Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. М. Жислин, С. А. Вугальтер, О дискретном спектре гамильтонианов псевдорелятивистских электронов, *Изв. РАН. Сер. матем.*, 2002, том 66, выпуск 1, 71–102

DOI: <https://doi.org/10.4213/im372>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.73.92

26 апреля 2023 г., 10:29:10

УДК 517.9

Г. М. Жислин, С. А. Вугальтер

О дискретном спектре гамильтонианов псевдорелятивистских электронов

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.

Библиография: 9 наименований.

Введение

Целью настоящей 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 нерелятивистских 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 найден лишь существенный спектр в достаточно общей ситуации [2]. Дискретный же спектр изучен 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 работы [3].

Главным результатом работы является получение двусторонних оценок спектральной асимптотики гамильтониана 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

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

к изученной ранее [4] одночастичной задаче 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 ПР случае существенно использовалась суммируемость с весом собственных функций дискретного спектра $(n - 1)$ -частичной ПР 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).

Формулировки 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 из результатов работы [4], а также теоремы 1.3 из теоремы 1.2 и из результатов работы [4]. Доказательство теоремы 1.1 дано в § 2, но ряд важных оценок вынесен в § 3. Необходимые локализационные оценки устанавливаются в § 4.

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

1.1. Рассмотрим систему D_1 , состоящую из 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-образ функции $\sqrt{p_j^2 + m^2}$, $f(z) \in \mathcal{L}^2$, $z \in \mathbb{R}^3$. Чтобы описать действие оператора T'_j на функции $\psi(r)$, $r = (r_1, \dots, r_n)$, положим $r_z(\bar{j}) = (r_1, \dots, r_{j-1}, z, r_{j+1}, \dots, r_n)$. Тогда

$$T'_j \psi(r) = \int T_j^0(r_j - z) \psi(r_z(\bar{j})) dz.$$

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

$$H = H_n = T + V. \quad (1.1)$$

Будем предполагать, что заряды ядер e_s удовлетворяют неравенству

$$e_s < -2/\pi e, \quad s = 1, 2, \dots, n_0, \quad (1.2)$$

которое обеспечивает полуограниченность оператора H снизу [1]. В выбранной системе единиц величина $e^2 = 137^{-1}$ – постоянная тонкой структуры. Поскольку заряд s -го ядра есть $e_s = -Z_s e$, 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 $C_0^\infty(\mathbb{R}^{3n})$ и расширим по Фридрихсу до самосопряженного, сохраняя прежнее обозначение. Наша цель – исследовать дискретный спектр оператора H .

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

$$I_j = \sum_{s=1}^{n_0} e_s e |A_s - r_j|^{-1} + \sum_{m=1; m \neq j}^n e^2 |r_{mj}|^{-1}, \quad V(\bar{j}) = V - I_j,$$

$$T(\bar{j}) = T - T_j, \quad H(\bar{j}) = T(\bar{j}) + V(\bar{j}).$$

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 $\sigma_{\text{ess}}(H)$ оператора H совпадает с полуосью $[\mu, +\infty)$. Если μ – 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 настоящей работе будет играть условие

$$Q_{n-1} < 0. \quad (1.3)$$

Чтобы оно выполнялось, достаточно рассматривать только нейтральные ($S_n = 0$) или положительно заряженные ($S_n > 0$) системы, так как при любом m , $1 \leq m \leq n$, $S_{n-m} = S_n - me \geq -me > 0$, 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 $\mathbb{R}_j^3 = \{r_j\}$ одночастичные ПР операторы

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

которые будем рассматривать на гладких функциях $f(r_j)$ с носителями в области $|r_j| \geq R$ и 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 .

1.3. Основным результатом настоящей 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 любом λ , $0 < \lambda \leq \lambda_0$,

$$dnN(-\lambda; h_j^+(\varepsilon, R)) \leq N(\mu - \lambda; H) \leq C + dnN(-\lambda; h_j^-(\varepsilon, R)). \quad (1.5)$$

Используя известные спектральные свойства операторов (1.4) из [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

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

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 из результатов работы [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 $Q_{n-1} \leq 0$ обеспечивается следующим простым утверждением.

ТЕОРЕМА 1.3. Пусть $n \geq 2$ фиксировано и $Q_{n-1} \leq 0$. Тогда

$$\mu_k \in \sigma_d(H_k), \quad k = 1, 2, \dots, n-1. \quad (1.7)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Теорема элементарно следует из теоремы 1.2 и из результатов работы [4]. Действительно, так как $Q_1 < 0$, 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 $Q_k < 0$, $k = 1, 2, \dots, n-2$ (см. п. 1.2), вследствие теоремы 1.2 при $n = k+1$ имеем $\mu_{k+1} \equiv \inf H_{k+1} \in \sigma_d(H_{k+1})$. Полагая последовательно $k = 1, 2, \dots, n-2$, получаем утверждение теоремы 1.3.

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

1.4. Сделаем некоторые замечания.

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

ЗАМЕЧАНИЕ 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 $\mathcal{L}^2$ функций $\varphi \in U_\mu(\bar{j})$ с весом $(\sum_{s=1, s \neq j}^n |r_s|^2)^{1/2}$ (последнее известно только при $n = 2$ [7]).

ЗАМЕЧАНИЕ 1.3. Если сравнить полученную в теореме 1.2 асимптотику дискретного спектра ПР системы с аналогичным результатом для НР системы (см. [5, оценки (2.4), (2.5)]), то мы увидим следующие отличия:

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

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

Причиной отличия а) является отсутствие в псевдорелятивистском случае теорем о невырожденности 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 б) 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).

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]) непустоту 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 для $\forall \varepsilon > 0 \exists R > 0$ такое, 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 $\sigma_d(H_1) \neq \emptyset$.

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 $V_0(r_1), V_1(r_1) \in \mathcal{L}_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^3)$, 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

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \sum_{j=1}^n V_0(r_j) + \sum_{i,j=1; i < j}^n V_1(r_{ij}), \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_n = T + \mathcal{V}, \\ J_j &= V_0(r_j) + \sum_{m=1; m \neq j}^n V_1(r_{mj}), \quad \mathcal{V}(\bar{j}) = \mathcal{V} - J_j, \\ \mathcal{H}(\bar{j}) &= T(\bar{j}) + \mathcal{V}(\bar{j}), \quad \nu = \inf \mathcal{H}_{n-1}, \\ \mathfrak{h}_j^\pm(\varepsilon, R) &= T_j + (Q_{n-1} \pm \varepsilon)|r_j|^{-\gamma} \end{aligned} \tag{1.8}$$

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

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

Доказательство проводится точно так же, как доказательство 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 1.2а. Пусть $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$ и либо $\gamma < 2$, $Q_{n-1} < 0$, либо $\gamma = 2$, $Q_{n-1} < -\frac{1}{8m}$. Тогда дискретный спектр $\sigma_d(\mathcal{H}_n)$ бесконечен и

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

где

$$\begin{aligned} g_{\gamma, d}(\lambda) &= \frac{2^{5/2}}{3\pi} m^{3/2} |Q_{n-1}|^{3/\gamma} |\lambda|^{3/2-3/\gamma} B\left(\frac{3}{\gamma} - \frac{3}{2}; \frac{5}{2}\right) \gamma^{-1} dn, \quad \gamma < 2, \\ g_{2, d}(\lambda) &= |\ln 2\lambda| \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell+1) \sqrt{|2Q|m - \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2} dn, \end{aligned} \quad (1.11)$$

$B(\tau_1, \tau_2)$ – бета-функция, $\ell_0 = [\sqrt{2|Q|m} - \frac{1}{2}]$.

ТЕОРЕМА 1.2б. Пусть $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$ и либо $\gamma > 2$, либо $\gamma = 2$, $Q_{n-1} > -\frac{1}{8m}$, 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 1.3а. Пусть $n \geq 2$ фиксировано и либо $\gamma < 2$, $Q_{n-1} < 0$, либо $\gamma = 2$, $Q_{n-1} < -\frac{1}{8m}$. Тогда $\nu \in \sigma_d(\mathcal{H}_{n-1})$.

Теорема 1.3а доказывается 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 $\gamma = 2$, $Q_{n-1} < -\frac{1}{8m}$ выполняются оценки (1.9), (1.10).

§2. Доказательство теоремы 1.1

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

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

$$(H\psi, \psi) > (\mu + \lambda) \|\psi\|^2, \quad \psi \perp M_2(\lambda, \varepsilon), \quad (2.2)$$

и, кроме того, для некоторых констант $C > 0$, $R = R(\varepsilon)$

$$\dim M_1(\lambda, \varepsilon) \geq ndN(\lambda; h_1^+(\varepsilon; R)), \quad (2.3)$$

$$\dim M_2(\lambda, \varepsilon) \leq C + ndN(\lambda; h_1^-(\varepsilon; R)). \quad (2.4)$$

Тогда утверждение теоремы 1.1 будет следовать из (2.1)–(2.4).

2.2. Введем ряд определений. Пусть $\mathbf{k}$ – произвольный набор различных чисел из $\mathbf{n} = (1, 2, \dots, n)$, $|\mathbf{k}|$ – число элементов в $\mathbf{k}$, $r = (r_1, \dots, r_n)$, $r(\mathbf{k}) = \{\tilde{r}_1, \dots, \tilde{r}_n\}$, где $\tilde{r}_i = r_i$, $i \in \mathbf{k}$, $\tilde{r}_i = (0, 0, 0)$, $i \notin \mathbf{k}$, $R(\mathbf{k}) = \{r(\mathbf{k})\}$, $r(\bar{\mathbf{k}}) = \{r'_1, \dots, r'_n\}$, где $r'_i = r_i$, $i \notin \mathbf{k}$, $r'_i = (0, 0, 0)$, $i \in \mathbf{k}$, $R(\bar{\mathbf{k}}) = \{r(\bar{\mathbf{k}})\}$, $d(\mathbf{k}) = |r(\mathbf{k})|$, $d(\bar{\mathbf{k}}) = |r(\bar{\mathbf{k}})|$, $t_{\mathbf{k}} = t_{\mathbf{k}}(r) = \frac{d(\bar{\mathbf{k}})}{d(\mathbf{k})}$. При $|\mathbf{k}| = 1$ мы вместо $\mathbf{k}$ будем писать то единственное число, которое содержится в $\mathbf{k}$, т.е. $t_{\mathbf{k}} = t_j = |r(\bar{j})| \cdot |r_j|^{-1}$ при $\mathbf{k} = \langle j \rangle$. Для любого $z \in \mathbb{R}^3$ и $j, s \in \mathbf{n}$ полагаем

$$\begin{aligned} r_z(\bar{j}) &= \{\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_n\}, \quad \hat{r}_i = r_i, \quad i \neq j, \quad \hat{r}_j = z, \\ t_{jz} &= \frac{|r(\bar{j})|}{|z|}, \quad t_{jsz} = t_{jz} \quad \text{при } s = j, \\ t_{jsz} &= \frac{(|r(\bar{j}, \bar{s})|^2 + |z|^2)^{1/2}}{|r_j|} \quad \text{при } s \neq j. \end{aligned}$$

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 $j \in \mathbf{n}$ будем обозначать через $\varphi_i(r(\bar{j}))$, $i = 1, 2, \dots, d$, ортонормированный базис в собственном подпространстве $U_\mu(\bar{j})$ (см. п. 1.2.) и через $f_s^\pm(r_j) = f_s^\pm(\varepsilon; R; r_j)$, $s = 1, 2, \dots, s_\lambda^\pm$, – ортонормированные собственные функции операторов $h_j^\pm(\varepsilon, R)$ (см. п. 1.4), образующие базисы в пространствах $E_\lambda^\pm(j) \mathbb{R}_j^3$, где $E_j^\pm(j)$ – спектральные проекторы операторов $h_j^\pm(r, R)$, $\lambda < 0$ и, очевидно, $s_\lambda^\pm = N(\lambda; h_j^\pm(\varepsilon, R))$.

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

$$M_1(\lambda; \varepsilon) = \mathcal{L}(\varphi_i(r(\bar{j}))f_s^+(r_j)u_{1j}, i = 1, 2, \dots, d, s = 1, 2, \dots, s_\lambda^+, j = 1, 2, \dots, n), \quad (2.5)$$

где $\mathcal{L}(\dots)$ 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 $|r_j| \leq R$.

Пусть $\psi \in M_1(\lambda, \varepsilon)$. Очевидно,

$$\psi(r) = \sum_{j=1}^n \psi_j u_{1j},$$

где

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

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

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

Так как $u_1(t_j)u_1(t_m) = 0$ при $j \neq m$, то при $j \neq m$ и $(V\psi_j u_{1j}, \psi_m u_{1m}) = 0$, но в общем случае члены $(T\psi_j u_{1j}, \psi_m u_{1m})$ не равны нулю вследствие нелокальности оператора T . Для их оценки воспользуемся леммой 4.1 (см. п. 4.1) с $\omega_\ell = \psi_\ell u_{1\ell}$, $\ell = i, j$. В силу этой леммы для $\forall \varepsilon_1 > 0 \exists R > 0$ такое, что

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

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

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

2.4. Пусть $j \in \mathfrak{n}$ фиксировано. Для $j, s \in \mathfrak{n}$ положим $\varkappa_1(r_z(\bar{s})) = u_1(t_{jsz})$, $\varkappa_2(r_z(\bar{s})) = v_1(t_{jsz})$, $z = x, y \in \mathbb{R}^3$ (см. п. 2.2). Для дальнейших оценок используем следующее равенство, справедливое для $\forall g(r) \in D_H$:

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

где

$$\Phi_{sj}[g] = \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} \iint L(x, y; r(\bar{s}); j) g(r_y(\bar{s})) g^*(r_x(\bar{s})) dx dy dr(\bar{s}), \quad (2.9)$$

$$L(x, y; r(\bar{s}); j) = (2\pi)^{-2} m^2 |x - y|^{-2} K_2(m|x - y|) \sum_{i=1}^2 (\varkappa_i(r_x(\bar{s})) - \varkappa_i(r_y(\bar{s})))^2,$$

K_2 — функция Макдональда.

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

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

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

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

то

$$\begin{aligned} L[\psi_j u_{1j}] &\leq \mu(\|\psi_j\|^2 - \|\psi_j v_{1j}\|^2) + (T_j\psi_j, \psi_j) - (T_j\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j}) \\ &\quad + \sum_{s=1}^n \Phi_{sj}[\psi_j] + (I_j\psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.5. Для оценки членов, содержащих I_j , заметим, что в силу леммы 3.1 при любом $p = 1, 2, \dots, n_0$ и $\ell \neq j$, $\ell = 0, 1, \dots, n$, для $\forall \varepsilon_1 > 0 \exists R$ такое, что

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

где $r_0 = (0, 0, 0)$. Поэтому

$$\begin{aligned} (I_j \psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j}) &\leq Q(\psi_j u_{1j}, \psi_j u_{1j} |r_j|^{-1}) + \varepsilon_1 c_1 \sum_{i=1}^d (F_{ij}, F_{ij} |r_j|^{-1}) \\ &= (Q + \varepsilon_1 c_1) \sum_{i=1}^d (F_{ij}, F_{ij} |r_j|^{-1}) - Q(\psi_j v_{1j}, \psi_j v_{1j} |r_j|^{-1}). \end{aligned} \quad (2.12)$$

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

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

$$\int_{\Omega(r_j)} |\varphi_i(r(\bar{j}))|^2 dr(\bar{j}) \rightarrow 0 \quad \text{при } R \rightarrow \infty.$$

Учитывая это, легко получаем, что при больших R

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

Наконец, в силу следствия леммы 4.2 при большом R

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

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

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

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. Тогда, поскольку F_{ij} есть линейная комбинация ортонормированных собственных функций оператора $h_j^+(\varepsilon, R)$, отвечающих его собственным значениям, не превосходящим λ , мы имеем

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

Так как $\lambda < 0$ и

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

то

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

и в силу (2.7)

$$L[\psi] \leq (\mu + \lambda) \|\psi\|^2. \quad (2.17)$$

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

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

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

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

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

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

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

т.е. $\psi_j u_{1j} \equiv 0$ с $\psi_j = \sum_{i=1}^d \varphi_i(r(\bar{j})) F_{ij}$, $F_{ij} = \sum_{s=1}^{s_\lambda^+} c_{is,j} f_s^+(r_j)$, 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 $c_{is,j}$ равны нулю, т.е. функции $\varphi_i f_s^+ u_{1j}$ линейно независимы. Поэтому $\dim M_1(\lambda; \varepsilon) = nds_\lambda^+ = ndN(\lambda; h_j^+(\varepsilon, R))$ и неравенство (2.3) доказано.

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

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

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

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 $L(x, y, r(\bar{s}), j)$ положить $j = 0$, $\varkappa_1(r_z(\bar{s})) = u(\tau_{sz})$, $\varkappa_2(r_z(\bar{s})) = v(\tau_{sz})$. В силу леммы 4.3 (см. ниже) по $\varepsilon_1 > 0$ можно найти $R_0 > 0$, константу $c_3 > 0$ и функции $u(t), v(t)$ такие, что для всех ψ

$$|\Phi_{s0}[\psi]| \leq c_3 \|\psi_{00}\|^2 + \varepsilon_1 \|\psi_0 |r|^{-1}\|^2.$$

Отсюда и из равенства (2.18) следует, что

$$(H\psi, \psi) \geq L_1[\psi_{00}] + L_2[\psi_0], \quad (2.19)$$

где

$$L_1[\psi_{0,0}] = (H\psi_{00}, \psi_{00}) - c_4 \|\psi_{00}\|^2, \quad (2.19a)$$

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

Оценка снизу функционала $L_1[\psi_{00}]$ дана в п. 2.8, функционала $L_2[\psi_0]$ – в пп. 2.9–2.12.

2.8. Пусть $\omega \equiv \psi_{00}$. 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 $c_5 > 0$

$$L_1[\omega] \geq -c_5 \|\omega\|^2 + \delta_0 (\widehat{T}(p)\widehat{\omega}(p), \widehat{\omega}(p)), \quad (2.20)$$

где $\widehat{T}(p) = \sum_{j=1}^n \widehat{T}_j$ и $\widehat{\omega}(p)$ – 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

$$K(R_0) = \{r \mid r = (r_1, \dots, r_n), \quad r_j = (x_j, y_j, z_j), \\ |x_j| \leq 2R_0, \quad |y_j| \leq 2R_0, \quad |z_j| \leq 2R_0, \quad j = 1, \dots, n\}$$

с нулевыми граничными условиями на границе $K(R_0)$. Обобщая лемму п. 2.8 из [4], можно выбрать число N столь большим, что при $\omega \perp M'_1(N)$

$$\|\widehat{\omega}\|_{|p| \geq N}^2 \geq 0.5 \|\widehat{\omega}\|^2 = 0.5 \|\omega\|^2$$

и, следовательно,

$$(T(p)\widehat{\omega}, \widehat{\omega}) \geq (T(p)\widehat{\omega}, \widehat{\omega})_{|p| \geq N} \geq 0.5b(N) \|\omega\|^2,$$

где $b(N) = \min_{|p| \geq N} \widehat{T}(p) \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$. Поэтому и в силу (2.20) при большом N

$$L_1[\omega] \geq 0, \quad \text{если } \omega \perp M'_1(N).$$

Отсюда и из (2.19) следует, что при $\psi_{00} \perp M'_1(N)$ выполняется

$$(H\psi, \psi) \geq L_2[\psi_0]. \quad (2.21)$$

2.9. Оценим снизу функционал $L_2[\psi_0]$. Именно здесь преодолеваются основные трудности доказательства теоремы 1.1. Общая идея этой части работы состоит в разбиении пространства $\mathbb{R}^{3n}$ на области, отвечающие различным распадам 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 $R_0 = R_0(\varepsilon_1)$:

$$L_2[\psi_0] \geq \sum_{j=1}^n \{ (H\psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j}) - \varepsilon_1 \|\psi_0 u_{1j} |r_j|^{-1}\|^2 \} + \mu \left(\|\psi_0\|^2 - \sum_{j=1}^n \|\psi_0 u_{1j}\|^2 \right). \quad (2.22)$$

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.

2.10. Пусть $\hat{v}_1 = \prod_{j=1}^n v_{1j}$. Ясно, что $\hat{v}_1^2 + \sum_{j=1}^n u_{1j}^2 = 1$ 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 $\Omega = \text{supp } \psi_0 \hat{v}_1$. 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 $|r_{i_1}| \geq |r_{i_2}| \geq \dots \geq |r_{i_n}|$, $i_m \neq i_k$, $m \neq k$, $i_s \in n$. Тогда поскольку $|r|^2 \geq R_0^2$, то $n|r_{i_1}|^2 \geq R_0^2$. Так как $r \in \text{supp } v_{1i_1}$, 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,

$$|r_{i_1}| \geq R_0 |n|^{-1/2}, \quad |r_{i_2}| \geq \sqrt{\beta_{11}^2 n^{-1} (n-1)^{-1} R_0^2}.$$

Следовательно, рассматриваемая точка r отвечает “уходу” от ядер, по крайней мере, электронов с номерами i_1, i_2 . Поэтому¹ в точке $r \in \Omega$

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

где $\varepsilon(R_0) \rightarrow 0$ при $R_0 \rightarrow \infty$. Поскольку $\mu_{n-1} \in \sigma_d(H(\bar{i}_1))$, то согласно ХВЖ-теореме для ПР систем [2], примененной к оператору $H(\bar{i})$, имеем $\mu_{n-2} = \inf H[\bar{i}_1, \bar{i}_2] > \mu_{n-1}$. 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 подобластей. Величина функционала $G[\psi_0]$ оценивается членами вида $\varepsilon_1 \sum_{j=1}^n \|\psi_0 u_{1j} |r_j|^{-1}\|^2 + \varepsilon_2 \|\psi_0 \hat{v}_1\|^2$. Подставляя эти оценки в (2.23) и затем (2.23) в (2.19b), получим (2.22).

¹ Операторы $V[\bar{i}_1, \bar{i}_2]$ здесь и $H[\bar{i}_1, \bar{i}_2]$ далее определены в п. 3.5.

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

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

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 , $R(\bar{j}) = \{r_1, \dots, r_{j-1}, r_{j+1}, \dots, r_n\}$. При $r \in \text{supp } \tilde{\psi}$, очевидно, $|r(\bar{j})| \leq \beta_{21}|r_j|$, $|r| \geq R_0$. Поэтому $|r_j| \geq R_0(1 + \beta_{21}^2)^{-1/2}$ при $r \in \text{supp } \tilde{\psi}$ и, значит,

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

Таким образом, функция $\tilde{\psi}(r)$ отвечает “уходу” j -го электрона от ядер (и от других электронов, но последнее для нас несущественно, 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

$$\begin{aligned} (H(\bar{j})\varphi_i F_{ji}, \varphi_{i_1} F_{ji_1}) &= \mu(\varphi_i, \varphi_{i_1})_{R(\bar{j})} (F_{ji}, F_{ji_1})_{R_j} = \mu \delta_{ii_1} \|F_{ji}\|^2, \\ (H(\bar{j})\varphi_i F_{ji}, g_j) &= (H(\bar{j})g_j, \varphi_i F_{ji}) = 0, \quad (H(\bar{j})g_j, g_j) \geq \mu^0 \|g_j\|^2, \\ (T_j \varphi_i F_{ji}, \varphi_{i_1} F_{ji_1}) &= \delta_{ii_1} (T_j F_{ji}, F_{ji}), \\ (T_j \varphi_i F_{ji}, g_j) &= (T_j F_{ji} \varphi_i, g_j) = 0. \end{aligned}$$

Поэтому

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

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

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

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

где $Q = Q_{n-1}$ (см. п. 1.2).

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

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

Пусть $\tilde{\chi}(\tau)$ – характеристическая функция области $\text{supp } \tilde{\psi}$. Применяя неравенство Буняковского и лемму 3.1 (см. ниже), для любого $\varepsilon_1 > 0$ укажем число $R_0 > 0$ такое, что

$$\begin{aligned} |((|r_{kj}|^{-1} - |r_j|^{-1})\varphi_i F_{ji}, \varphi_s F_{jt} \tilde{\chi})| &\leq \varepsilon_1 (F_{ji}, F_{ji}|r_j|^{-1}) + \varepsilon_1 (F_{jt}, F_{jt}|r_j|^{-1}), \\ |((|r_{kj}|^{-1} - |r_j|^{-1})\varphi_i F_{ji}, g_j \tilde{\chi})| &\leq \varepsilon_1 \|g_j\|^2 + \varepsilon_1 (F_{ji}, F_{ji}|r_j|^{-1}). \end{aligned}$$

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

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

Используя эти оценки и учитывая, что

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

имеем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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)

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

и

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

Теорема доказана полностью.

§ 3. Доказательство теоремы 1.1 (окончание)

3.1. В настоящем параграфе мы выводим неравенство (2.22), лежащее 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 $\beta_{1i} < \beta_{2i} \ll 1$, $i = 1, \dots, n-1$, и $R_0 > 0$ – некоторые числа, $\beta_{10} = 1$, $\beta_{20} = 2$, функции $u_i(t)$ и $v_i(t)$ определены равенствами: $u_i(t) \equiv 1$ при $0 \leq t \leq \beta_{1i}$, $u_i(t) = 0$ при $t \geq \beta_{2i}$, $0 < u_i(t) < 1$ при $t \in (\beta_{1i}, \beta_{2i})$, $v_i(t) = (1 - u_i^2(t))^{1/2}$, $u_i(t), v_i(t) \in C^1(0, \infty)$, $i = 0, 1, \dots, n-1$. Через k будем обозначать произвольное подмножество из $n = (1, 2, \dots, n)$ или число 0, через $|k|$ – число элементов в k при $k \neq (0)$; при $k = (0)$ полагаем $|k| = 0$. Пусть $t_0 = \frac{|r|}{R_0}$, $t_k = \frac{|r(\bar{k})|}{|r(k)|}$ при $k \neq (0)$, $u_{ik} = u_i(t_k)$, $v_{ik} = v_i(t_k)$, $\hat{v}_i = \prod_{k, |k|=i} v_{ik}$; здесь и далее в функциях u_{mk}, v_{mk} считаем $|k| = m$, если не оговорено иное. Покажем, что числа $\beta_{1,i+1}, \beta_{2,i+1}$ можно выбрать так, что для любых k', k'' при $|k'| = |k''| = i+1$, $k' \neq k''$, выполняется

$$\hat{v}_i v_{i+1,k'} u_{i+1,k''} = \hat{v}_i u_{i+1,k''}. \quad (3.1)$$

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

$$|r(\bar{k}')| \geq \beta_{2,i+1} |r(k')|. \quad (3.2)$$

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

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

откуда

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\omega_\alpha = g \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{i+1, \mathbf{k}_\ell}, \quad \alpha = 0, 1, \dots, m-1.$$

Тогда, учитывая, что в силу (3.1)

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

и действуя аналогично п. 2.4, получим

$$(T_s \omega_\alpha, \omega_\alpha) = (T_s g u_{i+1, \mathbf{k}_{\alpha+1}}, g u_{i+1, \mathbf{k}_{\alpha+1}}) + (T_s \omega_{\alpha+1}, \omega_{\alpha+1}) + \Phi_{s\mathbf{k}_{\alpha+1}}[\omega_\alpha], \quad (3.6)$$

$$\alpha = 0, 1, \dots, m-1,$$

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

$$\begin{aligned} \varkappa_1(r_z(\bar{s})) &= u_{i+1}(t_{\mathbf{k}sz}), & \varkappa_2(r_z(\bar{s})) &= v_{i+1}(t_{\mathbf{k}sz}), \\ t_{\mathbf{k}sz} &= |r(\bar{\mathbf{k}})|(|r(\mathbf{k} \setminus s)|^2 + |z|^2)^{-1/2} & \text{при } s \in \mathbf{k}, \\ t_{\mathbf{k}sz} &= (|r(\overline{\mathbf{k} \cup s})|^2 + |z|^2)^{1/2} |r(\mathbf{k})|^{-1} & \text{при } s \notin \mathbf{k}. \end{aligned}$$

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

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

откуда после суммирования по s получаем

$$(Tg, g) = \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}|=i+1} (Tg u_{i+1, \mathbf{k}}, g u_{i+1, \mathbf{k}}) + (Tg \hat{v}_{i+1}, g \hat{v}_{i+1}) + \sum_{\alpha=0}^{m-1} \Phi_{\mathbf{k}_{\alpha+1}}[\omega_\alpha], \quad (3.7)$$

где

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

Кроме того, для функции g , очевидно,

$$|g|^2 = \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}|=i+1} |g u_{i+1, \mathbf{k}}|^2 + |g \hat{v}_{i+1}|^2. \quad (3.8)$$

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 $|\mathbf{k}| = i + 1 = 1$, то $m = n$ и можно считать $\mathbf{k}_\ell = (\ell)$, $\ell = 1, 2, \dots, n$. Тогда в силу (3.7)

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

Используя лемму 4.2 (см. ниже) с $\psi = \psi_0 \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{1\ell}$, $\mathbf{k} = (\alpha + 1)$ и равенство (3.8), получим, что для $\forall \varepsilon_2 > 0 \exists R_1(\varepsilon_2)$ такое, что при $R_0 > R_1(\varepsilon_2)$

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

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

$$\left| \Phi_{\mathbf{k}_{\alpha+1}} \left[\psi_i \prod_{\ell=0}^{\alpha} v_{i+1, \mathbf{k}_\ell} \right] \right| \leq \varepsilon_2 n \int |\psi_i|^2 |r|^{-2} dr + c_2 \int |\psi_i|^2 |r|^{-2} dr \leq 2\varepsilon_2 \int |\psi_1|^2 dr. \quad (3.10)$$

3.4. Положим в (3.7) и (3.8) $g = \psi_i = \psi \hat{v}_0 \dots \hat{v}_i$ 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

$$\begin{aligned} (T\psi_0, \psi_0) &\geq \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}|=i+1} (T\psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}, \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}) \\ &\quad - \varepsilon_2 c_3 \sum_{\ell=1}^n \int |\psi_0 u_{1\ell}|^2 |r|^{-2} dr - \varepsilon_2 c_4 \int |\psi_1|^2 dr. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Суммирование соотношений (3.8) приводит к равенству

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

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

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

то из (3.12) следует, что

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

В силу (3.12)

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

Далее сложим почленно (3.11) и (3.14), выделим в правой части полученного неравенства слагаемые, содержащие функции $\psi_0 u_{1\mathbf{k}}$ при $|\mathbf{k}| = 1$, и заменим в $\|\psi_1\|^2$ функцию $|\psi_1|^2$ по формуле (3.13b). Тогда получим

$$\begin{aligned} (H\psi_0, \psi_0) &\geq \sum_{j=1}^n ((H - \varepsilon_2 c_2 |r|^{-2}) \psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j}) \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}|=i+1} ((H - \varepsilon_2 c_4) \psi_i u_{i+1,\mathbf{k}}, \psi_i u_{i+1,\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (3.15)$$

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 $r \in \text{supp } \psi_i u_{i+1,\mathbf{k}}$. Тогда

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

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

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

Так как $|\mathbf{k}'| = i$, то

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

и в силу (3.16)

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

Поэтому

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

и вследствие (3.17)

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

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

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

где $V[\bar{\mathbf{k}}]$ – сумма потенциалов взаимодействия электронов из множества $\mathbf{n} \setminus \mathbf{k}$ между собой и с ядрами. Пусть

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

В силу (3.18)

$$\begin{aligned} ((H - \varepsilon_2 c_4) \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}, \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}) &\geq (H[\bar{\mathbf{k}}] \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}, \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}) - \varepsilon_2 c_5 \|\psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}\|^2 \\ &\geq (\mu[\bar{\mathbf{k}}] - \varepsilon_2 c_5) \|\psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}\|^2 = (\mu_{n-i-1} - \varepsilon_2 c_5) \|\psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}\|^2, \end{aligned}$$

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

$$((H - \varepsilon_2 c_5) \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}, \psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}) \geq (\mu_{n-2} - \varepsilon_2 c_5) \|\psi_i u_{i+1, \mathbf{k}}\|^2. \quad (3.19)$$

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

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

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

$$((H - \varepsilon_1 c_4) \psi_{n-1}, \psi_{n-1}) \geq -\varepsilon_2 c_5 \|\psi_{n-1}\|^2 \geq (\mu_{n-2} - \varepsilon_2 c_5) \|\psi_{n-1}\|^2, \quad (3.20)$$

так как $n \geq 2$ и $\mu_{n-2} \leq 0$. Подставляя (3.19) и (3.20) в (3.15) и учитывая (3.13a,b), получим

$$\begin{aligned} (H \psi_0, \psi_0) &\geq \sum_{j=1}^n ((H - \varepsilon_2 c_4 |r|^{-2}) \psi_0 u_{1j}, \psi_0 u_{1j}) \\ &\quad + (\mu_{n-2} - \varepsilon_2 c_5) \left(\|\psi_0\|^2 - \sum_{j=1}^n \|\psi_0 u_{1j}\|^2 \right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

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

3.6. ЛЕММА 3.1. Пусть $j \in \mathbf{n}$, функции $\varphi(r(\bar{j}))$, $f(r_j)$, $\omega(r)$ 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 $|r(\bar{j})| \geq \beta |r_j|$ для некоторых чисел $\beta < 8^{-1}$, $R > 1$.

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

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

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

Доказательство. Пусть $r \in \text{supp } \psi$. 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

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

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

где $\delta_1(R) \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$ 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 $|(g(r_i, r_j) |r_i| |r_j|^{-1} \psi, \psi)| < \varepsilon(f, f |r_j|^{-1})$.

Пусть $G_1 = \{r \mid r \in \text{supp } \psi, |r_i| \leq |r|^{1/2}\}$, $G_2 = \text{supp } \psi \setminus G_1$. Тогда

$$\begin{aligned} |(\psi, |r_i| |r_j|^{-2} g \psi)_{G_1}| &\leq c_0 (|r_j|^{-3/2} \psi, \psi) \leq \frac{c_0}{\sqrt{R}} (|r_j|^{-1} f, f), \\ |(\psi, |r_i| |r_j|^{-2} g \psi)_{G_2}| &\leq c_0 \beta (|r_j|^{-1} \psi, \psi) \leq c_0 \beta (|r_j|^{-1} f, f \delta_2(r_j)), \end{aligned} \quad (3.24)$$

где

$$c_0 = \sup |g(r_i, r_j)|, \quad \delta_2(r_j) = \int_{|r_i| \geq \sqrt{|r_j|}} |\varphi|^2 \omega^2 dr(\bar{j}) \leq \int_{|r_i| \geq \sqrt{R}} |\varphi|^2 dr(\bar{j}).$$

Складывая неравенства (3.24), получаем

$$|(\psi(r_j), |r_i| |r_j|^{-2} g \psi)| \leq \delta_3(R) (|r_j|^{-1} f, f) \quad (3.25)$$

где $\delta_3(R) \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$, и поэтому (3.22b) следует из (3.25).

§ 4. Локализационные оценки

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 непересекающимися 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 огрубляем их в надежде на то, что в будущем они могут быть востребованы для оценки второго члена в эффективных потенциалах, присутствующих 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

$$\Omega_\ell = \{r \mid |r| \geq R, |r(\bar{\ell})| \leq \beta|r_\ell|\}, \quad \ell = i, j, \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad i \neq j,$$

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

$$\text{Re}(T'_s \omega_i, \omega_j) = 0; \quad (4.1)$$

при $s = i, j$ и для любого $\varepsilon > 0$ укажем $R_0 > 0$ такое, что при $R > R_0$

$$|\text{Re}(T'_s \omega_i, \omega_j)| \leq \varepsilon (\|\omega_i e^{-\gamma_0 |r_i|}\|^2 + \|\omega_j e^{-\gamma_0 |r_j|}\|^2), \quad (4.2)$$

где $\gamma_0 = m/10$.

ЗАМЕЧАНИЕ 4.1. Лемма оценивает перекрестные члены, возникающие при вычислении формы $(T' \sum_{i=1}^n \psi_i, \sum_{j=1}^n \psi_j)$ (см. п. 2.3).

ЗАМЕЧАНИЕ 4.2. 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 $T_s = T'_s - m$.

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

$$4\text{Re}(T'_s f, g) = (T'_s(f+g), f+g) - (T'_s(f-g), f-g). \quad (4.3)$$

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

$$(T'_s \psi, \psi) = \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} \iint |\psi(r_x(\bar{s})) - \psi(r_y(\bar{s}))|^2 F(|x-y|) dx dy dr(\bar{s}), \quad (4.4)$$

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

$$\begin{aligned} \text{Re}(T'_s f, g) &= 2\text{Re} \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} \iint [f(r_x(\bar{s}))g^*(r_x(\bar{s})) - f(r_x(\bar{s}))g^*(r_y(\bar{s}))] \\ &\quad \times F(|x-y|) dx dy dr(\bar{s}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

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

$$\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset. \quad (4.6)$$

Действительно, если $r = (r_1, \dots, r_n) \in \Omega_i \cap \Omega_j$, 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) $f(r_x(\bar{s}))g^*(r_x(\bar{s})) \equiv 0$ при $\forall x, r(\bar{s})$, и поэтому

$$\text{Re}(T'_s f, g) = 2\text{Re} \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} \iint E(r(\bar{s}), x, y) F(|x-y|) dx dy dr(\bar{s}), \quad (4.7)$$

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

Пусть

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

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

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

4.3. Рассмотрим теперь случай $s = i$ (при $s = j$ рассуждаем аналогично). Так как $\text{supp } \omega_m(r_z(\bar{s})) \subseteq \Omega_{msz}$, то при оценке $\text{Re}(T'_s f', g)$ в (4.7) $(3n + 3)$ -кратный интеграл можно 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 $a_1^2 = \sum_{\ell, \ell \neq i, j}^{1, n} |r_\ell|^2$, $a^2 = |r_j|^2$, 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

$$|x - y|^2 \geq 0.5|x|^2 + |y|^2 + \frac{1}{4}|x|^2 - 2|x|\beta a + \frac{1}{4}a^2\beta^{-2} \geq 0.5(|x|^2 + |y|^2 + a^2) \geq \frac{1}{4}R^2$$

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 (см. [9, с. 32])

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

где d_0 – некоторая константа. В силу (4.8) для $\forall \varepsilon_1 > 0 \exists R_0$ такое, что при $R > R_0$

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

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

$$\begin{aligned} |\text{Re}(T'_i \omega_i, \omega_j)| &\leq 2\varepsilon_1 \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{i})} \iint |\omega_i(r_x(\bar{i})) \omega_j(r_y(\bar{i}))| e^{-\gamma(|x| + |y| + |a|)} dx dy dr(\bar{i}) \\ &\leq 2\varepsilon_1 \iint e^{-\gamma|y|} \left(\int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{i})} |\omega_i(r_x(\bar{i}))|^2 dr(\bar{i}) \right)^{1/2} \\ &\quad \times e^{-\gamma|x|/2} \left(\int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{i})} |\omega_j(r_y(\bar{i}))|^2 e^{-2\gamma a} \right)^{1/2} e^{-\gamma|x|/2} dx dy \\ &\leq \varepsilon_1 d_1 \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{i})} |\omega_i(r_x(\bar{i}))|^2 e^{-\gamma|x|} dx dr(\bar{i}) \\ &\quad + \varepsilon_1 d_2 \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{i})} |\omega_j(r_y(\bar{i}))|^2 e^{-2\gamma|r_j|} dy dr(\bar{i}), \end{aligned}$$

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.

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

$$\begin{aligned} \varkappa_1(t_{\mathbf{k}z}) &= u_j(t_{\mathbf{k}z}), \quad \varkappa_2(t_{\mathbf{k}z}) = v_j(t_{\mathbf{k}z}), \\ L_{s\mathbf{k}}(x, y) &= L(x, y, d(\bar{s}), \mathbf{k}) = (2\pi)^{-2} m^2 |x - y|^{-2} K_2(m|x - y|) \\ &\quad \times \sum_{i=1}^2 [\varkappa_i(t_{\mathbf{k}x}) - \varkappa_i(t_{\mathbf{k}y})]^2, \quad x, y \in \mathbb{R}^3, \end{aligned}$$

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

$$\Phi_{s\mathbf{k}}[\psi] = \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} \iint L_{s\mathbf{k}}(x, y) \psi(r_y(\bar{s})) \psi^*(r_x(\bar{s})) dx dy dr(\bar{s}).$$

4.5. ЛЕММА 4.2. Для $\forall \varepsilon_1 > 0 \exists R > 0$ такое, что для $\forall \psi(r)$, $\psi \in C^1$, $\psi(r) \equiv 0$ при $|r| \leq R$, выполняется неравенство

$$|\Phi_{sk}[\psi]| \leq \varepsilon_1 \int |\psi|^2 |r|^{-2} dr + c \int |\psi|^2 |r|^{-2} v_j^2(t_k) \chi_{jk} dr, \quad (4.10)$$

где χ_{jk} – характеристическая функция области $\beta_{1j} \leq t_k \leq \beta_{2j}$ в $\mathbb{R}^{3n}$ и константа c не зависит от ψ , ε и R .

ЗАМЕЧАНИЕ 4.3. Согласно локализационной формуле Либа–Лосса (см. (3.8) из [1])

$$(T_s \psi u_j, \psi u_j) + (T_s \psi v_j, \psi v_j) = (T_s \psi, \psi) + \Phi_{sk}[\psi]. \quad (4.11)$$

Поэтому лемма 4.2 дает оценку ошибки при локализации функциями $u_j(t_k)$, $v_j(t_k)$.

СЛЕДСТВИЕ 4.1. Пусть $j = |k| = 1$, $k = (m)$ и функция $\psi(r)$ имеет вид

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

где $\varphi_i \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3n-3}(\overline{m}))$, $(\varphi_i, \varphi_p) = \delta_{ip}$, $F_i(r_m) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}_m^3)$ – произвольные функции, $F_i(r_m) \equiv 0$ при $|r_m| \leq R$. Тогда для любого $\varepsilon_1 > 0$ можно указать $R > 0$ такое, что

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

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Действительно, поскольку $|r| \geq |r_m|$, то первое слагаемое в правой части (4.10) не превосходит $\varepsilon_1 \sum_{i=1}^d \|F_i |r_m|^{-1}\|^2$. Для второго слагаемого имеем

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

где c^0 – некоторая константа.

Так как $|r(\overline{m})| \geq \beta_{11} |r_m| \geq \beta_{11} R$ при $r \in \text{supp } v_1(t_m) F_i(r_m)$, то при большом R

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

Поэтому

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

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

4.6. Доказательство леммы 4.2. Для произвольной области $D \subseteq \mathbb{R}^6$ положим

$$J(r(\bar{s}); D) = \iint_D L_{sk}(x, y) \psi(r_y(\bar{s})) \psi^*(r_x(\bar{s})) dx dy,$$

$$J(r(\bar{s})) = J(r(\bar{s}); \mathbb{R}^6), \quad \Phi(D) = \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} J(r(\bar{s}); D) dr(\bar{s}).$$

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

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

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

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

Пусть $\beta > 0$, $2\beta < \beta_{1j}$, $2\beta < \beta_2 - \beta_1$, $\delta_i = [\beta_{ij} - \beta, \beta_{ij} + \beta]$, $i = 1, 2$, $\delta_3 = [\beta_{1j} + \beta/2, \beta_{2j} - \beta/2]$. Для $\forall \varepsilon_2 > 0$ выберем число β таким, 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 $\Omega_i = \{x, y \mid t_{kx}, t_{ky} \in \delta_i\}$, $i = 1, 2, 3$, $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$, $E = G \setminus \Omega \cap G$. Так как $G \subset E \cup \Omega$, то нам достаточно оценить $J(r(\bar{s}), D)$ только для $D = \Omega, E$.

4.7. Рассмотрим случай $s \notin k$. Начнем с оценок функционала $J(r(\bar{s}), E)$. Пусть $\gamma_{11} = \beta_{2j} + \beta$, $\gamma_{21} = \beta_{2j}$, $\gamma_{12} = \beta_{2j} - 0.5\beta$, $\gamma_{22} = \beta_{2j} - \beta$, $\gamma_{13} = \beta_{1j} + \beta$, $\gamma_{23} = \beta_{1j} + 0.5\beta$, $\gamma_{14} = \beta_{1j}$, $\gamma_{24} = \beta_{1j} - \beta$, $\gamma_{25} = 0$. Разобьем область E на подобласти

$$E_{xi} = \{x, y \mid t_{kx} \geq \gamma_{1i}, \gamma_{2,i+1} \leq t_{ky} \leq \gamma_{2i}\},$$

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

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 $d(\bar{k}, \bar{s}) > \gamma_{2i}d(\bar{k})$ область E_{xi} пустая, то далее считаем, что $d(\bar{k}, \bar{s}) \leq \gamma_{2i}d(\bar{k})$. Очевидно, при $(x, y) \in E_{xi}$

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

и

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

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 $(x, y) \in E_x$

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

$$|x - y| \geq \beta_0 |x| \geq \beta_0 |y|. \quad (4.12b)$$

Так как $\psi(r) \equiv 0$ при $|r| \leq R$, то при $r_z(s) \in \text{supp } \psi(r_z(\bar{s}))$ выполняется неравенство $d^2(\mathbf{k}) + d^2(\bar{\mathbf{k}}, \bar{s}) + |z|^2 > R^2$, $z = x, y$. В области E_x справедливо неравенство $d^2(\bar{\mathbf{k}}, \bar{s}) + |y|^2 \leq \gamma_{21}^2 d^2(\mathbf{k})$; значит, при $r_y(\bar{s}) \in \text{supp } \psi(r_y(\bar{s}))$ выполняется неравенство $d^2(\mathbf{k})(1 + \gamma_{21}^2) \geq R^2$, т.е.

$$d(\mathbf{k}) \geq R(1 + \gamma_{21}^2)^{-1/2}. \quad (4.13)$$

Кроме того, заметим, что поскольку $d(\mathbf{k}) \geq \gamma_{21}^{-1} d(\bar{\mathbf{k}}, \bar{s})$, то

$$(1 + \gamma_{21}^2)^{1/2} d(\mathbf{k}) \geq (d^2(\bar{\mathbf{k}}, \bar{s}) + d^2(\mathbf{k}))^{1/2} = d(\bar{s})$$

и в силу (4.12)

$$|x - y| \geq \beta'_0 d(\bar{s}) = \beta'_0 |r(\bar{s})|, \quad (4.14)$$

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

$$|L_{sk}(x, y)| \leq \frac{c_1}{R^{5/2}} e^{-c_0|x|} e^{-c_0|y|} e^{-c_0|r(\bar{s})|}, \quad (4.15)$$

где c_0, c_1 – некоторые константы.

В силу (4.15) имеем

$$\begin{aligned} |\Phi(E_x)| &\leq \frac{c_1}{R^{5/2}} \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} e^{-c_0|r(\bar{s})|} \left[\iint_{E_x} |\psi(r_y(\bar{s}))|^2 e^{-c_0(|x|+|y|)} dx dy \right. \\ &\quad \left. + \iint_{E_x} |\psi(r_x(\bar{s}))|^2 e^{-c_0(|x|+|y|)} dx dy \right] dr(\bar{s}) \\ &\leq \frac{c_2}{R^{5/2}} \int |\psi(r)|^2 e^{-c_0|r|/2} dr, \end{aligned}$$

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

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 в том, что для $\Phi(E_y)$ верна та же оценка, что и для $\Phi(E_x)$, и поэтому

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

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

$$|\varkappa_\ell(t_{\mathbf{k}x}) - \varkappa_\ell(t_{\mathbf{k}y})| \leq |\varkappa'_\ell(\tilde{t})| |t_{\mathbf{k}x} - t_{\mathbf{k}y}|,$$

где $\tilde{t}$ – некоторое число, зависящее от $t_{\mathbf{k}x}$ и $t_{\mathbf{k}y}$, $t_{\mathbf{k}x} \leq \tilde{t} \leq t_{\mathbf{k}y}$. Далее,

$$|t_{\mathbf{k}x} - t_{\mathbf{k}y}| = \frac{|t_{\mathbf{k}x}^2 - t_{\mathbf{k}y}^2|}{t_{\mathbf{k}x} + t_{\mathbf{k}y}} \leq \frac{||x| - |y||(|x| + |y|)}{2d(\mathbf{k})(\beta_1 - \beta)} \leq \frac{||x| - |y||(\beta_2 + \beta)}{d(\mathbf{k})(\beta_1 - \beta)}.$$

Поэтому при $(x, y) \in \Omega_i$

$$|\varkappa_\ell(t_{\mathbf{k}x}) - \varkappa_\ell(t_{\mathbf{k}y})| \leq 4q_i \frac{|x - y|}{d(\mathbf{k})} \frac{\beta_2}{\beta_1},$$

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

$$|L_{s\mathbf{k}}(x, y)| \leq c_4 q_i^2 |K_2(m|x - y|)| d^{-2}(\mathbf{k}). \quad (4.17)$$

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

$$K[r(\bar{s}); \Omega_i] = \iint |(K_2(m|x - y|)\psi(r_y(\bar{s}))\chi_i(t_{\mathbf{k}y})\psi^*(r_x(\bar{s}))\chi_i(t_{\mathbf{k}x})| dx dy. \quad (4.18)$$

В силу (4.18)

$$|J(r(\bar{s}); \Omega_i)| \leq c_4 q_i^2 d^{-2}(\mathbf{k}) K[r(\bar{s}); \Omega_i]. \quad (4.19)$$

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

$$K[r(\bar{s}); \Omega_i] \leq \|K_2\|_{\mathcal{L}^1} \|\psi(r_x(\bar{s}))\chi_i(t_{\mathbf{k}x})\|_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}_x^3)} \|\psi(r_y(\bar{s}))\chi_i(t_{\mathbf{k}y})\|_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}_y^3)}. \quad (4.20)$$

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

$$|\Phi(\Omega_i)| \leq \int_{\mathbb{R}^{3n-3}(\bar{s})} |J(r(\bar{s}); \Omega_i)| dr(\bar{s}) \leq c_5 q_i^2 \int_{\mathbb{R}^{3n}} |\psi(r)|^2 \chi_i(t_{\mathbf{k}}) d^{-2}(\mathbf{k}) dr, \quad (4.21)$$

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

$$(\beta_1 - 0.5\beta) d(\mathbf{k}) \leq d(\bar{\mathbf{k}}) \leq (\beta_2 + 0.5\beta) d(\mathbf{k}),$$

и, значит,

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

Поэтому из (4.21) следует неравенство

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

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)

$$|\Phi(\Omega_i)| \leq c_6 \varepsilon_2^2 \|\psi \chi_i(t_k) |r|^{-1}\|^2, \quad i = 1, 2. \quad (4.23)$$

Пусть $i = 3$. В области $\text{supp } \chi_3(t_k)$ для некоторого $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\beta)$ выполняется $\varepsilon_0 \leq v_j(t_k)$. Поэтому в силу (4.22)

$$|\Phi(\Omega_3)| \leq c_7 \int |\psi(r)|^2 \chi_3(t_k) v_j^2(t_k) |r|^{-2} dr, \quad (4.24)$$

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

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

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

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

$$d^2(\bar{\mathbf{k}}) \geq \gamma_{1i}^2(|x|^2 + d^2(\mathbf{k} \setminus s)), \quad d^2(\bar{\mathbf{k}}) \leq \gamma_{2i}^2(|y|^2 + d^2(\mathbf{k} \setminus s)). \quad (4.25)$$

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

$$|x - y| \geq |y| - |x| \geq d(\bar{\mathbf{k}})(\gamma_{2i}^{-1} - \gamma_{1i}^{-1}). \quad (4.26)$$

Как и в п. 4.7, далее считаем, что

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

Из этих соотношений и неравенств (4.25) следует, что

$$(\gamma_{1i}^2 + 1)^{1/2} \gamma_{1i}^{-1} d(\bar{\mathbf{k}}) \geq |r_x(\bar{s})| \geq R. \quad (4.27)$$

В силу (4.26), (4.27)

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

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

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

где a_0, c_8 – некоторые числа. Поскольку

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

то

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

и, значит,

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

где $a_1 = 0.5a_0$.

Используя эту оценку и неравенство Буняковского, видим, что

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

Аналогичная оценка получается и для области E_y . Поэтому

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

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

$$\begin{aligned} (\varkappa_\ell(t_{kx}) - \varkappa_\ell(t_{ky}))^2 &\leq q_i^2 |t_{kx} - t_{ky}|^2 \leq q_i^2 \frac{|x - y|^2 d^2(\mathbf{k})}{(d^2(\mathbf{k} \setminus s) + |x|^2)(d^2(\mathbf{k} \setminus s) + |y|^2)} \\ &\leq q_i^2 \beta_2^2 |x - y|^2 d^{-2}(\mathbf{k}) \beta_1^{-2}, \end{aligned}$$

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

4.11. Пусть функции $u_0(t)$, $v_0(t)$ – те же, что в п. 3.1, $\varkappa_1(t) = u_0(t)$, $\varkappa_2(t) = v_0(t)$, $R > 0$ – произвольное число, $s \in \mathbf{n}$, и пусть $\tau = |r|R^{-1}$, $\tau_z = \tau_{sz} = (d^2(\bar{s}) + |z|^2)^{1/2} R^{-1}$, $z = x, y$,

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

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

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

ЛЕММА 4.3. Для $\varepsilon_1 > 0$ можно найти $R > 0$ и константу $c > 0$ такие, что для $\forall \psi(r)$

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

ЗАМЕЧАНИЕ 4.4. Поскольку

$$(T_s \psi u_0(\tau), \psi u_0(\tau)) + (T_s \psi v_0(\tau), \psi v_0(\tau)) = (T_s \psi, \psi) + \Phi_{s0}[\psi],$$

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

4.12. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ЛЕММЫ 4.3. Для произвольной функции $\psi(r) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^{3n})$ и области $D \subseteq \mathbb{R}^6$ вводим те же обозначения $J(r(\bar{s}), D)$, $\Phi(D)$, что и в п. 4.6. Далее, полагая $\beta_{10} = 1$, $\beta_{20} = 2$, для любого $\varepsilon_2 > 0$ укажем число $0 < \beta < 0.25$ такое, что

$$|u'_0(t)| \leq \varepsilon_2, \quad |v'_0(t)| \leq \varepsilon_2 \quad \text{при} \quad |t - \beta_{\alpha 0}| \leq \beta, \quad \alpha = 1, 2.$$

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 $t_{kz} = \tau_z$, $\beta_{1j} = \beta_{10}$, $\beta_{2j} = \beta_{20}$. Тогда, как и в п. 4.6,

$$J(r(\bar{s})) = J(r(\bar{s}); G).$$

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

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

где $q = \max_{i,t} |\varkappa'_i(t)|$, $\tau_x \leq t \leq \tau_y$, $(x, y) \in G$.

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

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

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 $|x| \geq |y|$).

Взяв здесь минимум по i , получим аналогично (4.12)

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

где $\beta_0 = \beta\beta_{20}^{-1}8^{-1}$. Следовательно, при $(x, y) \in E_x$

$$|x - y| \geq \frac{\beta_0}{2} |r_x(\bar{s})| \geq \frac{\beta_0}{2} |r_y(\bar{s})|. \quad (4.32)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} |J(r(\bar{s}); E_x)| &\leq \left(\iint_{E_x} |\psi(r_y(\bar{s}))|^2 e^{-a_2|r_y(\bar{s})|} e^{-a_2|x|} dx dy \right)^{1/2} \\ &\quad \times \left(\iint_{E_x} |\psi(r_x(\bar{s}))|^2 e^{-a_2|r_x(\bar{s})|} e^{-a_2|y|} dx dy \right)^{1/2} cR^{-5/2} \\ &\leq c_1 \int_{\mathbb{R}_x^3} |\psi(r_x(\bar{s}))|^2 e^{-a_2|r_x(s)|} dx R^{-5/2} \end{aligned}$$

и, значит,

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

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

$$|\Phi(E)| \leq 2c_1 R^{-5/2} \|\psi e^{-c_0|r|}\|^2 = \frac{2c_1}{R^{5/2}} (\|\psi_{00} e^{-c_0|r|}\|^2 + \|\psi_0 e^{-c_0|r|}\|^2), \quad (4.33)$$

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

Для оценки величин $\Phi(\Omega_i)$ заметим, что при $(x, y) \in \Omega_i$ в (4.30) $q = q_i = \max_{t \in \delta_i; \ell} |\mathcal{A}'_\ell(t)|$ и в силу (4.30)

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

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

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

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

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

Подставляя в (4.34) оценку $\chi_i(\tau) \leq \chi_i(\tau)(\beta_2 + \beta)^2 |r|^{-2} R^2$, $i = 1, 2$, и учитывая, что при $i = 1, 2$ выполняется $q_i \leq \varepsilon_2$, получаем

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

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

Список литературы

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 Poincaré. Ph. Th. 1997. V. 67. № 1. P. 1–28.
3. *Вугальтер С. А., Жислин Г. М.* Дискретный спектр многочастичных псевдорелятивистских гамильтонианов // Функц. анализ и его прилож. 1998. Т. 32. № 2. С. 83–86.
4. *Жислин Г. М., Вугальтер С. А.* Спектральные свойства псевдорелятивистской системы двух частиц с конечными массами // ТМФ. 1999. Т. 121. № 2. С. 297–306.
5. *Вугальтер С. А., Жислин Г. М.* Об асимптотике дискретного спектра заданной симметрии многочастичных гамильтонианов // Тр. ММО. 1991. № 54. С. 187–213.
6. *Антонец М. А., Жислин Г. М., Шерешевский И. А.* О дискретном спектре многочастичных гамильтонианов // 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. № 1. P. 117–142.
8. *Жислин Г. М.* Об узлах собственных функций оператора Шрёдингера // УМН. 1961. Т. 14. № 1. С. 149–152.
9. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 2. СМБ. М.: Наука, 1974.

Научно-исследовательский радиофизический институт,
Н. Новгород
E-mail: greg@nirfi.sci-nnov.ru

Поступило в редакцию
9.I.2001