Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Х. Эшкабилов, Об одном дискретном “трехчастичном” операторе Шредингера в модели Хаббарда, *ТМФ*, 2006, том 149, номер 2, 228–243

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf4229>

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: 18.209.158.208

26 апреля 2023 г., 14:47:05

© 2006 г.

Ю. Х. Эшкабилов*

ОБ ОДНОМ ДИСКРЕТНОМ “ТРЕХЧАСТИЧНОМ” ОПЕРАТОРЕ ШРЕДИНГЕРА В МОДЕЛИ ХАББАРДА

В пространстве $L_2(T^\nu \times T^\nu)$, где T^ν – ν -мерный тор, изучены спектральные свойства “трехчастичного” дискретного оператора Шредингера $\hat{H} = H_0 + H_1 + H_2$, где H_0 – оператор умножения на функцию, H_1, H_2 – частичные интегральные операторы. Доказаны теоремы о существенном спектре оператора $\hat{H}$. Изучены дискретный и существенный спектры гамильтонианов H^t и $\mathbf{h}$, возникающих в модели Хаббарда на трехмерной решетке.

Ключевые слова: дискретный оператор Шредингера, модель Хаббарда, дискретный и существенный спектры дискретных операторов.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время модель Хаббарда [1]–[3] является одной из наиболее интенсивно изучаемых многоэлектронных моделей металла. Однако до сих пор получено очень мало точных результатов для спектра и волновых функций кристалла, описываемого этой моделью. В настоящее время представляет интерес получение точных результатов хотя бы в частных случаях. В работе [2] была изучена задача о спектре и волновых функциях в простейшем многоэлектронном случае: для двух электронов в трехмерной решетке. Известно, что двухэлектронные системы могут находиться в двух состояниях: триплетном и синглетном [2], [4]. Доказано, что спектр оператора триплета H_0^t состоит из единственного отрезка $[2m, 2M]$, а у оператора синглета H^s для некоторых значений квазиимпульса существует единственное связанное состояние [2].

В настоящей статье рассматриваются вопросы о возмущении спектра оператора триплета H^t модели, в которой на решетке появляется примесь. Исследуется система, состоящая из двух свободно движущихся электронов и одной примеси на трехмерной решетке, т.е. изучается “трехчастичная” задача: два электрона и одна “примесь” на решетке. Следует отметить некоторые новые черты этой системы, более сложные по сравнению с беспримесным случаем. В беспримесном случае оператор триплета H_0^t является унитарно-эквивалентным оператору умножения на функцию [2], и дискретный уровень в спектре гамильтониана H_0^t отсутствует. Когда

*Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан.
E-mail: yusup62@rambler.ru

на решетке имеется примесь, структура гамильтониана значительно усложняется, и оператор триплета H^t приобретает вид $H^t = H_0^t + T_1 + T_2$, где T_1, T_2 – частичные интегральные операторы. Поэтому изучение спектра гамильтониана H^t является более интересным с физической и математической точек зрения.

При изучении существенного и дискретного спектров гамильтониана H^t мы сделаем ряд заключений общего характера, касающихся дискретного спектра оператора H^t . Поэтому сначала опишем гамильтониан общего вида (который обозначен у нас через $\hat{H}$) и введем некоторые обозначения (раздел 2). В разделе 3 доказаны теоремы о существенном спектре общего “трехчастичного” дискретного оператора Шредингера $\hat{H}$ (т.е. дано полное описание существенного спектра оператора $\hat{H}$) при общих предположениях для ядер частичных интегральных операторов в $\hat{H}$. В разделе 4 определены “трехчастичный” и “двухчастичный” дискретные операторы Шредингера H^t и h , возникающие в модели Хаббарда. Доказано, что при некоторых значениях параметров гамильтониана в спектре гамильтониана H^t в дополнение к отрезку $[2m, 2M]$ появляются одна ветвь и один дискретный уровень или две ветви и два или три дискретных уровня. Приведено достаточное условие, при котором в спектре гамильтониана H^t отсутствует дискретный уровень.

2. ОПИСАНИЕ ОПЕРАТОРА $\hat{H}$. НЕКОТОРЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

Пусть $\Omega = T^\nu$ – ν -мерный тор в $\mathbb{R}^\nu$. Обозначим через μ меру на Ω и определим меру $\hat{\mu}$ на $\Omega \times \Omega$ с помощью равенства $\hat{\mu} = \mu \otimes \mu$. В пространстве $\mathcal{H} = L_2(\Omega \times \Omega)$ рассмотрим ограниченный самосопряженный оператор

$$\hat{H} = H_0 + H_1 + H_2,$$

где действие операторов H_0, H_1 и H_2 определено равенствами

$$H_0 f(x, y) = h_0(x, y) f(x, y), \quad f \in \mathcal{H},$$

$$H_1 f(x, y) = \int_{\Omega} h_1(x, s, y) f(s, y) ds, \quad f \in \mathcal{H},$$

$$H_2 f(x, y) = \int_{\Omega} h_2(x, t, y) f(x, t) dt, \quad f \in \mathcal{H}.$$

Здесь $h_0(x, y)$ – вещественнозначная непрерывная функция на $\Omega \times \Omega$, $h_1(x, s, y)$ и $h_2(x, t, y)$ – непрерывные функции на Ω^3 , причем $h_1(x, s, y) = \overline{h_1(s, x, y)}$ и $h_2(x, t, y) = \overline{h_2(x, y, t)}$. Операторы H_1 и H_2 являются частичными интегральными операторами.

В дальнейшем, если в интегралах не указана область интегрирования, будем понимать это как интегрирование по Ω . Обозначим через $\rho(\cdot)$, $\sigma(\cdot)$, $\sigma_{\text{ess}}(\cdot)$ и $\sigma_{\text{disc}}(\cdot)$ соответственно резольвентное множество, спектр, существенный спектр и дискретный спектр самосопряженных операторов [5].

Для каждого $n \in \mathbb{N}$ введем следующие обозначения:

$$K^{(1)} \begin{pmatrix} x_1, & x_2, & \dots, & x_n; & y \\ s_1, & s_2, & \dots, & s_n; & \lambda \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \hat{h}_1(x_1, s_1, y; \lambda) & \hat{h}_1(x_1, s_2, y; \lambda) & \dots & \hat{h}_1(x_1, s_n, y; \lambda) \\ \hat{h}_1(x_2, s_1, y; \lambda) & \hat{h}_1(x_2, s_2, y; \lambda) & \dots & \hat{h}_1(x_2, s_n, y; \lambda) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hat{h}_1(x_n, s_1, y; \lambda) & \hat{h}_1(x_n, s_2, y; \lambda) & \dots & \hat{h}_1(x_n, s_n, y; \lambda) \end{vmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} \hat{h}_1(x, s, y; \lambda) &= \frac{h_1(x, s)}{h_0(s, y) - \lambda}, \quad \lambda \in \rho(H_0); \\ K^{(2)} \begin{pmatrix} y_1, & y_2, & \dots, & y_n; & x \\ t_1, & t_2, & \dots, & t_n; & \lambda \end{pmatrix} &= \\ &= \begin{vmatrix} \hat{h}_2(x, t_1, y_1; \lambda) & \hat{h}_2(x, t_2, y_1; \lambda) & \dots & \hat{h}_2(x, t_n, y_1; \lambda) \\ \hat{h}_2(x, t_1, y_2; \lambda) & \hat{h}_2(x, t_2, y_2; \lambda) & \dots & \hat{h}_2(x, t_n, y_2; \lambda) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hat{h}_2(x, t_1, y_n; \lambda) & \hat{h}_2(x, t_2, y_n; \lambda) & \dots & \hat{h}_2(x, t_n, y_n; \lambda) \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

где

$$\hat{h}_2(x, t, y; \lambda) = \frac{h_2(y, t)}{h_0(x, t) - \lambda}, \quad \lambda \in \rho(H_0).$$

Для каждого $\lambda \in \rho(H_0)$ определим последовательности непрерывных функций $d_n^{(1)}(y; \lambda)$ и $d_n^{(2)}(x; \lambda)$ на Ω , $n \in \mathbb{N}$, следующим равенством:

$$d_n^{(k)}(\tau; \lambda) = \int \dots \int K^{(k)} \begin{pmatrix} s_1, & s_2, & \dots, & s_n; & \tau \\ s_1, & s_2, & \dots, & s_n; & \lambda \end{pmatrix} ds_1 ds_2 \dots ds_n, \quad \tau \in \Omega, \quad k = 1, 2.$$

Также для каждого $\lambda \in \rho(H_0)$ определим последовательности непрерывных функций $M_n^{(1)}(x, s, y; \lambda)$ и $M_n^{(2)}(x, s, y; \lambda)$ на Ω^3 , $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} M_n^{(1)}(x, s, y; \lambda) &= \int \dots \int K^{(1)} \begin{pmatrix} x, & \xi_1, & \xi_2, & \dots, & \xi_n; & y \\ s, & \xi_1, & \xi_2, & \dots, & \xi_n; & \lambda \end{pmatrix} d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n, \\ M_n^{(2)}(x, s, y; \lambda) &= \int \dots \int K^{(2)} \begin{pmatrix} y, & \xi_1, & \xi_2, & \dots, & \xi_n; & x \\ s, & \xi_1, & \xi_2, & \dots, & \xi_n; & \lambda \end{pmatrix} d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n. \end{aligned}$$

Очевидно, что при каждом $\lambda \in \rho(H_0)$ функциональные ряды

$$\sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{d_n^{(1)}(y; \lambda)}{n!}, \quad \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{d_n^{(2)}(x; \lambda)}{n!}$$

абсолютно сходятся на Ω . Следовательно, мы можем определить непрерывные функции $D_1(y; \lambda)$ и $D_2(x; \lambda)$ на Ω с помощью следующих равенств:

$$D_k(\cdot; \lambda) = 1 + \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{d_n^{(k)}(\cdot; \lambda)}{n!}, \quad k = 1, 2.$$

Также для каждого $\lambda \in \rho(H_0)$ определим непрерывные функции $M_1(x, s, y; \lambda)$ и $M_2(x, s, y; \lambda)$ на Ω^3 такие, что

$$M_k(x, s, y; \lambda) = \hat{h}_k(x, s, y; \lambda) + \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{M_n^{(k)}(x, s, y; \lambda)}{n!}, \quad k = 1, 2.$$

Введем обозначения

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \{ \lambda \in \rho(H_0) : D_1(y_0; \lambda) = 0 \text{ для некоторого } y_0 \in \Omega \}, \\ \sigma_2 &= \{ \lambda \in \rho(H_0) : D_2(x_0; \lambda) = 0 \text{ для некоторого } x_0 \in \Omega \}. \end{aligned}$$

Пусть $R_0 = R_0(\lambda) = (H_0 - \lambda)^{-1}$, $\lambda \in \rho(H_0)$. Для каждого $\lambda \in \rho(H_0) \setminus \sigma_1$ резольвента $(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}$ оператора $\hat{H}_1 = H_0 + H_1$ имеет вид

$$(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1} = R_0(E - A_\lambda), \quad (2.1)$$

где E – тождественный оператор в $\mathcal{H}$, оператор A_λ действует в $\mathcal{H}$ по формуле

$$A_\lambda f(x, y) = \int \frac{M_1(x, s, y; \lambda)}{D_1(y; \lambda)} f(s, y) ds \quad (2.1')$$

и $\sigma(\hat{H}_1) = \sigma(H_0) \cup \sigma_1$ (см. работу [6]).

Аналогично при $\lambda \in \sigma(H_0) \setminus \sigma_2$ для оператора $\hat{H}_2 = H_0 + H_2$ мы имеем

$$(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1} = R_0(E - B_\lambda), \quad (2.2)$$

где оператор B_λ в $\mathcal{H}$ действует по формуле

$$B_\lambda f(x, y) = \int \frac{M_2(x, s, y; \lambda)}{D_2(x; \lambda)} f(x, s) ds \quad (2.2')$$

и $\sigma(\hat{H}_2) = \sigma(H_0) \cup \sigma_2$.

Пусть $\Pi = \rho(H_0) \cap \rho(\hat{H}_1) \cap \rho(\hat{H}_2)$. Для каждого $\lambda \in \Pi$ оператор

$$K_\lambda = (H_1(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2 + H_2(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1)R_0(\lambda) \quad (2.3)$$

является компактным в $\mathcal{H}$. Обозначим $\Delta(\lambda)$ детерминант Фредгольма оператора $E - K_\lambda$, $\lambda \in \Pi$, пусть также $\Pi_0 = \{\lambda \in \Pi: \Delta(\lambda) = 0\}$.

3. СУЩЕСТВЕННЫЙ СПЕКТР ОПЕРАТОРА $\hat{H}$

ТЕОРЕМА 3.1. *Имеет место следующее включение: $\sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$, где $\sigma_0 = \sigma(H_0)$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Сначала докажем, что $\sigma_0 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$. Имеем $\sigma_0 = [m, M]$, где $m = \inf h_0(x, y)$ и $M = \sup h_0(x, y)$. Пусть $\lambda_0 \in [m, M]$. Тогда в силу непрерывности функции $h_0(x, y)$ на $\Omega \times \Omega$ существует точка $(x_0, y_0) \in \Omega \times \Omega$ такая, что $\lambda_0 = h_0(x_0, y_0)$. Пусть

$$\begin{aligned} V_n(x_0) &= \left\{ x \in \Omega: \frac{1}{n+1} < \rho(x, x_0) < \frac{1}{n} \right\}, \quad x_0 \in \Omega, \\ W_n(x_0, y_0) &= V_n(x_0) \times V_n(y_0), \\ \chi_{W_n}(x, y) &= \chi_{V_n(x_0)}(x) \chi_{V_n(y_0)}(y), \end{aligned}$$

где $\rho(x, y)$ – метрика в $\mathbb{R}^\nu$, $\chi_G(x)$ – характеристическая функция множества $G \subset \mathbb{R}^\nu$.

Рассмотрим последовательность ортонормированных функций

$$f_n(x, y) = \frac{\chi_{W_n}(x, y)}{\sqrt{\mu(V_n(x_0))\mu(V_n(y_0))}} \in \mathcal{H}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} \|(\hat{H} - \lambda_0)f_n\| &\leq \sup_{x,y \in W_n} |h_0(x,y) - \lambda_0| + \max_{x,s \in \Omega} |h_1(x,s,y)| \sqrt{\mu(\Omega)\mu(V_n(x_0))} + \\ &+ \max_{y,t \in \Omega} |h_2(x,s,y)| \sqrt{\mu(\Omega)\mu(V_n(y_0))} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

при $n \rightarrow \infty$.

Действительно, при $n \rightarrow \infty$ имеем сходимость $(x,y) \rightarrow (x_0,y_0)$, из непрерывности функции $h_0(x,y)$ на $\Omega \times \Omega$ вытекает, что $h_0(x,y) \rightarrow h_0(x_0,y_0) = \lambda_0$, а остальные слагаемые стремятся к нулю в силу того, что $\mu(V_n(x_0)) \rightarrow 0$ и $\mu(V_n(y_0)) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Отсюда и из критерия Вейля о существенном спектре [5] получим $\sigma_0 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$.

Теперь докажем, что $\sigma_1 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$. Пусть $\lambda_0 \in \sigma_1$. Тогда существует элемент $\alpha_0 \in \Omega$ такой, что $D_1(\alpha_0; \lambda_0) = 0$. При каждом $\alpha \in \Omega$ обозначим через $Q_\alpha = Q_\alpha(\lambda)$, $\lambda \in \rho(H_0)$, компактный оператор в $\mathcal{H}_0 = L_2(\Omega)$ с непрерывным ядром

$$k_\alpha(x,s;\lambda) = \hat{h}_1(x,s,\alpha;\lambda) = \frac{h_1(x,s,\alpha)}{h_0(s,\alpha) - \lambda}.$$

Тогда для детерминанта $\Delta_\alpha^{(1)}(\lambda)$ оператора $I + Q_\alpha(\lambda)$, $\lambda \in \rho(H_0)$, где I – тождественный оператор в $\mathcal{H}_0$, имеем $\Delta_\alpha^{(1)}(\lambda) = D_1(\alpha;\lambda)$ [7]. Отсюда получим, что $\Delta_{\alpha_0}^{(1)}(\lambda_0) = 0$, т.е. число -1 является собственным значением оператора $Q_{\alpha_0}(\lambda_0)$. Следовательно, существует вектор $\varphi \in \mathcal{H}_0$, $\|\varphi\| = 1$, такой, что $Q_{\alpha_0}(\lambda_0)\varphi(x) = -\varphi(x)$.

Пусть $\chi_n(y)$ – характеристическая функция множества $V_n = V_n(\alpha_0)$. Определим последовательность ортонормированных функций

$$f_n(x,y) = \frac{\gamma_n}{\sqrt{\mu(V_n)}} \frac{\varphi(x)\chi_n(y)}{h_0(x,y) - \lambda_0} \in \mathcal{H}, \quad n \in \mathbb{N},$$

где $\{\gamma_n\}$ – некоторая ограниченная числовая последовательность, которая обеспечивает нормированность последовательности $\{f_n\}$.

Имеем

$$(\hat{H} - \lambda_0)f_n(x,y) = \frac{\gamma_n\chi_n(y)}{\sqrt{\mu(V_n)}} (\varphi(x) + Q_y(\lambda_0)\varphi(x)) + H_2f_n(x,y).$$

Отметим, что при фиксированном $\lambda \in \rho(H_0)$

$$\lim_{\alpha \rightarrow \alpha_0} \|Q_\alpha(\lambda) - Q_{\alpha_0}(\lambda)\|_{\mathcal{H}_0} = 0$$

и существует число $a > 0$ такое, что $\min_{x,t \in \Omega} |h_0(x,t) - \lambda_0| \geq a > 0$ и

$$\|H_2f_n\| \leq \frac{\gamma_n}{a} \max_{x,y,t \in \Omega} |h_2(x,t,y)| \sqrt{\mu(\Omega)\mu(V_n)}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Следовательно,

$$\|(\hat{H} - \lambda_0)f_n\| \leq \gamma_n \left(\sqrt{\sup_{\alpha \in V_n(x_0)} \|\varphi + Q_\alpha(\lambda_0)\varphi\|_{\mathcal{H}_0}^2} + C\sqrt{\mu(V_n)} \right), \quad n \in \mathbb{N},$$

где $C > 0$.

Однако $\lim_{n \rightarrow \infty} \overline{V_n(\alpha_0)} = \{\alpha_0\}$. Тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\alpha \in \overline{V_n(\alpha_0)}} \|Q_\alpha(\lambda_0)\varphi + \varphi\|_{\mathcal{H}_0} = \|Q_{\alpha_0}(\lambda_0)\varphi + \varphi\|_{\mathcal{H}_0} = 0,$$

так как φ – собственный вектор оператора $Q_{\alpha_0}(\lambda_0)$, соответствующий собственному значению -1 . Таким образом, получим, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(\hat{H} - \lambda_0)f_n\| = 0,$$

т.е. $\lambda_0 \in \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$. Следовательно, $\sigma_1 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$. Аналогично доказывается, что $\sigma_2 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$. Доказательство теоремы 3.1 завершено.

ЛЕММА 3.1. *Если $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$, то оператор*

$$N_\lambda = -(H_0 - \lambda)^{-1} + (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1} + (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}$$

действует в $\mathcal{H}$ и инъективен.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$ и существует ненулевой элемент $f_0 \in \mathcal{H}$ такой, что $N_\lambda f_0 = \theta$. Положим $\tilde{f}_0 = R_0 f_0$. Тогда $\tilde{f}_0 \in \mathcal{H}$ и $\tilde{f}_0 \neq \theta$, поскольку $\lambda \notin \sigma(H_0)$. Для оператора N_λ имеет место равенство

$$N_\lambda = (E - (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1 - (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2)R_0(\lambda), \quad \lambda \in \Pi.$$

Из $N_\lambda f_0 = \theta$ следует, что $\tilde{f}_0 - (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1\tilde{f}_0 = (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2\tilde{f}_0$, т.е.

$$(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}(\hat{H}_1 - \lambda)\tilde{f}_0 - (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1\tilde{f}_0 = (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2\tilde{f}_0.$$

Значит, $(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}f_0 = (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2R_0f_0$. Аналогично получим, что $(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}f_0 = (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1R_0f_0$. Следовательно,

$$\begin{aligned} K_\lambda f_0 &= H_1(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2R_0f_0 + H_2(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1R_0f_0 = \\ &= H_1(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}f_0 + H_2(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}f_0 = \\ &= 2f_0 - (H_0 - \lambda)(N_\lambda + (H_0 - \lambda)^{-1})f_0 = f_0, \end{aligned}$$

поэтому число 1 является собственным значением оператора K_λ , т.е. $\lambda \in \Pi_0$. Это противоречит предположению $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$.

Пусть $L(\mathcal{H})$ – пространство линейных ограниченных операторов в $\mathcal{H} = L_2(\Omega \times \Omega)$.

ЛЕММА 3.2. *Справедливы следующие утверждения:*

а) *для каждого $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$ система операторных уравнений*

$$R_1(\hat{H}_1 - \lambda) = -R_0H_1, \tag{3.1.1}$$

$$R_2(\hat{H}_2 - \lambda) = -R_0H_2, \tag{3.1.2}$$

$$R(\hat{H} - \lambda) = -(R_1H_2 + R_2H_1) \tag{3.1.3}$$

разрешима в $L(\mathcal{H})$ и оператор $\tilde{R} = R_0 + R_1 + R_2 + R$ является левым обратным к оператору $\hat{H} - \lambda$, где $R_1 = R_1(\lambda)$, $R_2 = R_2(\lambda)$ и $R = R(\lambda)$ – решение системы (3.1.1)–(3.1.3);

б) для каждого $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$ система операторных уравнений

$$(\hat{H}_1 - \lambda)T_1 = -H_1R_0, \quad (3.1.1')$$

$$(\hat{H}_2 - \lambda)T_2 = -H_2R_0, \quad (3.1.2')$$

$$(\hat{H} - \lambda)T = -(H_1T_2 + H_2T_1) \quad (3.1.3')$$

разрешима в $L(\mathcal{H})$ и оператор $\tilde{T} = T_0 + T_1 + T_2 + T$ является правым обратным к оператору $\hat{H} - \lambda$, где $T_0 = R_0(\lambda)$ и $T_1 = T_1(\lambda)$, $T_2 = T_2(\lambda)$, $T = T(\lambda)$ – решение системы (3.1.1')–(3.1.3')

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $\lambda \in \Pi$. Тогда $\lambda \in \rho(\hat{H}_1) \cap \rho(\hat{H}_2)$, поэтому для операторов $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ существуют соответственно резольвенты $(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1} \in L(\mathcal{H})$ и $(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1} \in L(\mathcal{H})$. Из уравнений (3.1.1) и (3.1.2) находим, что при $\lambda \in \Pi$

$$R_1 = R_1(\lambda) = -R_0H_1(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1} \in L(\mathcal{H}),$$

$$R_2 = R_2(\lambda) = -R_0H_2(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1} \in L(\mathcal{H}).$$

При $\lambda_0 \in \Pi \setminus \Pi_0$, умножив обе части уравнения (3.1.3) справа на инъективный оператор

$$\hat{N}_1(\lambda) = (E - (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1 - (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2)R_0(\lambda) = N_\lambda,$$

получим

$$\begin{aligned} R(\hat{H} - \lambda)\hat{N}_1 &= R + R((\hat{H}_1 - \lambda)\tilde{R}_1 + H_1R_0) + R((\hat{H}_2 - \lambda)\tilde{R}_2 + H_2R_0) + \\ &+ R(H_1\tilde{R}_2 + H_2\tilde{R}_1) = -(R_1H_2 + R_2H_1)\hat{N}_1(\lambda), \end{aligned}$$

где $\tilde{R}_k = \tilde{R}_k(\lambda) = -(\hat{H}_k - \lambda)^{-1}H_kR_0(\lambda)$, $k = 1, 2$.

Отсюда получим уравнение

$$R(E + H_1\tilde{R}_2 + H_2\tilde{R}_1) = -(R_1H_2 + R_2H_1)\hat{N}_1,$$

т.е. $R(E - K_\lambda) = P_\lambda N_\lambda$, где

$$P_\lambda = -(R_1(\lambda)H_2 + R_2(\lambda)H_1). \quad (3.2)$$

В силу обратимости оператора $E - K_\lambda$ имеем

$$R = R(\lambda) = P_\lambda N_\lambda (E - K_\lambda)^{-1} \in L(\mathcal{H}).$$

Итак, мы доказали разрешимость системы операторных уравнений (3.1.1)–(3.1.3) при $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$. Легко проверить, что для оператора $\tilde{R} = R_0 + T_1 + R_2 + R$ выполняется равенство $\tilde{R}(\hat{H} - \lambda) = E$ при всех $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$. Первое утверждение леммы доказано.

Аналогично доказывается второе утверждение, однако решение системы уравнений (3.1.1')–(3.1.3') имеет вид

$$T_1 = T_1(\lambda) = -(\hat{H}_1 - \lambda)^{-1}H_1R_0(\lambda), \quad \lambda \in \rho(H_0) \cap \rho(H_1),$$

$$T_2 = T_2(\lambda) = -(\hat{H}_2 - \lambda)^{-1}H_2R_0(\lambda), \quad \lambda \in \rho(H_0) \cap \rho(H_2),$$

$$T = T(\lambda) = (E - P_\lambda)^{-1}N_\lambda K_\lambda, \quad \lambda \in \Pi \setminus \Pi_0.$$

Отметим, что оператор P_λ , $\lambda \in \Pi$, заданный формулой (3.2), является компактным в $\mathcal{H}$, и имеет место равенство $P_\lambda = R_0 K_\lambda R_0^{-1}$, $\lambda \in \Pi$.

В силу леммы 3.2 для каждого $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$ существуют левый и правый обратные операторы к $\hat{H} - \lambda$. Следовательно, для резольвенты $R_\lambda(\hat{H})$, $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$, оператора $\hat{H}$ имеем

$$R_\lambda(\hat{H}) = R_0(\lambda) + R_1(\lambda) + R_2(\lambda) + R(\lambda) = T_0(\lambda) + T_1(\lambda) + T_2(\lambda) + T(\lambda).$$

Отсюда следует

ТЕОРЕМА 3.2. *При любом $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$ для резольвенты $R_\lambda(\hat{H})$ оператора $\hat{H}$ справедлива формула*

$$R_\lambda(\hat{H}) = R_0 + R_1 + R_2 + R,$$

где

$$R_1 = R_1(\lambda) = -R_0 H_1 (\hat{H}_1 - \lambda)^{-1},$$

$$R_2 = R_2(\lambda) = -R_0 H_2 (\hat{H}_2 - \lambda)^{-1},$$

$$R = R(\lambda) = P_\lambda N_\lambda (E - K_\lambda)^{-1}.$$

ЛЕММА 3.3. *Если число $\lambda \in \mathbb{C} \setminus (\sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2)$ – собственное значение оператора $\hat{H}$, то число 1 является собственным значением компактного оператора K_λ .*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Легко заметить, что $\Pi = \mathbb{C} \setminus (\sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2)$. Пусть $\lambda \in \Pi$ – собственное значение оператора $\hat{H}$ и $f_0 \in \mathcal{H}$, $f_0 \neq \theta$, – соответствующий собственный вектор, т.е. $(\hat{H} - \lambda)f_0 = \theta$. При этом

$$(R_0 + R_1 + R_2)(\hat{H} - \lambda) = E + R_1 H_2 + R_2 H_1 = E - P_\lambda, \quad \lambda \in \Pi.$$

Следовательно, $(E - P_\lambda)f_0 = \theta$, т.е. число 1 – собственное значение оператора P_λ . Тогда число 1 является также собственным значением оператора K_λ . Лемма 3.3 доказана.

ТЕОРЕМА 3.3. *Имеет место равенство*

$$\sigma_{\text{ess}}(\hat{H}) = \sigma(H_0) \cup \sigma(\hat{H}_1) \cup \sigma(\hat{H}_2) = \sigma(\hat{H}_1) \cup \sigma(\hat{H}_2) = \sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из теоремы 3.1 мы имеем $\sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2 \subset \sigma_{\text{ess}}(\hat{H})$, и достаточно показать обратное включение. В силу теоремы 3.2 для каждого $\lambda \in \Pi \setminus \Pi_0$ существует резольвента $R_\lambda(\hat{H}) \in L(\mathcal{H})$. Следовательно, $\sigma(\hat{H}) \subset \mathbb{C} \setminus (\Pi \setminus \Pi_0) = \sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \Pi_0$. Однако произвольная точка $\lambda \in \Pi_0$ является изолированной в Π_0 , следовательно, она изолирована также в $\sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \Pi_0$, и в силу леммы 3.3 число λ является конечнократным собственным значением оператора $\hat{H}$, т.е. $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(\hat{H})$. Отсюда получим, что $\sigma_{\text{ess}}(\hat{H}) \subset \sigma_0 \cup \sigma_1 \cup \sigma_2$.

4. “ТРЕХЧАСТИЧНЫЙ” ОПЕРАТОР ТРИПЛЕТА

Пусть $\mathbb{Z}^\nu$ – ν -мерная целочисленная решетка, σ – множество значений спина электрона, т.е. $\sigma = \{-1/2, 1/2\}$. Через $\tilde{l}_2 = l_2(\mathbb{Z}^\nu \times \sigma)$ обозначим гильбертово пространство квадратично-суммируемых функций, определенных на $\mathbb{Z}^\nu \times \sigma$, т.е. для любой

$f \in \tilde{l}$ мы имеем $f = f(m, \gamma)$, где $m \in \mathbb{Z}^\nu$, $\gamma \in \sigma$, и

$$\sum_{m \in \mathbb{Z}^\nu, \gamma \in \sigma} |f(m, \gamma)|^2 < \infty.$$

Скалярное произведение для функций $f, g \in \tilde{l}_2$ определяется по формуле

$$(f, g) = \sum_{s \in \mathbb{Z}^\nu \times \sigma} f(s) \overline{g(s)}, \quad s = (m, \gamma).$$

Обозначим через F и F_{as} соответственно пространство Фока над $\tilde{l}_2$ и антисимметричное пространство Фока над $\tilde{l}_2$ [5].

Рассмотрим на решетке $\mathbb{Z}^3$ два электрона и одну примесь. Допустим, что примесь находится в узле $0 \in \mathbb{Z}^3$. Тогда гамильтониан в модели Хаббарда имеет вид [2], [3]

$$H = \tilde{H} + H_0,$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \alpha \sum_{\substack{m \in \mathbb{Z}^3 \\ \gamma = \uparrow, \downarrow}} a_{m\gamma}^+ a_{m\gamma} + \beta \sum_{\substack{m \in \mathbb{Z}^3, \tau = \pm e_j \\ \gamma = \uparrow, \downarrow}} a_{m\gamma}^+ a_{m+\tau, \gamma} + \mu \sum_{m \in \mathbb{Z}^3} n_{m\uparrow} n_{m\downarrow}, \\ H_0 &= (\alpha_0 - \alpha) \sum_{\gamma} a_{0\gamma}^+ a_{0\gamma} + (\beta_0 - \beta) \sum_{\tau, \gamma} (a_{0\gamma}^+ a_{\tau\gamma} + a_{\tau\gamma}^+ a_{0\gamma}) + (\mu_0 - \mu) n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}. \end{aligned}$$

Здесь $\alpha_{m\gamma}^+ (a_{m\gamma})$ – оператор рождения (уничтожения) в узле $m \in \mathbb{Z}^3$ электрона с проекцией спина $\uparrow, \downarrow$ (через $\uparrow$ и $\downarrow$ обозначены соответственно значения спина $-1/2$ и $1/2$); $n_{m\gamma} = \alpha_{m\gamma}^+ \alpha_{m\gamma}$; $\pm e_j$ – единичные орты, $j = 1, 2, 3$; α_0 (α) – энергия электрона на примесном (регулярном) узле; β_0 (β) – интеграл переноса электрона с примесного (регулярного) узла на ближайший; μ_0 (μ) – параметр кулоновского взаимодействия двух электронов на примесном (регулярном) узле. В дальнейшем для удобства будем считать, что $\beta > 0$. Гамильтониан H действует в пространстве F_{as} .

Пусть φ_0 – вакуумный вектор в пространстве F . Триплетному состоянию соответствуют свободное движение двух электронов на решетке и следующие базисные функции [2], [4]:

$$t_{mn}^{-1} = a_{m\downarrow}^+ a_{n\downarrow}^+ \varphi_0, \quad t_{mn}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{m\uparrow}^+ a_{n\downarrow}^+ + a_{m\downarrow}^+ a_{n\uparrow}^+) \varphi_0, \quad t_{mn}^1 = a_{m\uparrow}^+ a_{n\uparrow}^+ \varphi_0.$$

Подпространство $\tilde{F}_k^t$, $k \in \{-1; 0; 1\}$, соответствующее триплетному состоянию, состоит из множества всех векторов ψ вида

$$\psi = \sum_{m, n \in \mathbb{Z}^3} \tilde{f}(m, n) t_{mn}^k, \quad \tilde{f} \in l_2^{\text{as}},$$

где l_2^{as} – пространство антисимметричных функций из $l_2(\mathbb{Z}^3 \times \mathbb{Z}^3)$ [2].

Одночастичное пространство $\tilde{F}_1$ состоит из всех векторов ϕ вида

$$\phi = \sum_{m \in \mathbb{Z}^3} \tilde{f}(m) t_m, \quad \tilde{f} \in l_2(\mathbb{Z}^3),$$

где $t_m = a_{m\downarrow}^+ \varphi_0$, $m \in \mathbb{Z}^3$.

Рассмотрим ограниченный самосопряженный оператор H^t , действующий в l_2^{as} по формуле

$$\begin{aligned} (H^t f)(m, n) = & 2\alpha f(m, n) + \beta \sum_{\tau} (f(m + \tau, n) + f(m, n + \tau)) + \\ & + \varepsilon_1 (\delta_{m0} + \delta_{n0}) f(m, n) + \varepsilon_2 \sum_{\tau} (\delta_{m0} f(m + \tau, n) + \delta_{n0} f(m, n + \tau)) + \\ & + \varepsilon_2 \sum_{\tau} (\delta_{m\tau} f(m - \tau, n) + \delta_{n\tau} f(m, n - \tau)), \end{aligned} \quad (4.1)$$

где δ_{mn} – символ Кронекера, τ означает суммирование по ближайшим соседям в решетке $\mathbb{Z}^3$, т.е. $\tau \in \{\pm e_j\}$, $\varepsilon_1 = \alpha_0 - \alpha$, $\varepsilon_2 = \beta_0 - \beta$.

Наряду с оператором H^t будем рассматривать самосопряженный оператор $\mathbf{h}$, действующий в пространстве $l_2(\mathbb{Z}^3)$ по формуле

$$\begin{aligned} (\mathbf{h}f)(m) = & \alpha f(m) + \beta \sum_{\tau} f(m + \tau) + \varepsilon_1 \delta_{m0} f(m) + \\ & + \varepsilon_2 \sum_{\tau} (\delta_{m0} f(m + \tau) + \delta_{n0} f(m - \tau)). \end{aligned} \quad (4.2)$$

ЛЕММА 4.1. *Пространства $\tilde{F}_k^t$, $k \in \{-1, 0, 1\}$, инвариантны относительно оператора H . Операторы $\tilde{H}_k^t = H|_{\tilde{F}_k^t}$ являются ограниченными самосопряженными в $\tilde{F}_k^t$ и действуют по формуле*

$$\tilde{H}_k^t \psi = \sum_{m,n} (H^t f)(m, n) t_{mn}^k, \quad \psi \in \tilde{F}_k^t,$$

где оператор H^t действует в l_2^{as} в соответствии с (4.1).

ЛЕММА 4.2. *Пространство $\tilde{F}_1$ инвариантно относительно оператора H . Оператор $\tilde{H}_1 = H|_{\tilde{F}_1}$ является ограниченным самосопряженным в $\tilde{F}_1^t$ и действует по формуле*

$$\tilde{H}_1 \phi = \sum_m (\mathbf{h}f)(m) t_m, \quad \phi \in \tilde{F}_1,$$

где оператор $\mathbf{h}$ определен в (4.2).

Доказательство обеих лемм можно получить, действуя гамильтонианом H на векторы $\psi \in \tilde{F}_k^t$ и $\phi \in \tilde{F}_1$, пользуясь антикоммутационными соотношениями операторов рождения и уничтожения

$$\{a_{m\gamma}, a_{n\beta}^+\} = \delta_{mn} \delta_{n\beta}, \quad \{a_{m\gamma}, a_{n\beta}\} = a_{m\gamma}^+ a_{n\beta}^+ = \theta,$$

и свойством $a_{m\gamma} = \theta$.

Из критерия Вейля [5] следует, что

$$\sigma(\tilde{H}_k^t) = \sigma(H^t), \quad k \in \{-1, 0, 1\}, \quad \sigma(\tilde{H}_1) = \sigma(\mathbf{h}).$$

Таким образом, для анализа спектров операторов $\tilde{H}_k^t$ и $\tilde{H}_1$ достаточно изучить соответственно спектры операторов H^t (4.1) и $\mathbf{h}$ (4.2).

Оператор H^t будем называть “*трехчастичным*” оператором триплета (два электрона и одна примесь), а оператор $\mathbf{h}$ – “*двухчастичным*” оператором (один электрон и одна примесь).

В импульсном представлении операторы H^t и $\mathbf{h}$ действуют соответственно в гильбертовых пространствах L_2^{as} и $L_2(T^3)$ по следующим формулам:

$$\begin{aligned} H^t f(x, y) &= \{u(x) + u(y)\}f(x, y) + \\ &+ \int_{T^3} \int_{T^3} (K(x, s)\delta(y - t) + K(y, t)\delta(x - s))f(s, t) ds dt, \quad f \in L_2^{\text{as}}, \\ \mathbf{h}f(x) &= u(x)f(x) + \int_{T^3} K(x, s)f(s) ds, \quad f \in L_2(T^3), \end{aligned}$$

где T^3 – трехмерный тор, L_2^{as} – подпространство антисимметричных функций в $L_2(T^3 \times T^3)$, $u(x) = \alpha + \beta h_0(x)$, $K(x, s) = \varepsilon_1 + \varepsilon_2(h_0(x) + h_0(s))$, $h_0(x) = 2 \sum_{j=1}^3 \cos x_j$, $\delta(x)$ – трехмерная дельта-функция Дирака на T^3 .

Пусть $p(x)$ – вещественнозначная непрерывная функция на T^ν , $k(x, s) \in L_2(T^\nu \times T^\nu)$ и $k(x, s) = \overline{k(s, x)}$, $x, s \in T^\nu$. Рассмотрим операторы U_0 и U в $L_2(T^\nu)$, действующие по формулам

$$U_0 f(x) = p(x)f(x), \quad U f(x) = \int_{T^\nu} k(x, s)f(s) ds.$$

В соответствии с теоремой Вейля о существенном спектре [8] существенный спектр самосопряженного оператора $U_0 + U$ не зависит от ядра $k(x, s)$ и совпадает с отрезком $[m_\nu, M_\nu]$, т.е. $\sigma_{\text{ess}}(U_0) = [m_\nu, M_\nu]$, где $m_\nu = \min_{x \in T^\nu} p(x)$ и $M_\nu = \max_{x \in T^\nu} p(x)$.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.1. Число $z \in \mathbb{C} \setminus [m_\nu, M_\nu]$ является собственным значением оператора $U_0 + U$ тогда и только тогда, когда число $\lambda = -1$ является собственным значением оператора $V(z)$, действующего в $L_2(T^\nu)$ по формуле

$$V(z)f(x) = \int_{T^\nu} \frac{k(x, y)}{u(y) - z} f(y) dy.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Необходимость. Пусть $z \in \mathbb{C} \setminus [m_\nu, M_\nu]$ – собственное значение оператора $U_0 + U$ и $f \in L_2(T^\nu)$ – соответствующая собственная функция, т.е.

$$u(x)f(x) + \int_{T^\nu} k(x, y)f(y) dy = zf(x) \quad (4.3)$$

или

$$(u(x) - z)f(x) + \int_{T^\nu} k(x, y)f(y) dy = 0.$$

Обозначая через $\varphi(x)$ функцию $(u(x) - z)f(x)$, имеем

$$V(z)\varphi(x) = \int_{T^\nu} \frac{k(x, y)}{u(y) - z} \varphi(y) dy = -\varphi(x),$$

т.е. $\lambda = -1$ есть собственное значение, а $\varphi \in L_2(T^\nu)$ – соответствующая собственная функция оператора $V(z)$.

Достаточность. Пусть $\lambda = -1$ является собственным значением оператора $V(z)$ и φ – соответствующая собственная функция, т.е.

$$V(z)\varphi(x) = -\varphi(x).$$

Тогда

$$f(x) = \frac{\varphi(x)}{u(x) - z} \in L_2(T^\nu)$$

и $f \neq 0$, при этом функция $f(x)$ удовлетворяет уравнению (4.3).

Из предложения 4.1 и теоремы Фредгольма [7] следует

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 4.2. Число $z \in \mathbb{C} \setminus [m_\nu, M_\nu]$ является собственным значением оператора $U_0 + U$ тогда и только тогда, когда $\Delta(z) = 0$, где $\Delta(z)$ – детерминант Фредгольма оператора $I + V(z)$. Всякое собственное значение $z \in \mathbb{C} \setminus [m_\nu, M_\nu]$ оператора $U_0 + U$ имеет конечную кратность.

Легко заметить, что $\sigma_{\text{ess}}(\mathbf{h}) = [m, M]$, где $m = \min u(x) = \alpha - 6\beta$ и $M = \max u(x) = \alpha + 6\beta$.

ЛЕММА 4.3. Число $z \in \mathbb{C} \setminus [m, M]$ является собственным значением оператора $\mathbf{h}$ тогда и только тогда, когда

$$\Delta_0(z) = \left(\frac{\beta_0}{\beta}\right)^2 + \left\{ \left(\left(\frac{\beta_0}{\beta}\right)^2 - 1 \right) (z - \alpha) + 2\varepsilon_1 \right\} \mathfrak{F}_0(z) = 0,$$

где $\mathfrak{F}_0(z) = \int_{T^3} (u(x) - z)^{-1} dx$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Оператор $\mathbf{h}$ является частным случаем оператора $U_0 + U$. Для детерминанта Фредгольма $\Delta(z)$ оператора $I + V(z)$ имеем

$$\Delta(z) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d_n(z)}{n!},$$

где

$$d_n(z) = \int_{T^3} \cdots \int_{T^3} \begin{vmatrix} k(\xi_1, \xi_1) & \cdots & k(\xi_1, \xi_n) \\ \vdots & & \vdots \\ k(\xi_n, \xi_1) & \cdots & k(\xi_n, \xi_n) \end{vmatrix} \frac{d\xi_1 \cdots d\xi_n}{\prod_{i=1}^n (u(\xi_i) - z)}.$$

Пользуясь явным видом ядра $k(x, s) = K(x, s) = \varepsilon_1 + \varepsilon_2(h_0(x) + h_0(s))$, можно показать, что $d_n(z) \equiv 0$ при любом $n \geq 3$.

Таким образом, имеем

$$\Delta(z) = 1 + d_1(z) + \frac{d_2(z)}{2}. \quad (4.4)$$

Нетрудно проверить, что

$$d_1(z) = 2(\varepsilon_1 \mathfrak{F}_0(z) + \varepsilon_2 \mathfrak{F}_1(z)), \quad (4.5)$$

$$d_2(z) = 2\varepsilon_2^2(\mathfrak{F}_1^2(z) - \mathfrak{F}_0(z)\mathfrak{F}_2(z)). \quad (4.6)$$

Здесь

$$\mathfrak{Z}_k(z) = \int_{T^3} \frac{h_0^k(x) dx}{u(x) - z}, \quad k = 0, 1, 2.$$

При $\beta \neq 0$ получим следующие равенства:

$$\mathfrak{Z}_1(z) = \frac{1 - (\alpha - z)\mathfrak{Z}_0(z)}{\beta}, \quad \mathfrak{Z}_2(z) = \frac{((\alpha - z)\mathfrak{Z}_0(z) - 1)(\alpha - z)}{\beta^2}.$$

Подставляя эти выражения в (4.5), (4.6) и упростив (4.4), получим, что $\Delta(z) = \Delta_0(z)$. Отсюда и из предложения 4.2 следует доказательство леммы 4.3.

Всякая критическая точка x^{cr} функции $u(x)$ имеет вид $x^{\text{cr}} = (\pi m, \pi n, \pi k)$, где $m, n, k \in \{0, 1, 2\}$. Следовательно, значение гессиана $D_u(x) = -8\beta^3 \cos x_1 \cos x_2 \cos x_3$ функции $u(x)$ в любой критической точке x^{cr} отлично от нуля, т.е. всякая критическая точка функции $u(x)$ является невырожденной. Отсюда следует, что при $z \rightarrow m - 0$ и $z \rightarrow M + 0$ интеграл $\mathfrak{Z}_0(z)$ стремится к конечному пределу [9]. Положим

$$A = \lim_{z \rightarrow m-0} \mathfrak{Z}_0(z) \neq 0, \quad B = \lim_{z \rightarrow M+0} \mathfrak{Z}_0(z) \neq 0.$$

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} k_1 &= 2 \left\{ \varepsilon_1 - 3 \left(\left(\frac{\beta_0^2}{\beta} \right)^2 - 1 \right) \beta \right\} + \left(\frac{\beta_0^2}{\beta} \right)^2 A^{-1}, \\ k_2 &= 2 \left\{ \varepsilon_1 + 3 \left(\left(\frac{\beta_0^2}{\beta} \right)^2 - 1 \right) \beta \right\} + \left(\frac{\beta_0^2}{\beta} \right)^2 B^{-1}. \end{aligned}$$

При $z \in \mathbb{C} \setminus [m, M]$ определим функцию $Q(z) = \Delta_0(z)/\mathfrak{Z}_0(z)$. Очевидно, что $\mathfrak{Z}_0(z) \neq 0$ при $z \notin [m, M]$. Отсюда следует, что если точка $z_0 \notin [m, M]$ является нулем функции $\Delta_0(z)$, то она также является нулем функции $Q(z)$, и наоборот.

ЛЕММА 4.4. Пусть $\varepsilon_2 \neq 0$, $\beta_0 \neq 0$. Тогда функция $Q(z)$ на полуоси $(-\infty, m)$ строго монотонно убывает от $+\infty$ до k_1 , а на полуоси (M, ∞) строго монотонно убывает от k_2 до $-\infty$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Положим $\omega = (\beta_0/\beta)^2$. Тогда

$$Q(z) = \frac{\omega}{\mathfrak{Z}_0(z)} + (\omega - 1)(z - \alpha) + 2\varepsilon_1. \quad (4.7)$$

Дифференцируя функцию $Q(z)$ по $z \in \Pi = \mathbb{R} \setminus [m, M]$, получим

$$Q'(z) = -\frac{\omega}{\mathfrak{Z}_0^2(z)} \mathfrak{Z}_0'(z) + \omega - 1. \quad (4.8)$$

В силу неравенства Шварца для $z \in \Pi$ имеем

$$|\mathfrak{Z}_0(z)| \leq \sqrt{\int_{T^3} \frac{dx}{(u(x) - z)^2}} \sqrt{\int_{T^3} 1^2 dx} = \sqrt{\mathfrak{Z}_0'(z)}.$$

Следовательно, $\mathfrak{Z}_0^2(z) \leq \mathfrak{Z}_0'(z)$. Отсюда и из (4.8) вытекает, что $Q'(z) \leq -1$, т.е. $Q'(z) < 0$ при $z \in \Pi$. Это означает, что функция $Q(z)$ на Π является строго монотонно убывающей.

Пусть теперь $z < m$. Легко заметить, что $0 < \Im_0(z) < (m - z)^{-1}$ при $z \in (-\infty, m)$. Отсюда и из (4.7) имеем

$$Q(z) \geq \omega(m - z) + (\omega - 1)(z - \alpha) + 2\varepsilon_1 = -z + 2\varepsilon_1 + \omega m - (\omega - 1)\alpha.$$

Таким образом, $\lim_{z \rightarrow -\infty} Q(z) = +\infty$. Аналогично получаем, что $\lim_{z \rightarrow \infty} Q(z) = -\infty$. Учитывая в равенстве (4.7) конечность значений пределов $A = \lim_{z \rightarrow m-0} \Im_0(z)$ и $B = \lim_{z \rightarrow M+0} \Im_0(z)$, имеем $k_1 = \lim_{z \rightarrow m-0} Q(z)$ и $k_2 = \lim_{z \rightarrow M+0} Q(z)$.

Это означает, что функция $Q(z)$ на полуоси $(-\infty, m)$ (на полуоси (M, ∞)) строго монотонно убывает от $+\infty$ (от k_2) до k_1 (до $-\infty$).

ТЕОРЕМА 4.1. Пусть $\varepsilon_2 \neq 0, \beta_0 \neq 0$. Тогда:

а) если $k_1 < 0$ и $k_2 > 0$, то оператор $\mathbf{h}$ вне существенного спектра имеет два собственных значения z_1 и z_2 , причем z_1 лежит ниже, а z_2 — выше существенного спектра;

б) если $k_1 < 0$ и $k_2 \leq 0$ ($k_1 \geq 0$ и $k_2 > 0$), то оператор $\mathbf{h}$ вне существенного спектра имеет единственное собственное значение $z = z_0$, причем оно лежит ниже (выше) существенного спектра;

в) если $k_1 \geq 0$ и $k_2 \leq 0$, то у оператора $\mathbf{h}$ вне существенного спектра нет собственных значений, т.е. $\sigma(\mathbf{h}) = \sigma_{\text{ess}}(\mathbf{h}) = \sigma(\mathbf{h}_0)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО непосредственно следует из лемм 4.3 и 4.4.

Если на решетке $\mathbb{Z}^3$ отсутствует примесь, то оператор H^t совпадает с оператором триплета H_0^t на беспримесной решетке [2], действующим по формуле $H_0^t f(x, y) = (u(x) + u(y))f(x, y)$, $f \in L_2^{\text{as}}$. При этом $\sigma(H_0^t) = [2m, 2M]$. Для спектра гамильтониана H^t имеет место

ТЕОРЕМА 4.2. Пусть $\varepsilon_2 \neq 0, \beta_0 \neq 0$. Тогда:

а) если $k_1 < 0$ и $k_2 > 0$, то существуют числа $z_1 < m$ и $z_2 > M$ такие, что $\Delta_0(z_1) = 0$ и $\Delta_0(z_2) = 0$, для которых

$$\sigma(H^t) = \sigma(H_0^t) \cup [m + z_1, M + z_1] \cup [m + z_2, M + z_2] \cup \{2z_1, 2z_2, z_1 + z_2\},$$

т.е.

$$\sigma_{\text{ess}}(H^t) = \sigma(H_0^t) \cup [m + z_1, M + z_1] \cup [m + z_2, M + z_2];$$

б) если $k_1 < 0$ и $k_2 \leq 0$ ($k_1 \geq 0$ и $k_2 > 0$), то существует число $z_0 < m$ ($z_0 > M$) такое, что $\Delta(z_0) = 0$, для которого

$$\sigma(H^t) = \sigma(H_0^t) \cup [m + z_0, M + z_0] \cup \{2z_0\},$$

т.е.

$$\sigma_{\text{ess}}(H^t) = \sigma(H_0^t) \cup [m + z_0, M + z_0], \quad \sigma_{\text{disc}}(H^t) = \{2z_0\};$$

в) если $k_1 \geq 0$ и $k_2 \leq 0$, то спектр оператора H^t совпадает со спектром оператора H_0^t , т.е.

$$\sigma(H^t) = \sigma(H_0^t).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В гильбертовом пространстве $L_2(T^3) \otimes L_2(T^3)$ рассмотрим самосопряженный оператор $W = \mathbf{h} \otimes E + E \otimes \mathbf{h}$. Для спектра оператора W имеем следующее равенство [5]:

$$\sigma(W) = \sigma(\mathbf{h}) + \sigma(\mathbf{h}). \quad (4.9)$$

С другой стороны, учитывая равенство

$$\begin{aligned} H^t f(x, y) = & \left(u(x)f(x, y) + \int_{T^3} K(x, s)f(s, y) ds \right) + \\ & + \left(u(y)f(x, y) + \int_{T^3} K(y, t)f(x, t) dt \right), \end{aligned}$$

мы можем установить унитарную эквивалентность операторов H^t и W . Следовательно, пользуясь равенством (4.9), имеем

$$\sigma(H^t) = \sigma(W) = [2m, 2M] \cup \left(\bigcup_{\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(\mathbf{h})} [m + \lambda, M + \lambda] \right) \cup D_0, \quad (4.10)$$

где $D_0 = \{\omega: \omega = \lambda + \mu \notin [2m, 2M], \lambda, \mu \in \sigma_{\text{disc}}(\mathbf{h})\}$.

Теперь рассмотрим операторы $\hat{H}_1$ и $\hat{H}_2$ такие, что

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 f(x, y) &= (u(x) + u(y))f(x, y) + \int_{T^3} K(x, s)f(s, y) ds, & f \in L_2(\Omega \times \Omega), \\ \hat{H}_2 f(x, y) &= (u(x) + u(y))f(x, y) + \int_{T^3} K(y, t)f(x, t) dt, & f \in L_2(\Omega \times \Omega). \end{aligned}$$

Тогда $\hat{H}_1 = \mathbf{h} \otimes E + E \otimes \mathbf{h}_0$ и $\hat{H}_2 = \mathbf{h}_0 \otimes E + E \otimes \mathbf{h}$, где $\mathbf{h}_0$ – оператор умножения на функцию $u(x)$ в $L_2(\Omega)$, т.е. $\mathbf{h}_0 \varphi(x) = u(x)\varphi(x)$, $\varphi \in L_2(\Omega)$. Отсюда $\sigma_0 = \sigma(H_0^t) = [2m, 2M]$ и

$$\begin{aligned} \sigma_1 = \sigma(\hat{H}_1) &= \sigma(\mathbf{h}) + \sigma(\mathbf{h}_0) = [2m, 2M] \cup \left(\bigcup_{\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(\mathbf{h})} [m + \lambda, M + \lambda] \right), \\ \sigma_2 = \sigma(\hat{H}_2) &= \sigma(\mathbf{h}_0) + \sigma(\mathbf{h}) = \sigma_1. \end{aligned}$$

Используя теорему 3.3, находим, что

$$\sigma_{\text{ess}}(H^t) = \sigma(H_0^t) \cup \left(\bigcup_{\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(\mathbf{h})} [m + \lambda, M + \lambda] \right), \quad \sigma_{\text{disc}}(H^t) = D_0.$$

Применяем результаты теоремы 4.1 и этим завершаем доказательство теоремы.

ТЕОРЕМА 4.3. Если выполнено неравенство

$$AD < \frac{\sqrt{5} - 1}{2}, \quad (4.11)$$

где $D = |\varepsilon_1| + 12|\varepsilon_2| > 0$, то

$$\sigma(\mathbf{h}) = \sigma(h_0), \quad \sigma(H^t) = \sigma(H_0^t).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Обозначим через D наибольшее значение функции $|K(x, y)|$ при $x, y \in T^3$. Нетрудно проверить, что $D = |\varepsilon_1| + 12|\varepsilon_2|$. Следовательно, для членов $d_1(z)$ и $d_2(z)$ детерминанта Фредгольма имеем оценки $|d_1(z)| \leq D|\mathfrak{I}_0(z)|$ и $|d_2(z)| \leq 2D^2\mathfrak{I}_0^2(z)$. Учитывая конечность пределов $A = \lim_{z \rightarrow m-0} \mathfrak{I}_0(z)$ и $B = \lim_{z \rightarrow M+0} \mathfrak{I}_0(z)$, мы можем определить значение функции $\mathfrak{I}_0(z)$ в точках $z = m$ и $z = M$ по непрерывности:

$$\mathfrak{I}_0(m) = \lim_{z \rightarrow m-0} \mathfrak{I}_0(z) = A > 0, \quad \mathfrak{I}_0(M) = \lim_{z \rightarrow M+0} \mathfrak{I}_0(z) = B < 0.$$

Таким образом, функция $\mathfrak{I}_0(z)$ становится непрерывной на полуинтервалах $(-\infty, m]$ и $[M, \infty)$. Из очевидного равенства $\mathfrak{I}_0(m) = -\mathfrak{I}_0(M)$, т.е. $A = -B$, получим, что

$$|d_1(z)| \leq AD, \quad |d_2(z)| \leq 2(AD)^2. \quad (4.12)$$

Пусть выполнено условие (4.11). Тогда

$$AD + (AD)^2 < 1. \quad (4.13)$$

При этом условии функция $\Delta_0(z)$ на $\Pi = \mathbb{R} \setminus [m, M]$ не обращается в нуль, так как из $\Delta_0(z) = 0$ следует, что $d_1(z) + d_2(z)/2 = -1$. С другой стороны, с учетом неравенств (4.12) и (4.13) мы имеем $|d_1(z) + d_2(z)/2| < 1$. Это означает, что функция $\Delta_0(z)$ на Π не может обращаться в нуль. Тогда в силу леммы 4.3 оператор $\mathbf{h}$ вне существенного спектра не имеет ни одного собственного значения, т.е. $\sigma(\mathbf{h}) = \sigma(\mathbf{h}_0)$. Отсюда и из (4.10) получим, что $\sigma(H^t) = \sigma(H_0)$.

Список литературы

- [1] D. Mattis, *Rev. Mod. Phys.*, **58** (1986), 361–379; E. Lieb, *Phys. Rev. Lett.*, **62** (1989), 1201–1204; A. M. Tsvelick, P. B. Wiegman, *Adv. Phys.*, **32** (1983), 453–713.
- [2] Б. В. Карпенко, В. В. Дякин, Г. А. Будрина, *ФММ*, **61**:4 (1986), 702–706.
- [3] Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитно-упорядоченных систем*, Наука, М., 1974.
- [4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М., 1974.
- [5] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики, т. 1. Функциональный анализ*, Мир, М., 1977.
- [6] Ю. Х. Эшкабилов, *Докл. АН РУз*, 2006.
- [7] Ф. Трикоми, *Интегральные уравнения*, ИЛ, М., 1960.
- [8] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики, т. 4. Анализ операторов*, Мир, М., 1982.
- [9] М. Ю. Федорюк, *Асимптотика: интегралы и ряды*, Наука, М., 1987.

Поступила в редакцию 2.12.2003,
после доработки 10.04.2006