\mathsf{k} \setminus s) \Big), \quad d^2(\bar{\mathsf{k}}) \le \gamma_{2i}^2 \Big(|y|^2 + d^2(\mathsf{k} \setminus s) \Big). \tag{4.25}$$

Оценивая с помощью (4.25) $|x|$ сверху, а $|y|$ — снизу, имеем

$$|x - y| \ge |y| - |x| \ge d(\bar{\mathsf{k}}) \left(\gamma_{2i}^{-1} - \gamma_{1i}^{-1} \right). \tag{4.26}$$

Как и в п.4.7 далее считаем, что

$$|r_z(\bar{s})|^2 = d^2(\bar{\mathsf{k}}) + d^2(\mathsf{k} \setminus s) + |z|^2 \ge R^2, \quad z = x, y.$$

Из этих соотношений и (4.25) следует, что

$$(\gamma_{1i}^2 + 1)^{1/2} \gamma_{1i}^{-1}\, d(\bar{\mathsf{k}}) \ge |r_x(\bar{s})| \ge R. \tag{4.27}$$

В силу (4.26), (4.27)

$$|x - y| \ge R\gamma_0, \quad \text{где} \quad \gamma_0 = \min_i (\gamma_{1i} \gamma_{2i}^{-1} - 1)(1 + \gamma_{1i}^2)^{-1/2}.$$

Мы видим, что при большом R величина $|x - y|$ велика. Поэтому применимо неравенство (4.8), откуда вследствие (4.26), (4.27) вытекает оценка

$$|K_2(m\,|x - y|)| \le c_8\, R^{-1/2}\, e^{-a_0\, |r_x(\bar{s})|}\, e^{-a_0\, |x - y|},$$

где a_0, c_8 — некоторые числа. (Поскольку

$$|r_y(\bar{s})| \le |r_y(\bar{s}) - r_x(\bar{s})| + |r_x(s)| = |x - y| + |r_x(s)|,$$

то

$$|K_2(m\,|x - y|)| \le c_8\, R^{-1/2}\, e^{-a_1\, |r_x(\bar{s})|}\, e^{-a_1\, |r_y(\bar{s})|}$$

и, значит,

$$|L_{s\mathsf{k}}(x,y)| \le c_8\, R^{-5/2}\, e^{-a_1\,|r_x(\bar{s})|}\, e^{-a_1\,|r_y(\bar{s})|},$$

где $a_1 = 0{,}5a_0$.

Используя эту оценку и неравенство Буняковского, видим, что

$$|\Phi(E_x)| \le c_8\, R^{-5/2} \int |\psi(r)|^2\, e^{-a_0\,|r|}\, dr.$$

Аналогичная оценка получается и для области E_y. Поэтому

$$|\Phi(E)| \le 2c_8\, R^{-5/2} \int |\psi(r)|^2\, e^{-a_0\,|r|}\, dr. \tag{4.28}$$

Наконец, если $(x,y) \in \Omega_i$, то легко получаем

$$\begin{aligned}
\Big(æ_\ell(t_{\mathsf{k}x}) - æ_\ell(t_{\mathsf{k}y})\Big)^2 &\le q_i^2\, |t_{\mathsf{k}x} - t_{\mathsf{k}y}|^2 \le \\
&\le q_i^2\, \frac{|x-y|^2\, d^2(\mathsf{k})}{\Big(d^2(\mathsf{k}\setminus s) + |x|^2\Big)\Big(d^2(\mathsf{k}\setminus s) + |y|^2\Big)} \le \\
&\le q_i^2 \beta_2^2\, |x-y|^2\, d^{-2}(\mathsf{k})\, \beta_1^{-2},
\end{aligned}$$

где q_i — то же, что в п.4.8. Далее, действуя совершенно так же, как пп.4.8, 4.9, мы получаем оценки (4.23), (4.24), которые вместе с (4.28) при большом R дают утверждение Леммы 4.2.

п.4.12. Пусть функции $u_0(t)$, $v_0(t)$ те же, что в п.3.1, $æ_1(t) = u_0(t)$, $æ_2(t) = v_0(t)$, $R > 0$ — произвольное число, $s \in \mathsf{n}$, $\tau = |r|\, R^{-1}$, $\tau_z = \Big(d^2(\bar{s}) + |z|^2\Big)^{1/2} R^{-1}$, $z = x, y$

$$L_{s0}(x,y) = (2\pi)^{-2} m^2\, |x-y|^{-2} K_2(m\,|x-y|) \sum_{i=1}^{2} \Big(æ_i(\tau_x) - æ_i(\tau_y)\Big)^2$$

и для $\forall\psi(z) \in \mathcal{L}^2(R^{3n})$

$$\Phi_{s0}[\psi] = \int\limits_{R^{3n-3}(\bar{s})} \iint L_{s0}(x,y)\, \psi\Big(r_y(\bar{s})\Big)\, \psi^*\Big(r_x(\bar{s})\Big)\, dx\, dy\, dr(\bar{s}).$$

Лемма 4.3. *По* $\varepsilon_1 > 0$ *можно найти* $R > 0$ *и константу* $c > 0$ *так, что для* $\forall\psi(r)$

$$|\Phi_{s0}[\psi]| \le c\|\psi\, u_0(\tau)\|^2 + \varepsilon_1 \|\psi\, v_0(\tau)\, |r|^{-1}\|^2. \qquad (4.29)$$

Замечание. Поскольку

$$\Big(T_s\, \psi\, u_0(\tau), \psi\, u_0(\tau)\Big) + \Big(T_s\, \psi\, v_0(\tau), \psi\, v_0(\tau)\Big) = (T_s\psi, \psi) + \Phi_{s,0}[\psi],$$

то Лемма 4.3 дает оценку локализационной ошибки при локализации функциями $u_0(\tau)$, $v_0(\tau)$.

п.4.13. Доказательство. Для произвольной функции $\psi(r) \in \mathcal{L}^2(R^{3n})$ и области $D \subseteq R^6$ вводим те же обозначения $J(r(\overline{s}), D)$, $\Phi(D)$, что и в п.4.6. Далее, полагая $\beta_{10} = 1$, $\beta_{20} = 2$ по $\forall\varepsilon_2 > 0$ укажем число $\beta > 0$, $\beta < 0{,}25$ так, что

$$|u_0'(t)| \le \varepsilon_2, \quad |v_0'(t)| \le \varepsilon_2 \ \text{ при } \ |t - \beta_{\alpha_0}| \le \beta, \quad \alpha = 1, 2.$$

Определим интервалы δ_α $\alpha = 1, 2, 3$ и области G_α $\alpha = 1, 2$, G, E_{xi}, E_{yi}, $i = 1, 2, 3, 4$, E_x, E_y, Ω так же, как в п.4.6, п.4.7, но полагая там $t_{kz} = \tau_z$, $\beta_{1j} = \beta_{10}$, $\beta_{2j} = \beta_{20}$. Тогда, как и в п.4.6

$$J\Big(r(\overline{s})\Big) = J\Big(r(\overline{s});\, G\Big).$$

Для оценки $J(r(\overline{s});\, G)$ достаточно оценить $L_{s0}(x, y)$. Действуя так же, как в п.4.7, мы получаем неравенство

$$|L_{s0}(x, y)| \le cq\, |K_2(m\, |x - y|)|\, R^{-2}, \quad (x, y) \in G, \qquad (4.30)$$

где $q = \max\limits_{i,t} |æ_i'(t)|$, $\tau_x \le t \le \tau_y$, $(x, y) \in G$.

Пусть далее $(x, y) \in E_x$, т.е. $(x, y) \in E_{xi}$ для какого-то i. Оценим снизу величину $|x - y|$, считая $d(\overline{s}) \le \gamma_{2i} R$ (при $d(\overline{s}) > \gamma_{2i} R$ $E_{xi} = \emptyset$). Имеем

$$\begin{aligned} |x - y| \ &\ge \ |x| - |y| \ge \sqrt{\gamma_{1i}^2 R^2 - d^2(\overline{s})} - \sqrt{\gamma_{2i} R^2 - d^2(\overline{s})} \ge \\ &\ge \ \frac{\gamma_{1i}^2 - \gamma_{2i}^2}{2\gamma_{1i}}\, |R| \ge \frac{(\gamma_{1i}^2 - \gamma_{2i}^2)}{2\gamma_{1i}}\, \frac{d(\overline{s})}{\gamma_{2i}} \end{aligned}$$

и

$$|x-y| \geq |x|\,\frac{\gamma_{1i}^2-\gamma_{2i}^2}{2\gamma_{1i}^2} \geq |y|\,\frac{\gamma_{1i}^2-\gamma_{2i}^2}{2\gamma_{1i}^2}$$

(в E_x $|x| \geq |y|$).

Беря здесь минимум по i, получим аналогично (4.12)

$$|x-y| \geq \beta_0 R \geq \frac{\beta_0}{2}\,d(\overline{s}), \quad |x-y| \geq \beta_0|x| \geq \beta_0|y|, \tag{4.31}$$

где $\beta_0 = \beta\,\beta_{20}^{-1}\,8^{-1}$.

Следовательно, при $(x,y) \in E_x$

$$|x-y| \geq \frac{\beta_0}{2}\,|r_x(\overline{s})| \geq \frac{\beta_0}{2}\,|r_y(\overline{s})|. \tag{4.32}$$

В силу (4.31) при большом R для функции $K_2(m\,|x-y|)$ в (4.30) применима оценка (4.8). Используя её и неравенство (4.32), получаем

$$|L_{s0}(x,y)| \leq cR^{-5/2}\,e^{-a_2\,|r_x(\overline{s})|-a_2\,|r_y(\overline{s})|},$$

где c, a_2 — константы, не зависящие от R, $d(\overline{s})$, x, y. Поэтому

$$|J(r(\overline{s});\,E_x)| \leq \left(\iint\limits_{E_x} \left|\psi\left(r_y(\overline{s})\right)\right|^2 e^{-a_2\,|r_y(\overline{s})|}\,e^{-a_2|x|}dx\,dy\right)^{1/2} \times$$

$$\times \left(\iint\limits_{E_x} \left|\psi\left(r_x(\overline{s})\right)\right|^2 e^{-a_2\,|r_x(\overline{s})|}\,e^{-a_2|y|}dx\,dy\right)^{1/2} cR^{-5/2} \leq$$

$$\leq c_1 \int\limits_{R_x^3} \left|\psi\left(r_x(\overline{s})\right)\right|^2 e^{-a_2\,|r_x(s)|}\,dx\,R^{-5/2}$$

и, значит,

$$|\Phi(E_x)| \leq \frac{c_1}{R^{5/2}} \int\limits_{R^{3n}} |\psi(r)|^2\,e^{-a_2|r|}\,dr$$

(здесь переменная интегрирования x заменена на r_s). Для величины $\Phi(E_y)$ мы получаем такую же оценку. Следовательно,

$$\begin{aligned} |\Phi(E)| &\leq 2c_1 R^{-5/2} \left\| \psi\, e^{-c_0\,|r|} \right\|^2 = \\ &= \frac{2c_1}{R^{5/2}} \left(\left\| \psi_{00}\, e^{-c_0\,|r|} \right\|^2 + \left\| \psi_0\, e^{-c_0\,|r|} \right\|^2 \right), \end{aligned} \tag{4.33}$$

где $\psi_{00} = \psi\, u_0(\tau)$, $\psi_0 = \psi\, v_0(\tau)$.

Для оценки в областях Ω_i заметим, что при $(x,y) \in \Omega_i$ в (4.30) $q = q_i = \max\limits_{t\in\delta_{i,\ell}} |æ'_\ell(t)|$ и в силу (4.30)

$$J(r(s),\Omega_i) \leq cq_i^2 R^{-2}\, K[r(\overline{s});\, \Omega_i],$$

где функционал $K[r(\overline{s});\, \Omega_i]$ определен так же, как в (4.18), но с τ_z вместо t_{k_z}, $z = x, y$. Далее, аналогично (4.21), получаем

$$|\Phi(\Omega_i)| \leq cq_i^2 R^{-2}\, \|\psi\, \chi_i(\tau)\|^2 \quad i = 1,2,3. \tag{4.34}$$

Так как $\xi = \min\limits_{t\in\delta_3} u_0(\tau) > 0$, то

$$|\Phi(\Omega_3)| \leq c_1\, \|\psi\, u_0(\tau)\|^2 = c_1\, \|\psi_{00}\|^2. \tag{4.35}$$

Подставляя в (4.34) оценку

$$\chi_i(\tau) \leq \chi_i(\tau)(\beta_2 + \beta)^2\, |r|^{-2}\, R^2 \quad i = 1,2$$

и учитывая, что при $i = 1,2$ выполняется $q_i \leq \varepsilon_2$, получаем

$$\begin{aligned} |\Phi(\Omega_i)| &\leq \varepsilon_2 c R^{-2} \int\limits_{R^{3n}} |\psi(r)|^2\, \chi_i(\tau)\left(u_0^2(\tau) + v_0^2(\tau)\right) d\tau \leq \\ &\leq \varepsilon_2 c \int\limits_{R^{3n}} \left(|\psi_{00}|^2 + |\psi_0|^2 (\beta_2 + \beta)^2 R^2 |r|^{-2} \right) dr\, R^{-2} \leq \\ &\leq c_1 \int\limits_{R^{3n}} |\psi_{00}|^2 dr + \varepsilon_2 c_2 \int\limits_{R^{3n}} |\psi_0|^2\, |r^{-2}|\, dr, \quad i = 1,2. \end{aligned} \tag{4.36}$$

В силу п.4.13 $\Phi_s[\psi] = \Phi(G)$ и так как $G \subset E_x \cup E_y \cup \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup$ $\cup \Omega_3$, то утверждение Леммы следует из (4.33), (4.35), (4.36) при большом R.

Литература

1. Lieb E., Yau H.-T. The Stability and Instability of relativistic Matter // CMP. 1988. V. 118. P. 177–213.

2. Lewis R. T., Siedentop H., Vugalter S. The essential spectrum of relativistic multi-particle operators // Ann. Inst. Henri Poincare, Ph. Th. 1997. V. 67. N 1. P. 1–28.

3. Вугальтер С. А., Жислин Г. М. Дискретный спектр многочастичных псевдорелятивистских гамильтонианов // Функц. анализ и прил. 1998. Т. 32. N 2. С. 83–86.

4. Жислин Г. М., Вугальтер С. А. Спектральные свойства псевдорелятивистской системы двух частиц с конечными массами // ТМФ. 1999. Т. 121. N 2. С. 297–306.

5. Вугальтер С. А., Жислин Г. М. Об асимптотике дискретного спектра заданной симметрии многочастичных гамильтонианов // Тр. ММО. 1991. N 54. С. 187–213.

6. Антонец М. А., Жислин Г. М., Шерешевский И. А. О дискретном спектре многочастичных гамильтонианов / Приложение к книге: К. Йоргенс, И. Вайдманн. Спектральные свойства гамильтоновых операторов. — М.: Мир, 1976.

7. Carmona R., Masters W. C., Simon B. Relativistic Schrodinger operators: asymptotic behavior of the eigenfunctions // J. Func. Anal. 1990. V. 91. N 1. P. 117–142.

8. Жислин Г. М. Об узлах собственных функций оператора Шредингера // УМН. 1961. Т. 14. N 1. С. 149–152.

9. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 2. СМБ. — М.: Наука, 1974.