Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Н. Демков, П. Б. Курасов, Теорема Вигнера–фон
Неймана: отталкивание уровней и вырожденные состо-
яния, *ТМФ*, 2007, том 153, номер 1, 68–85

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6122>

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

Параметры загрузки:

IP: 3.81.55.215

26 апреля 2023 г., 17:30:39

© 2007 г.

Ю. Н. Демков*, П. Б. Курасов*[†]

ТЕОРЕМА ВИГНЕРА–ФОН НЕЙМАНА: ОТТАЛКИВАНИЕ УРОВНЕЙ И ВЫРОЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Изучаются спектральные свойства операторов Шредингера с точечными взаимодействиями. Основное внимание уделено взаимосвязи между отталкиванием уровней (теорема Вигнера–фон Неймана) и симметрией расположения точечных взаимодействий. Явное решение задачи позволяет наблюдать отталкивание между уровнями в случае двух центров. Для большего числа центров изучаются семейства точечных взаимодействий, приводящие к максимальному вырождению.

Ключевые слова: теорема Вигнера–фон Неймана, потенциалы нулевого радиуса, теория расширений, обратная спектральная задача.

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод расширений в теории операторов, используемый в математике, и его специальный случай, называемый в физике методом потенциалов нулевого радиуса, быстро развивается в последнее время, что объясняется его универсальностью и возможностью применения к многочисленным физическим проблемам, приводящего к существенному упрощению (обычно к алгебраизации задачи). Физические приложения рассматриваются в книге [1], а математическая теория изложена в книге [2]. В отличие от других приближенных методов, при применении метода потенциалов нулевого радиуса с самого начала присутствует ветвь непрерывного спектра и сохраняются такие важные свойства изначальной задачи, как унитарность (в отличие от приближения Борна). В многочисленных задачах физики объекты малого радиуса разнесены на большие расстояния (галактики, звезды, планеты, атомы и молекулы, ядра и элементарные частицы). За исключением немногих экзотических случаев, только проблемы твердого тела не имеют подобных свойств, но даже в твердом теле можно рассматривать возбуждения как квазичастицы, применяя тот же метод.

*Научно-исследовательский институт физики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия

[†]Dept. of Mathematics, Lund University, Lund, Sweden. E-mail: pak@math.su.se

Используя метод потенциалов нулевого радиуса, мы получаем уникальную возможность решения квантово-механических задач в явном виде. Этот метод является обобщением метода сепарабельных потенциалов, где взаимодействие задается при помощи нелокальных проекторов, на тот случай, когда в качестве вектора, задающего такой проектор, выбирается δ -функция, что позволяет сохранить локальность оператора.

Несмотря на то что теория потенциалов нулевого радиуса хорошо развита, случай бесконечного числа центров или даже нескольких центров все еще не изучен полностью. В настоящей работе мы исследуем свойства этих моделей с точки зрения обратной спектральной задачи и теоремы Вигнера–фон Неймана.

Знаменитая теорема Вигнера–фон Неймана [3] описывает вероятность того, что конечная матрица имеет вырожденное собственное значение. Эта вероятность оказывается ниже, чем можно предположить: коразмерность множества матриц с двойным собственным значением всегда больше 1. Следовательно, для гамильтонианов, зависящих от времени, вероятность того, что две энергетические кривые пересекутся, чрезвычайно мала, и это явление получило название межуровневого отталкивания. Обычно два уровня пересекаются, только если соответствующие собственные функции имеют различную симметрию. Следовательно, появления вырожденных уровней можно ожидать в первую очередь у гамильтонианов, обладающих симметрией. В настоящей работе мы изучаем это явление на примере гамильтонианов с точечными взаимодействиями в $\mathbb{R}^1$ и $\mathbb{R}^3$. Подобные операторы широко используются в квантовой механике и атомной физике для моделирования различных физических процессов (см. работы [1], [2], [4]–[6], где приведены многочисленные ссылки).

Каждый гамильтониан с числом точечных взаимодействий N может иметь не более N собственных значений. Элементарный анализ показывает, что собственные значения кратности N отсутствуют. Основной задачей данной работы является изучение возможности возникновения собственных значений максимально возможной кратности $N - 1$.

Работа построена следующим образом. В разделе 2 математически строго вводятся операторы Шредингера с точечными взаимодействиями (следуя в основном книгам [2], [1]). Поскольку два локальных точечных взаимодействия не могут создать вырожденный уровень (даже кратности 2), мы изучим межуровневое отталкивание для случая двух центров в разделе 3. Кратность уровней для случая трех, четырех и пяти центров изучается в разделе 4. Показано, что симметрия расположения центров играет важную роль при образовании сильно вырожденных состояний.

2. ГАМИЛЬТониАНЫ С ТОЧЕЧНЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

Оператор Шредингера с N локальными δ -взаимодействиями в точках $\{y^n\}_{n=1}^N$ формально задается выражением

$$L_\alpha = -\Delta + \sum_{n=1}^N \alpha_n \delta(\cdot - y^n), \quad (1)$$

где Δ есть оператор Лапласа и $\delta(\cdot - y^n)$ – дельта-функция с носителем в точке y^n . Без ограничения общности мы можем предположить, что все точки y^n различны.

В дальнейшем мы дадим точное определение оператора L_α . Следует отметить, что оператор, соответствующий формальному выражению (1), однозначно определен в $\mathbb{R}^1$, но для определения этого оператора в $\mathbb{R}^3$ необходимо принять во внимание дополнительные соображения.

Рассмотрим операторы Лапласа

$$-\Delta^1 = -\frac{d^2}{dx^2} \quad \text{в } L_2(\mathbb{R}^1); \quad -\Delta^3 = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \quad \text{в } L_2(\mathbb{R}^3), \quad (2)$$

которые являются самосопряженными, если определены на пространстве Соболева $W_2^2(\mathbb{R}^j)$. Здесь x и $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ обозначают координаты в $\mathbb{R}^1$ и $\mathbb{R}^3$, соответственно. Тогда оператор, соответствующий формальному выражению (1), является одним из самосопряженных расширений симметричного сужения $-\Delta^{j0}$ оператора $-\Delta^j$, $j = 1, 3$, на множество функций, обращающихся в нуль в точках взаимодействия:

$$-\Delta^{j0} = -\Delta^j|_{\{\psi \in W_2^2(\mathbb{R}^j): \psi(y^n)=0, n=1,2,\dots,N\}}. \quad (3)$$

Соответствующие дефектные элементы для $\lambda = -\chi^2$ суть просто решения уравнений $-\Delta^{j0*}g + \chi^2 g = \delta(x - y^n)$:

$$g^1(x, y^n) = \frac{e^{-\chi|x-y^n|}}{2\chi}, \quad g^3(x, y^n) = \frac{e^{-\chi|x-y^n|}}{4\pi|x-y^n|}, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (4)$$

Следовательно, индексы дефекта суженного оператора равны (N, N) . Области определения сопряженных операторов суть

$$\begin{aligned} \text{Dom}(-\Delta^{10*}) &= W_2^2(\mathbb{R}^1 \setminus \{y^n\}_{n=1}^N) \cap C(\mathbb{R}^1), \\ \text{Dom}(-\Delta^{30*}) &= W_2^2(\mathbb{R}^3 \setminus \{y^n\}_{n=1}^N). \end{aligned} \quad (5)$$

Для описания самосопряженных расширений $-\Delta^{j0}$ мы будем использовать граничные значения функций из области определения сопряженного оператора:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\sim_{x \rightarrow y^n} -\frac{1}{2}|x - y^n| \psi_{-n} + \psi_{0n} + o(1) \quad \text{для } \mathbb{R}^1, \\ \psi(x) &\sim_{x \rightarrow y^n} \frac{1}{4\pi|x - y^n|} \psi_{-n} + \psi_{0n} + o(1) \quad \text{для } \mathbb{R}^3. \end{aligned} \quad (6)$$

Тогда граничные формы сопряженных операторов даются выражениями

$$\langle (-\Delta^{j0*})u, v \rangle - \langle u, (-\Delta^{j0*})v \rangle = \sum_{n=1}^N (u_{0n} \bar{v}_{-n} - u_{-n} \bar{v}_{0n}). \quad (7)$$

Введем диагональную матрицу $\alpha = \text{diag}\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Оператор L_α^j есть сужение сопряженного оператора $-\Delta^{j0*}$ на множество функций $\psi \in \text{Dom}(-\Delta^{j0*})$, удовлетворяющих граничным условиям

$$\vec{\psi}_0 = -\alpha^{-1} \vec{\psi}_-, \quad (8)$$

где $\vec{\psi}_- = (\psi_{-1}, \psi_{-2}, \dots, \psi_{-N})^T$ и $\vec{\psi}_0 = (\psi_{01}, \psi_{02}, \dots, \psi_{0N})^T$ есть векторы граничных значений функции ψ . Другими словами, оператор L_α^j совпадает с оператором Лапласа, определенным на функциях, удовлетворяющих условию (8).

В размерности 1 можно доказать, что оператор, соответствующий формальному выражению (1), действительно задается данным определением. В размерности 3 для этого необходимо использовать дополнительные соображения такие, как однородность оператора Лапласа и δ -взаимодействия (см. книгу [5], раздел 1.5.1). Но мы не будем останавливаться на этом моменте, поскольку наши последующие исследования основываются на определении и не зависят от этих предположений.

В дальнейшем будут рассматриваться только локальные точечные взаимодействия, т.е. взаимодействия, соответствующие диагональным матрицам α . Исчерпывающее исследование вопроса, какие точечные взаимодействия являются локальными, приведено в работе [7] (можно показать, что недиагональные матрицы α в условии (8) приводят к нелокальным взаимодействиям). Без ограничения общности предположим, что все коэффициенты α_n отличны от нуля. Если это не так, то множество сингулярных точек y^n , $n = 1, 2, \dots, N$, может быть просто уменьшено.

Резольвента возмущенного оператора L_α может быть вычислена при помощи формулы Крейна [8]–[10], поскольку каждый из операторов L_α^j есть конечномерное возмущение оператора Лапласа $-\Delta^j$ в резольвентном смысле. Следовательно, существенный спектр оператора L_α абсолютно непрерывный и совпадает с интервалом $[0, \infty)$ (он имеет кратность 2 в $\mathbb{R}^1$ и бесконечную кратность в $\mathbb{R}^3$). Число отрицательных собственных значений не может превышать N (ранг возмущения). В дополнение можно показать, что не могут появиться положительные собственные значения. Точечный спектр оператора задается нулями определителя возмущения, который появляется в формуле Крейна.

Уравнение для дискретного спектра можно получить и другим способом, рассматривая следующий анзац для собственных функций:

$$\psi = \sum_{n=1}^N a_n g^j(x, y^n), \quad (9)$$

где $g^j(x, y)$ – функции Грина для оператора Лапласа, заданные выражениями (4). Функция ψ , задаваемая формулой (9), удовлетворяет уравнению для собственной функции при энергии $\lambda = -\chi^2$:

$$L^{j0*} \psi = -\chi^2 \psi, \quad (10)$$

при любых значениях комплексных параметров a_n . Она является собственной функцией тогда и только тогда, когда удовлетворяет граничным условиям (8). Рассмотрим

рим граничные значения функций Грина

$$\begin{aligned}
 g^1 = g^1(x - y^n) \Rightarrow g_{-m}^1 &= \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n, \end{cases} & g_{0m}^1 &= \begin{cases} 1/(2\chi), & m = n, \\ \frac{e^{-\chi|y^n - y^m|}}{2\chi}, & m \neq n, \end{cases} \\
 g^1 = g^1(x - y^n) \Rightarrow g_{-m}^3 &= \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n, \end{cases} & g_{0m}^3 &= \begin{cases} -\chi/(4\pi), & m = n, \\ \frac{e^{-\chi|y^n - y^m|}}{4\pi|y^n - y^m|}, & m \neq n. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{11}$$

Получаем дисперсионные уравнения, определяющие дискретный спектр в $\mathbb{R}^1$ и $\mathbb{R}^3$, соответственно:

$$\det(1 + G^1 + 2\chi\alpha^{-1}) = 0, \tag{12}$$

$$\det(-\chi + G^3 + 4\pi\alpha^{-1}) = 0, \tag{13}$$

где G^j – следующие эрмитовы $(N \times N)$ -матрицы:

$$\begin{aligned}
 G_{nm}^1 &= \begin{cases} e^{-\chi|y^n - y^m|}, & n \neq m, \\ 0, & n = m, \end{cases} \\
 G_{nm}^3 &= \begin{cases} \frac{e^{-\chi|y^n - y^m|}}{|y^n - y^m|}, & n \neq m, \\ 0, & n = m. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{14}$$

В дальнейшем мы будем изучать решения этих дисперсионных уравнений, концентрируя внимание на вырожденности собственных значений.

Наряду с экспоненциально убывающими на бесконечности решениями (соответствующими отрицательным собственным значениям) существуют решения, убывающие степенным образом (соответствующие нулевому собственному значению). Убывание этих функций на бесконечности связано с зависимостью от углов. Так, сферически-симметричные функции убывают как c/r и являются ненормируемыми. Все остальные значения углового момента допустимы (при $E = 0$).

3. ОТТАЛКИВАНИЕ МЕЖДУ УРОВНЯМИ В $\mathbb{R}^1$ И $\mathbb{R}^3$

Два локальных точечных взаимодействия не могут породить вырожденное состояние, поэтому в этом разделе мы изучим отталкивание между уровнями. Оператор с двумя δ -потенциалами может быть параметризован тремя вещественными параметрами – расстоянием между центрами $d > 0$ и силами точечных взаимодействий α_j , $j = 1, 2$.

Рассмотрим сначала случай двух центров в $\mathbb{R}^1$. Дисперсионное уравнение в этом случае задается формулой

$$(1 + 2\chi\alpha_1^{-1})(1 + 2\chi\alpha_2^{-1}) - e^{-2\chi d} = 0. \tag{15}$$

Используя для удобства параметры

$$\gamma_i = -\frac{1}{2}\alpha_i, \quad i = 1, 2, \tag{16}$$

запишем его в виде

$$\frac{(\chi - \gamma_1)(\chi - \gamma_2)}{\gamma_1 \gamma_2} - e^{-2\chi d} = 0. \quad (17)$$

Соответствующий оператор обозначим через $L^1(\gamma_1, \gamma_2)$.

Дисперсионное уравнение для двух центров в $\mathbb{R}^3$ имеет вид

$$(-\chi + 4\pi\alpha_1^{-1})(-\chi + 4\pi\alpha_2^{-1}) - \frac{e^{-2\chi d}}{d^2} = 0. \quad (18)$$

Введем два новых параметра

$$\gamma_j = \frac{4\pi}{\alpha_j}, \quad j = 1, 2, \quad (19)$$

и получим дисперсионное уравнение

$$(\chi - \gamma_1)(\chi - \gamma_2) - \frac{e^{-2\chi d}}{d^2} = 0. \quad (20)$$

Соответствующий оператор будет обозначаться через $L^3(\gamma_1, \gamma_2)$.

Параметры γ_j , введенные только что для одно- и трехмерных задач, могут быть интерпретированы как энергии связанных состояний, соответствующих каждому из двух центров по отдельности.

Рассмотрим оператор Шредингера с одним δ -взаимодействием $-\Delta + \alpha\delta(x)$. Тогда соответствующий оператор имеет одно связанное состояние с энергией

$$E = -\gamma^2 = -\frac{\alpha^2}{4} \quad (21)$$

при условии, что $\alpha < 0$ в $\mathbb{R}^1$, и

$$E = -\gamma^2 = -\frac{(4\pi)^2}{\alpha^2} \quad (22)$$

при условии, что $\alpha > 0$ в $\mathbb{R}^3$.

Энергии, соответствующие отдельным взаимодействиям, могут быть получены из дисперсионных уравнений (17), (20) в пределе $d \rightarrow \infty$. Экспоненциальная функция стремится к нулю, и оба дисперсионных уравнения приобретают вид

$$(\chi - \gamma_1)(\chi - \gamma_2) = 0.$$

Это уравнение имеет два решения $\chi = \gamma_{1,2}$ и определяет энергии двух связанных состояний $E_1 = -\gamma_1^2$, $E_2 = -\gamma_2^2$ при условии, что $\gamma_{1,2} > 0$.

Другая возможность получения этих связанных состояний заключается в рассмотрении предела, когда взаимодействие, соответствующее одному из центров, исчезает. Заметим, что исчезающее взаимодействие $\alpha_j = 0$ формально соответствует $\gamma_j = 0$ в $\mathbb{R}^1$ и $\gamma_j = \infty$ в $\mathbb{R}^3$. Пределом уравнений (17), (20) при $\gamma_2 \rightarrow 0$ и $\gamma_2 \rightarrow \infty$, соответственно, является уравнение

$$\chi - \gamma_1 = 0,$$

которое определяет единственное связанное состояние с энергией $E_1 = -\gamma_1^2$ (при условии, что $\gamma_1 < 0$).

Нам представляется более удобным использовать параметры γ_j вместо α_j для задания операторов с точечными взаимодействиями.

Исследуем число собственных значений в зависимости от значений параметров. Без ограничения общности можно считать, что $\gamma_1 \geq \gamma_2$. Введем следующие обозначения:

$$P^1(\chi) = \frac{(\chi - \gamma_1)(\chi - \gamma_2)}{\gamma_1 \gamma_2},$$

$$P^3(\chi) = (\chi - \gamma_1)(\chi - \gamma_2).$$

Собственные значения оператора $L(\gamma_1, \gamma_2)$ соответствуют положительным (вещественным) решениям дисперсионного уравнения. Заметим, что уравнение (17) имеет одно “паразитное” решение $\chi = 0$, которое является нефизическим, так как в этом случае никакая собственная функция не соответствует энергии $E = 0$; соответствующая функция не лежит в гильбертовом пространстве.

Исследуем три случая, охватывающих все возможные варианты (случаи, когда γ_1 или γ_2 равны нулю, могут быть исключены из рассмотрения), по отдельности для точечных взаимодействий в $\mathbb{R}^1$ и $\mathbb{R}^3$.

1. Случай $\gamma_2 \leq \gamma_1 < 0$. Для положительных χ функции $P^1(\chi)$ и $e^{-2\chi d}$ удовлетворяют неравенству

$$P^1(\chi) \geq 1 \geq e^{-2\chi d},$$

которое является строгим для $\chi \neq 0$. Поэтому уравнение (17) в этом случае не имеет решений в интервале $(0, \infty)$.

Функция P^3 растет до бесконечности при положительных χ , а функция $e^{-2\chi d}/d$ является убывающей. Сравнивая значения функций в нуле, можно сделать вывод, что уравнение (20) имеет одно решение тогда и только тогда, когда

$$\gamma_1 \gamma_2 < \frac{1}{d^2}. \quad (23)$$

2. Случай $\gamma_2 < 0 < \gamma_1$. Функции $P^1(\chi)$ и $e^{-2\chi d}$ равны 1 при $\chi = 0$. Вторая производная первой функции отрицательна, а второй – положительна. Значит уравнение (17) имеет не более одного положительного решения, и это решение существует тогда и только тогда, когда

$$\left. \frac{d}{d\chi}(e^{-2\chi d}) \right|_{\chi=0} < \left. \frac{d}{d\chi} P^1(\chi) \right|_{\chi=0},$$

т.е.

$$\frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2} < 2d.$$

Решение принадлежит интервалу $(0, \gamma_1)$; обозначим его через χ_1 .

Уравнение (20) всегда имеет одно решение в этом случае, поскольку функция P^3 возрастает до бесконечности и имеет положительный корень, а функция $e^{-2\chi d}/d^2$ является положительной и убывает до нуля. Решение принадлежит интервалу (γ_1, ∞) .

3. Случай $0 < \gamma_2 \leq \gamma_1$. Функция P^1 обращается в нуль в точках $\chi = \gamma_1$ и $\chi = \gamma_2$ и растёт до $+\infty$ на отрезке (γ_1, ∞) . Следовательно, существует решение уравнения (17) на интервале (γ_1, ∞) . Это решение будет обозначено χ_1 . Второе решение может быть расположено на интервале $(0, \gamma_2)$ тогда и только тогда, когда выполнено следующее условие:

$$\left. \frac{d}{d\chi}(e^{-2\chi d}) \right|_{\chi=0} < \left. \frac{d}{d\chi} P^1(\chi) \right|_{\chi=0},$$

т.е.

$$\frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2} < 2d;$$

обозначим его через χ_2 .

Аналогично уравнение (20) имеет два решения χ_1 и χ_2 , расположенных на интервалах $(0, \gamma_2)$ и (γ_1, ∞) тогда и только тогда, когда выполнено условие

$$\gamma_1 \gamma_2 > \frac{1}{d^2}. \quad (24)$$

В противном случае уравнение имеет одно решение, расположенное на интервале (γ_1, ∞) .

Таким образом, мы еще раз доказали, что дискретный спектр двух рассматриваемых задач состоит из не более чем двух простых собственных значений, расположенных на отрицательной полуоси. Изучим для этих операторов следующую обратную спектральную задачу: *восстановить константы связи γ_1 и γ_2 для операторов $L^1(\gamma_1, \gamma_2)$ и $L^3(\gamma_2, \gamma_3)$ по энергиям связанных состояний $-\chi_1^2 = E_1 < E_2 = -\chi_2^2 < 0$ при фиксированном расстоянии d между центрами.*

Без ограничения общности мы можем положить $d = 1$.

Рассмотрим сначала дисперсионное уравнение, соответствующее одномерной задаче. Предположим, что χ_1 и χ_2 являются решениями (17). Тогда параметры γ_1, γ_2 удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} (\chi_1 - \gamma_1)(\chi_1 - \gamma_2) &= \gamma_1 \gamma_2 e^{-2\chi_1}, \\ (\chi_2 - \gamma_1)(\chi_2 - \gamma_2) &= \gamma_1 \gamma_2 e^{-2\chi_2}, \end{aligned} \quad (25)$$

которая может быть переписана в виде

$$\begin{aligned} \gamma_1 \gamma_2 &= \frac{\chi_1 \chi_2 (\chi_1 - \chi_2)}{\chi_1 (1 - e^{-2\chi_2}) - \chi_2 (1 - e^{-2\chi_1})} \equiv A(\chi_1, \chi_2), \\ \gamma_1 + \gamma_2 &= \frac{\chi_1^2 (1 - e^{-2\chi_2}) - \chi_2^2 (1 - e^{-2\chi_1})}{\chi_1 (1 - e^{-2\chi_2}) - \chi_2 (1 - e^{-2\chi_1})} \equiv B(\chi_1, \chi_2). \end{aligned} \quad (26)$$

Каждое из двух уравнений является линейным по отношению к γ_i . Значит, эту систему уравнений можно решить путем выражения γ_1 из первого уравнения и последующей подстановки во второе уравнение. Получаем квадратное уравнение, которое всегда может быть решено:

$$\gamma^2 - B\gamma + A = 0. \quad (27)$$

Однако решения уравнения могут оказаться комплексными, в то время как самосопряженный оператор определяют только вещественные γ_j . Значит, энергии связанных состояний не являются произвольными, а удовлетворяют неравенству

$$D(\chi_1, \chi_2) \equiv B^2(\chi_1, \chi_2) - 4A(\chi_1, \chi_2) \geq 0. \quad (28)$$

Аналогично для трехмерной задачи мы имеем систему уравнений

$$\begin{aligned} (\chi_1 - \gamma_1)(\chi_1 - \gamma_2) &= e^{-2\chi_1}, \\ (\chi_2 - \gamma_1)(\chi_2 - \gamma_2) &= e^{-2\chi_2}, \end{aligned} \quad (29)$$

или

$$\begin{aligned} \gamma_1 \gamma_2 &= \chi_1 \chi_2 + \frac{\chi_1 e^{-2\chi_2} - \chi_2 e^{-2\chi_1}}{\chi_1 - \chi_2} \equiv A(\chi_1, \chi_2), \\ \gamma_1 + \gamma_2 &= \chi_1 + \chi_2 - \frac{e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2}}{\chi_1 - \chi_2} \equiv B(\chi_1, \chi_2), \end{aligned} \quad (30)$$

и снова самосопряженный оператор существует, только если дискриминант (28) неотрицателен.

ТЕОРЕМА 1. Пусть $E_1 = -\chi_1^2 < -\chi_2^2 = E_2$ являются собственными значениями оператора $L^j(\gamma_1, \gamma_2)$, $j = 1, 3$. Предположим, что энергия $E_1 = -\chi_1^2$ зафиксирована. Тогда все возможные значения χ_2 покрывают интервал $[0, \chi_2^{\max}]$, где $\chi_2^{\max} = \chi_2^{\max}(\chi_1)$ и есть значение χ_2 , соответствующее симметричному взаимодействию $\gamma_1 = \gamma_2$. Значения $\chi_2^{\max}$ являются единственными решениями уравнений

$$\frac{1 - e^{-\chi_2^{\max}}}{\chi_2^{\max}} = \frac{1 + e^{-\chi_1}}{\chi_1}, \quad \chi_2^{\max} + e^{-\chi_2^{\max}} = \chi_1 - e^{-\chi_1} \quad (31)$$

для $\mathbb{R}^1$ и $\mathbb{R}^3$, соответственно.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Мы будем доказывать теорему для размерностей 1 и 3 по отдельности.

1. Размерность 1. Энергии χ_1 и $\chi_2^{\max}$, соответствующие симметричному случаю $\gamma_1 = \gamma_2 \equiv \gamma$, могут быть вычислены из уравнения

$$\begin{aligned} (\chi - \gamma)^2 &= \gamma^2 e^{-2\chi} \Rightarrow \chi - \gamma = \pm \gamma e^{-\chi} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1 + e^{-\chi_1}}{\chi_1} = \frac{1 - e^{-\chi_2^{\max}}}{\chi_2^{\max}}. \end{aligned}$$

Чтобы доказать теорему, достаточно показать, что дискриминант системы (27) положителен, когда $\chi_2 < \chi_2^{\max}$, и отрицателен, когда $\chi_2^{\max} < \chi_2$. Принимая во внимание, что дискриминант равен нулю при $\chi_2 = \chi_2^{\max}$ (в этом случае $\gamma_1 = \gamma_2$), достаточно показать, что производная $\partial D(\chi_1, \chi_2)/\partial \chi_2$ отрицательна. Рассмотрим функцию $f(x) = (1 - e^{-2x})/x$. Вычисления показывают, что

$$0 \leq f(x) \leq 2, \quad -2 \leq f'(x) \leq 0, \quad 0 \leq f''(x)$$

при условии $x > 0$. Легко показать, что

$$A = \frac{\chi_1 - \chi_2}{f(\chi_2) - f(\chi_1)}.$$

Тогда из теоремы о среднем следует, что $0 \leq A(\chi_1, \chi_2) \leq 1/2$. Принимая во внимание, что $B = \chi_1 + A(\chi_1, \chi_2)f(\chi_1)$, вычислим производную дискриминанта:

$$\frac{\partial D(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_2} = 2((\chi_1 + A(\chi_1, \chi_2)f(\chi_1))f(\chi_1) - 2) \frac{\partial A(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_2}.$$

Чтобы доказать положительность производной $\partial A(\chi_1, \chi_2)/\partial \chi_2$, мы опять используем теорему о среднем:

$$\frac{\partial A(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_2} = \frac{f(\chi_1) - (f(\chi_2) + (\chi_1 - \chi_2)f'(\chi_2))}{(f(\chi_1) - f(\chi_2))^2},$$

и примем во внимание, что вторая производная f положительна. Выражение в скобках отрицательно:

$$\chi_1 f(\chi_1) + A(\chi_1, \chi_2)f^2(\chi_1) - 2 \leq \chi_1 f(\chi_1) + \frac{f^2(\chi_1)}{2} - 2 \leq 0.$$

Последнее неравенство следует непосредственно из свойств функции $f(x)$. Следовательно, $D(\chi_1, \chi_2)$ положительно при $\chi_2 < \chi_2^{\max}$ и отрицательно при $\chi_2^{\max} < \chi_2$.

2. Размерность 3. Введем новые параметры

$$\xi = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2), \quad \eta = \frac{1}{2}(\gamma_1 - \gamma_2), \quad (32)$$

т.е.

$$\gamma_1 = \xi + \eta, \quad \gamma_2 = \xi - \eta.$$

Дисперсионное уравнение (20) принимает вид

$$(\chi - \xi)^2 - \eta^2 - e^{-2\chi} = 0. \quad (33)$$

Поскольку χ_1 является решением последнего уравнения, получаем

$$Q^3(\xi, \chi) \equiv (\chi - \xi)^2 - (\chi_1 - \xi)^2 - e^{-2\chi} + e^{-2\chi_1} = 0. \quad (34)$$

Теперь частная производная $\partial \chi_2 / \partial \eta$ может быть оценена как

$$\left. \frac{\partial \chi}{\partial \eta} \right|_{\chi=\chi_2} = \frac{\eta(\chi_1 - \chi_2)}{(\chi_1 - \xi)(\chi_2 - \xi + e^{-2\chi_2})} < 0,$$

принимая во внимание, что

$$\chi_2 - \xi + e^{-\chi} = -\sqrt{e^{-2\chi_2} + \eta^2} + e^{-2\chi_2} \leq e^{-\chi_2}(e^{-\chi_2} - 1) < 0.$$

Следовательно, χ_2 принимает максимальное значение при $\eta = 0$, т.е. в симметричном случае $\gamma_1 = \gamma_2 \equiv \gamma$. Этот случай соответствует χ_1 и $\chi_2 = \chi_2^{\max}$, удовлетворяющим уравнению

$$(\chi - \gamma)^2 = e^{-2\chi} \quad \Rightarrow \quad \chi_1 - \chi_2^{\max} = e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2^{\max}}.$$

Следовательно, для всех $\chi_2: 0 \leq \chi_2 \leq \chi_2^{\max}$ выполнена следующая оценка:

$$\chi_1 - \chi_2 \geq e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2}. \quad (35)$$

Покажем, что дискриминант положителен для всех $\chi_2 \leq \chi_2^{\max}$. Дискриминант квадратного уравнения (30) для γ_1 и γ_2 равен

$$D(\chi_1, \chi_2) = (\chi_1 - \chi_2)^2 - 2(e^{-2\chi_1} + e^{-2\chi_2}) + \frac{(e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2})^2}{(\chi_1 - \chi_2)^2}.$$

Сумма первого и третьего членов может быть оценена через

$$(e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2})^2 + \frac{(e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2})^2}{(e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2})^2},$$

учитывая, что $(\chi_1 - \chi_2)^2 \geq e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2}$ в соответствии с оценкой (35). Значит, дискриминант можно оценить снизу:

$$D(\chi_1, \chi_2) \geq (e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2})^2 - 2(e^{-2\chi_1} + e^{-2\chi_2}) + \frac{(e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2})^2}{(e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2})^2} = 0.$$

Следовательно, система (30) имеет вещественные решения для всех $0 \leq \chi_2 \leq \chi_2^{\max}(\chi_1)$. Теорема доказана.

Теорема утверждает, что система двух локальных точечных взаимодействий никогда не имеет вырожденных собственных значений. Расстояние между собственными значениями минимально в симметричном случае $\gamma_1 = \gamma_2$. Это можно проиллюстрировать рисунком (рисунок “а” соответствует $\mathbb{R}^1$, а рисунок “б” — $\mathbb{R}^3$). Области, расположенные между кривыми, являются запрещенными, т.е. невозможно подобрать два точечных взаимодействия на расстоянии $d = 1$ таким образом, чтобы собственные числа располагались в этих областях. В пределе $\chi_1, \chi_2 \rightarrow \infty$ кривые

приближаются к линии $\chi_1 = \chi_2$. Это означает, что два глубоких уровня могут располагаться достаточно близко друг к другу. Все кривые пересекают соответствующие координатные оси в точках, являющихся единственными решениями уравнения $x = 1 + e^{-x}$.

Мы доказали, что оператор Шредингера с двумя локальными точечными взаимодействиями не может иметь вырожденных собственных значений. Более того, два собственных значения не могут располагаться произвольно близко друг к другу. Это является некоторым обобщением теоремы Вигнера–фон Неймана [3]. Следует отметить, что последнее утверждение выполняется в силу специального вида граничных условий, описываемых диагональными матрицами. Рассматривая нелокальные точечные взаимодействия, можно получить операторы с двумя отрицательными собственными значениями, расположенными произвольно.

4. ВЫРОЖДЕННЫЕ СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ В СЛУЧАЕ НЕСКОЛЬКИХ ЦЕНТРОВ

Одномерный оператор Шредингера не может иметь вырожденных собственных значений (за исключением случая, когда оператор распадается в ортогональную сумму операторов на двух независимых интервалах). Поэтому мы ограничимся рассмотрением трехмерного оператора Шредингера, описанного в разделе 2. Более того, чтобы не усложнять изложение, мы будем изучать максимально возможное вырождение. Вырождения более низкого порядка можно изучить, рассматривая кластеры, состоящие из меньшего числа центров.

Рассмотрим возможность возникновения максимального вырождения $N - 1$ для системы из N точечных потенциалов. Уравнение, определяющее собственные значения, имеет вид

$$\det \begin{pmatrix} -\chi + \gamma_1 & \frac{e^{-\chi d_{12}}}{d_{12}} & \frac{e^{-\chi d_{13}}}{d_{13}} & \cdots & \frac{e^{-\chi d_{1N}}}{d_{1N}} \\ \frac{e^{-\chi d_{21}}}{d_{21}} & -\chi + \gamma_2 & \frac{e^{-\chi d_{23}}}{d_{23}} & \cdots & \frac{e^{-\chi d_{2N}}}{d_{2N}} \\ \frac{e^{-\chi d_{31}}}{d_{31}} & \frac{e^{-\chi d_{32}}}{d_{32}} & -\chi + \gamma_3 & \cdots & \frac{e^{-\chi d_{3N}}}{d_{3N}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{e^{-\chi d_{N1}}}{d_{N1}} & \frac{e^{-\chi d_{N2}}}{d_{N2}} & \frac{e^{-\chi d_{N3}}}{d_{N3}} & \cdots & -\chi + \gamma_N \end{pmatrix} = 0, \quad (36)$$

где $\gamma_j = 4\pi\alpha_j^{-1}$. Это уравнение определяет не более N отрицательных собственных значений. Нас интересует случай, когда одно из этих значений имеет максимально возможную кратность $N - 1$. Это происходит в том случае, когда все строки в матрице параллельны, т.е. когда детерминанты всех (2×2) -миноров равны нулю. Прикинем, для какого числа центров это возможно. Для достаточно большого N ($N \geq 3$) расположение центров определяется $N_{\text{geom}} = 3(N - 2)$ расстояниями. В дополнение имеются $N_{\text{ext}} = N$ параметров, определяющих расширения. Следовательно, матрица определяется $N_{\text{par}} = N_{\text{geom}} + N_{\text{ext}} + 1 = 4N - 5$ параметрами, если включить дополнительно спектральный параметр χ . Общее число (2×2) -миноров равно $(n(n - 1)/2)^2$, но число независимых уравнений всего $n(n - 1)/2$ из-за симметрии и специальной формы матрицы. Следовательно, вообще говоря, имеется

$N_{\text{con}} = n(n-1)/2$ ограничений на параметры, которые гарантируют максимально возможное вырождение. Поскольку число ограничений растет квадратично, а число параметров – линейно, невозможно найти конфигурацию, приводящую к максимальному вырождению при достаточно больших N . В таблице приведены максимально возможные значения размерности D для множества параметров, приводящих к максимальному вырождению.

N	N_{geom}	N_{ext}	N_{par}	N_{con}	D
1	0	1	2	1	1
2	1	2	4	1	3
3	3	3	7	3	4
4	6	4	11	6	5
5	9	5	15	10	5
6	12	6	19	15	4
7	15	7	23	21	2
8	18	8	27	28	$\emptyset$

Мы видим, что для малых N наши “наивные” вычисления дают правильный результат. Так, в случае одного точечного взаимодействия имеется однопараметрическое семейство, имеющее собственное значение. Для двух центров семейство операторов, имеющих собственное значение, описывается тремя параметрами: два параметра расширения и одно расстояние.

Для больших N ($N \geq 8$), как видно из таблицы, собственное значение, имеющее максимальное вырождение, невозможно. В данном разделе мы будем изучать случай промежуточных значений N .

Три центра. Имеется 9 миноров. Поскольку матрица симметрична, только 6 миноров являются независимыми. Из-за специальной формы матрицы число уравнений уменьшается до трех:

$$\begin{aligned}
 -\chi + \gamma_1 &= \frac{d_{23}}{d_{12}d_{13}} e^{\chi(d_{23}-d_{13}-d_{12})}, \\
 -\chi + \gamma_2 &= \frac{d_{13}}{d_{12}d_{23}} e^{\chi(d_{13}-d_{12}-d_{23})}, \\
 -\chi + \gamma_3 &= \frac{d_{12}}{d_{13}d_{23}} e^{\chi(d_{12}-d_{13}-d_{23})}.
 \end{aligned} \tag{37}$$

ТЕОРЕМА 2. Для произвольного расположения $\{y^1, y^2, y^3\}$ трех точек в $\mathbb{R}^3$ и произвольного отрицательного значения $E = -\chi^2$ существует единственный набор параметров $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ такой, что оператор Шредингера с тремя дельта-взаимодействиями, задающимися параметрами $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ и сосредоточенными в y^1, y^2, y^3 , соответственно, имеет вырожденное собственное значение с энергией $E = -\chi^2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим систему уравнений (37) для произвольного набора положительных параметров $d_{12}, d_{13}, d_{23}, \chi$. Эти уравнения позволяют непосредственно вычислить три положительных значения $\gamma_j = 4\pi/\alpha_j$ и, следовательно,

реконструировать параметры, задающие дельта-взаимодействия в точках y^j . Теорема доказана.

Теорема 2 показывает, что для произвольной конфигурации точек – носителей дельта-функций – множество параметров, задающих взаимодействия, которые приводят к двойному собственному значению, может быть параметризовано одним параметром – энергией вырожденного состояния. Тогда общее множество параметров, приводящих к вырожденному собственному значению, может быть описано четырьмя параметрами, как это и было предсказано в таблице.

Четыре центра. Имеется 36 миноров, но из-за симметрии матрицы только 21 минор независим. Специальная форма матрицы уменьшает число независимых уравнений до 6. Естественно разделить эти уравнения на две системы, состоящие из четырех и двух уравнений:

$$\begin{aligned} -\chi + \gamma_1 &= \frac{d_{23}}{d_{13}d_{12}} e^{\chi(d_{23}-d_{13}-d_{12})}, \\ -\chi + \gamma_2 &= \frac{d_{34}}{d_{24}d_{23}} e^{\chi(d_{34}-d_{24}-d_{23})}, \\ -\chi + \gamma_3 &= \frac{d_{14}}{d_{34}d_{13}} e^{\chi(d_{14}-d_{34}-d_{13})}, \\ -\chi + \gamma_4 &= \frac{d_{12}}{d_{14}d_{24}} e^{\chi(d_{12}-d_{14}-d_{24})} \end{aligned} \quad (38)$$

и

$$e^{\chi(d_{12}+d_{34})} d_{12}d_{34} = e^{\chi(d_{13}+d_{24})} d_{13}d_{24} = e^{\chi(d_{14}+d_{23})} d_{14}d_{23}. \quad (39)$$

Вторая система описывает взаимосвязь между расстояниями и энергетическим параметром. Это означает, что не все конфигурации четырех центров приводят к тройному собственному значению. В общем случае, если конфигурация является допустимой, то она однозначно определяет энергию тройного связанного состояния (кроме специальных случаев, описываемых ниже в теореме 3). После этого расстояния и энергия тройного связанного состояния могут быть использованы для нахождения сил точечных взаимодействий из уравнений (38).

Для системы четырех центров введем периметрические координаты – суммы длин противоположных ребер в тетраэдре, образованном y^1, y^2, y^3, y^4 :

$$\begin{aligned} D_{12} &= d_{12} + d_{34}, \\ D_{13} &= d_{13} + d_{24}, \\ D_{14} &= d_{14} + d_{23}. \end{aligned} \quad (40)$$

Эти координаты могут быть использованы для простого вычисления периметров всех возможных четырехугольников: периметры равны сумме двух соответствующих периметрических координат.

ТЕОРЕМА 3. *Рассмотрим оператор Шредингера в $L_2(\mathbb{R}^3)$ с четырьмя точечными взаимодействиями сил $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$, расположенными в точках y^1, y^2, y^3, y^4 . Этот оператор имеет тройное собственное значение тогда и только тогда, когда выполнено одно из следующих условий.*

1. *Если все периметрические координаты различны, то расстояния между центрами должны удовлетворять одному из трех эквивалентных условий:*

$$\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{13} - \ln d_{24}}{d_{12} + d_{34} - d_{13} - d_{24}} = \frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}} < 0, \quad (41)$$

$$\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{13} - \ln d_{24}}{d_{12} + d_{34} - d_{13} - d_{24}} = \frac{\ln d_{13} + \ln d_{24} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{13} + d_{24} - d_{14} - d_{23}} < 0, \quad (42)$$

$$\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}} = \frac{\ln d_{13} + \ln d_{24} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{13} + d_{24} - d_{14} - d_{23}} < 0. \quad (43)$$

Энергия тройного собственного значения определяется геометрией центров:

$$E = - \left(\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}} \right)^2. \quad (44)$$

Значение постоянных α_j определяется уравнением (38) (принимая во внимание (19)).

2. *Если две периметрические координаты совпадают, например $D_{12} - D_{13} = d_{12} + d_{34} - d_{13} - d_{24} = 0$, то и длины в этих парах должны совпадать, т.е.*

$$\begin{aligned} d_{12} &= d_{13}, & \text{или} & & d_{12} &= d_{24}, \\ d_{34} &= d_{24} & & & d_{34} &= d_{13}. \end{aligned} \quad (45)$$

Тогда тройное собственное значение существует, только если условие

$$\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}} < 0$$

выполнено; его энергия определяется геометрией и дается формулой (44). Значения параметров α_j определяются формулой (38) (при помощи (19)).

3. *Если все периметрические координаты равны, то тройное собственное значение существует тогда и только тогда, когда четыре центра расположены в вершинах тетраэдра, по крайней мере одной из граней которого является правильный треугольник, а три другие грани одинаковы. Энергия тройного собственного значения произвольна (отрицательна), и значения параметров α_j (все равные) однозначно определяются этой энергией.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим все три случая по отдельности.

1. Если все периметрические координаты различны, то параметр χ , определяющий энергию тройного состояния, можно вычислить из уравнений (39), используя уравнения

$$\chi = - \frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{13} - \ln d_{24}}{d_{12} + d_{34} - d_{13} - d_{24}},$$

$$\chi = -\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}},$$

$$\chi = -\frac{\ln d_{13} + \ln d_{24} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{13} + d_{24} - d_{14} - d_{23}}.$$

Исключая χ тремя различными способами, получаем равенства (41)–(43), принимая во внимание, что χ должно быть положительным. После этого параметры α_j (или γ_j) могут быть получены из уравнений (38).

2. Если две из трех периметрических координат совпадают, например, $D_{12} = D_{13}$, то система уравнений (39) эквивалентна системе из двух соотношений:

$$\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}} < 0,$$

$$d_{12}d_{34} = d_{13}d_{24}.$$

Принимая во внимание, что две периметрические координаты совпадают, мы делаем вывод о том, что последнее уравнение приводит к равенствам (45), и энергия тройного состояния определяется выражением (44). Параметры расширения вновь определяются уравнениями (38).

3. Если все периметрические координаты совпадают, то уравнения (39) эквивалентны

$$d_{12}d_{34} = d_{13}d_{24} = d_{14}d_{23}$$

и, следовательно, четыре центра определяют тетраэдр с одной гранью в виде правильного треугольника. Три оставшиеся грани одинаковы. В этом случае уравнения (39) выполнены при любом значении энергии $-\chi^2$. После выбора этого параметра равным произвольному отрицательному числу можно вычислить значения всех параметров связи из уравнений (38). Теорема доказана.

Первое семейство точечных взаимодействий описывается пятью независимыми параметрами, как и предполагалось (см. таблицу). Два других семейства описываются четырьмя и тремя параметрами, соответственно. Последнее семейство представляется наиболее интересным, поскольку содержит регулярный тетраэдр – наиболее симметричную конфигурацию четырех центров.

Пять центров. Посмотрим, может ли эта система иметь собственное значение кратности 4. Не очевидно, что соответствующая система уравнений имеет решение. Таблица предсказывает, что семейство решений описывается пятью параметрами. Мы можем показать, что существует двухпараметрическое семейство. Рассмотрим наиболее симметричное расположение пяти центров: точки y^2, y^3, y^4, y^5 расположены в вершинах правильного тетраэдра, точка y^1 находится в его центре.

Обозначим через d длину ребра тетраэдра и через r – радиус описанной вокруг него сферы. Тогда уравнение (36) принимает вид

$$\det \begin{pmatrix} -\chi + \gamma_1 & \frac{e^{-\chi r}}{r} & \frac{e^{-\chi r}}{r} & \frac{e^{-\chi r}}{r} & \frac{e^{-\chi r}}{r} \\ \frac{e^{-\chi r}}{r} & -\chi + \gamma_2 & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi r}}{r} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_3 & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi r}}{r} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_4 & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi r}}{r} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_5 \end{pmatrix} = 0. \quad (46)$$

Все строки матрицы линейно зависимы (собственное значение имеет кратность 4) тогда и только тогда, когда

$$-\chi + \gamma_2 = -\chi + \gamma_3 = -\chi + \gamma_4 = -\chi + \gamma_5 = \frac{e^{-\chi d}}{d},$$

т.е.

$$\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = \gamma_5 = \chi + \frac{e^{-\chi d}}{d},$$

и

$$-\chi + \gamma_1 = \frac{(e^{-\chi r}/r)^2}{e^{-\chi d}/d},$$

т.е.

$$\gamma_1 = \chi + \frac{d}{r^2} e^{\chi(d-2r)}.$$

Следовательно, для любого χ можно подобрать параметры α_j , $j = 1, \dots, 5$, так, чтобы оператор Шредингера с пятью точечными взаимодействиями имел собственное значение кратности 4. Получаем семейство, описываемое двумя параметрами: длиной ребра правильного тетраэдра и энергией вырожденного состояния.

Шесть и более центров. Рассмотрим систему шести центров. Таблица предсказывает, что множество параметров, приводящих к максимальной вырожденности, описывается четырьмя параметрами. Проанализируем наиболее симметричную конфигурацию шести центров – точки, расположенные в вершинах октаэдра. Матрица из уравнения (36) принимает вид

$$\begin{pmatrix} -\chi + \gamma_1 & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d}d & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_2 & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d}d & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_3 & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{d} & \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_4 & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & -\chi + \gamma_5 & \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d} \\ \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi d}}{d} & \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d} & -\chi + \gamma_6 \end{pmatrix},$$

где d – длина ребра октаэдра. Строки параллельны, только если выполняется условие

$$\frac{e^{-\chi d}}{d} = \frac{e^{-\chi\sqrt{2}d}}{\sqrt{2}d},$$

т.е.

$$\chi = -\frac{\ln 2}{2d(\sqrt{2}-1)} < 0,$$

но параметр χ должен быть положительным. Следовательно, эта система не может иметь собственное значение кратности 5. Последнее уравнение определяет резонанс вместо собственного значения. Мы предполагаем, что система из шести точечных взаимодействий не может иметь собственного значения кратности 5. Аналогично, мы не предполагаем наличия собственных значений кратности $N - 1$ для любой системы из N точечных взаимодействий при условии $N > 6$. К решению этой проблемы мы планируем вернуться в одной из последующих публикаций.

Благодарности. Авторы благодарны Шведской королевской академии наук и фонду Vetenskapsrådet за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, Изд-во ЛГУ, Л., 1975.
- [2] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, H. Holden, *Solvable Models in Quantum Mechanics*, 2nd ed., Providence, RI, AMS, 2005.
- [3] J. von Neumann, E. Wigner, *Phys. Z.*, **30** (1929), 467.
- [4] М. Н. Адамов, Ю. Н. Демков, В. Д. Обьедков, Т. К. Ребанэ, *ТЭХ*, **4** (1968), 147.
- [5] S. Albeverio, P. Kurasov, *Singular Perturbations of Differential Operators. Solvable Schrödinger Type Operators*, London Math. Soc. Lecture Note Ser., **271**, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- [6] Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев, В. В. Кучинский, *ЖЭТФ*, **58** (1970), 944.
- [7] P. Kurasov, A. Posilicano, *Proc. Am. Math. Soc.*, **133** (2005), 3071.
- [8] М. Г. Крейн, *Докл. АН СССР*, **43** (1944), 323.
- [9] М. Г. Крейн, *Докл. АН СССР*, **44** (1944), 131.
- [10] М. Наймарк, *Изв. АН СССР. Сер. матем.*, **7** (1943), 285.

Поступила в редакцию 24.01.2007