Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. Э. Муминов, О положительности двухчастичного гамильтониана на решетке, *ТМФ*, 2007, том 153, номер 3, 381–387

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6143>

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: 54.209.52.79

26 апреля 2023 г., 18:07:58

© 2007 г.

М. Э. Муминов*

О ПОЛОЖИТЕЛЬНОСТИ ДВУХЧАСТИЧНОГО ГАМИЛЬТониАНА НА РЕШЕТКЕ

Рассмотрен двухчастичный гамильтониан на d -мерной решетке $\mathbb{Z}^d$. Найдено достаточное условие положительности семейства операторов $h(k)$, появляющихся после “выделения центра масс” системы двух частиц, зависящих от значений полного квазиимпульса $k \in T^d$ (T^d – d -мерный тор). На основании полученного результата показано существование положительных собственных значений оператора $h(k)$ при ненулевых $k \in T^d$.

Ключевые слова: двухчастичный гамильтониан на решетке, виртуальный уровень, регулярная точка, положительный оператор, дискретный спектр.

1. ВВЕДЕНИЕ И ФОРМУЛИРОВКА ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

При получении двухчастичного оператора Шредингера (в непрерывном случае) из полного гамильтониана можно выделить энергию движения центра масс так, что одночастичные “связанные состояния” оказываются собственными векторами оператора энергии с отделенным полным импульсом (при этом такой оператор фактически не зависит от значений полного импульса) [1]. На решетке “выделению центра масс” системы отвечает реализация гамильтониана как “расслоенного оператора”, т.е. прямого интеграла семейства $h(k)$, $k \in T^d$ (T^d – d -мерный тор), операторов энергии двух частиц, где k – значение полного квазиимпульса [2], [3].

Решетчатые двухчастичные гамильтонианы исследованы в работах [4]–[6]. В работе [4] подробно рассмотрена задача о спектре двухчастичных связанных состояний трансфер-матриц широкого класса гиббсовских полей на решетке в высокотемпературной области ($t \gg 1$), в работе [5] показано, что при некоторых значениях полного квазиимпульса системы появляются уровни связанных состояний, отстоящие от непрерывного спектра на определенное расстояние. Спектральные свойства двухчастичного оператора, зависящие от полного квазиимпульса, изучены в работе [6].

В недавней работе [3] получен замечательный результат, который существенно отличается от непрерывного случая: если оператор $h(0)$ имеет виртуальный уровень

*Самаркандский государственный университет, Самарканд, Узбекистан.
E-mail: mmuminov@mail.ru

на левом крае существенного спектра (см. далее определение 2), то дискретный спектр оператора $h(k)$, лежащий левее существенного спектра, является непустым при всех $k \in T^d \setminus \{0\}$.

Заметим, что существенный спектр многочастичных операторов Шредингера тесно связан с множеством $\bigcup_{k \in T^d} \sigma(h(k))$, где $\sigma(h(k))$ – спектр двухчастичного оператора Шредингера $h(k)$.

В настоящей работе найдено такое условие для параметра, задающего оператор $h(k)$, что из неотрицательности $h(0)$ следует неотрицательность $h(k)$ при всех $k \in T^d \setminus \{0\}$. При этом если слева от нуля отсутствуют связанные состояния оператора $h(0)$, то для всех полных квазиимпульсов k оператора $h(k)$ также отсутствуют связанные состояния слева от нуля. На примерах показано, что найденное условие является существенным для неотрицательности $h(k)$. Как следствие этого результата, наложив дополнительные требования в теореме 2 работы [3], мы доказали, что дискретный спектр $h(k)$, лежащий левее существенного спектра $\sigma_{\text{ess}}(h(k))$, не пуст и содержится в полуинтервале $[0, \varepsilon_{\min}(k))$, $\varepsilon_{\min}(k) = \inf \sigma_{\text{ess}}(h(k))$.

Пусть $\mathbb{Z}^d$ – d -мерная целочисленная решетка, $(\mathbb{Z}^d)^2 = \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d$ – декартова степень $\mathbb{Z}^d$ и $l_2((\mathbb{Z}^d)^2)$ – гильбертово пространство квадратично-суммируемых функций, определенных на $(\mathbb{Z}^d)^2$.

В координатном представлении гамильтониан системы двух произвольных частиц с парным короткодействующим потенциалом $\hat{v}(\cdot)$ взаимодействия на d -мерной решетке, действующий в пространстве $l_2((\mathbb{Z}^d)^2)$, имеет вид

$$\hat{h} = \hat{h}_0 - \hat{v},$$

где $\hat{h}_0$ и $\hat{v}$ задаются формулами

$$\begin{aligned} (\hat{h}_0 \hat{\psi})(n_1, n_2) &= \sum_{s \in \mathbb{Z}^d} [\hat{\varepsilon}_1(s) \hat{\psi}(n_1 + s, n_2) + \hat{\varepsilon}_2(s) \hat{\psi}(n_1, n_2 + s)], \\ (\hat{v} \hat{\psi})(n_1, n_2) &= \hat{v}(n_1 - n_2) (\hat{\psi})(n_1, n_2). \end{aligned}$$

Здесь $\hat{\varepsilon}_1(s)$ и $\hat{\varepsilon}_2(s)$ – вещественнозначные четные функции, описывающие перенос частицы с узла на соседний узел, функция $\hat{v}(\cdot) \in l_2(\mathbb{Z}^d)$.

Мы предполагаем, что функции $\hat{\varepsilon}_1(\cdot)$ и $\hat{\varepsilon}_2(\cdot)$ неотрицательные и выполнено условие

$$\sum_{s \in \mathbb{Z}^d} |\hat{\varepsilon}_j(s)| < \infty, \quad j = 1, 2.$$

Пусть $T = (-\pi, \pi]$, $L_2(T^d)$ – гильбертово пространство всех квадратично-интегрируемых функций, определенных на T^d . Используя стандартное преобразование Фурье [3], [7]

$$\mathfrak{F}: L_2((T^d)^2) \rightarrow l_2((\mathbb{Z}^d)^2)$$

и разложение в прямой интеграл, мы сводим изучение спектральных свойств оператора $\hat{h}$ к исследованию спектральных свойств семейства самосопряженных операторов $h(k)$, $k \in T^d$, действующих в гильбертовом пространстве $L_2(T^d)$ по формуле

$$h(k) = h_0(k) - \mathbf{v}.$$

Здесь $h_0(k)$ – оператор умножения на функцию

$$\mathcal{E}_k(p) = \varepsilon_1(p) + \varepsilon_2(p + k),$$

$\mathbf{v}$ – интегральный оператор с ядром $v(p - s)$, где $v(\cdot)$ и $\varepsilon_j(\cdot)$ – преобразования Фурье функций $\hat{v}(\cdot)$ и $\hat{\varepsilon}_j(\cdot)$, соответственно:

$$v(p) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{s \in \mathbb{Z}^d} \hat{v}(s) e^{i(p,s)}, \quad \varepsilon_j(p) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{s \in \mathbb{Z}^d} \hat{\varepsilon}_j(s) e^{i(p,s)}, \quad j = 1, 2.$$

ПРЕДПОЛОЖЕНИЕ. Предположим, что $\varepsilon_j(p)$, $j = 1, 2$, – непрерывные (периодические) вещественнозначные функции на T^d , $d \geq 3$, имеющие единственную невырожденную точку минимума в центре координат, причем

$$\liminf_{|p| \rightarrow 0} \frac{\varepsilon_j(p) - \varepsilon_j(0)}{|p|^2} > 0.$$

Кроме того, пусть $v(\cdot)$ – непрерывная функция на T^d такая, что

$$v(p) = \overline{v(-p)}, \quad p \in T^d, \quad d \geq 3.$$

Отметим, что из теоремы Вейля о существенном спектре [8] следует, что существенный спектр $\sigma_{\text{ess}}(h(k))$ оператора $h(k)$ не меняется при компактом возмущении оператора $\mathbf{v}$ и совпадает со спектром невозмущенного оператора $h_0(k)$. При этом $\sigma_{\text{ess}}(h(k))$ совпадает с областью значений функции $\mathcal{E}_k(\cdot)$, т.е.

$$\sigma_{\text{ess}}(h(k)) = \sigma(h_0(k)) = [\varepsilon_{\min}(k), \varepsilon_{\max}(k)],$$

где $\varepsilon_{\min}(k) = \min_p \mathcal{E}_k(p)$, $\varepsilon_{\max}(k) = \max_p \mathcal{E}_k(p)$. Из сделанного выше предположения следует, что $\varepsilon_{\min}(k) > \varepsilon_{\min}(0) = 0$ при $k \in T^d$.

Пусть $C(T^d)$ – банахово пространство непрерывных (периодических) функций на T^d , $G(\lambda)$, $\lambda \in \mathcal{E}_0(0)$, – интегральный оператор с ядром (Бирмана–Швингера)

$$G(p, q; \lambda) = (2\pi)^{-d/2} v(p - q) (\mathcal{E}_0(p) - \lambda)^{-1}, \quad p, q \in T^d.$$

Следующие возможные случаи для собственного значения оператора $G(\lambda)$ при $\lambda = \mathcal{E}_0(0)$ детально обсуждены в работе [3].

СЛУЧАЙ 1. Число -1 не является собственным значением оператора $G(\mathcal{E}_0(0))$, т.е.

$$\dim \text{Ker}(h(0) - \mathcal{E}_0(0)I) = \dim \text{Ker}(G(\mathcal{E}_0(0)) + I) = 0.$$

СЛУЧАЙ 2. Число -1 является простым собственным значением оператора $G(\mathcal{E}_0(0))$, и соответствующая собственная функция ψ удовлетворяет условию

$$\frac{\psi(0)}{\mathcal{E}_0(p) - \mathcal{E}_0(0)} \notin L_2(T^d),$$

т.е.

$$\dim \text{Ker}(h(0) - \mathcal{E}_0(0)I) = 0, \quad \dim \text{Ker}(G(\mathcal{E}_0(0)) + I) = 1.$$

СЛУЧАЙ 3. Число -1 является кратным собственным значением оператора $G(\mathcal{E}_0(0))$, и одна из соответствующих собственных функций ψ удовлетворяет условию

$$\frac{\psi(0)}{\mathcal{E}_0(p) - \mathcal{E}_0(0)} \notin L_2(T^d),$$

т.е.

$$\dim \operatorname{Ker}(h(0) - \mathcal{E}_0(0)I) \geq 2, \quad \dim \operatorname{Ker}(h(0) - \mathcal{E}_0(0)I) \geq \dim \operatorname{Ker}(G(\mathcal{E}_0(0)) + I) + 1.$$

СЛУЧАЙ 4. Число -1 является кратным собственным значением оператора $G(\mathcal{E}_0(0))$ и

$$\dim \operatorname{Ker}(h(0) - \mathcal{E}_0(0)I) + 2 \leq \dim \operatorname{Ker}(G(\mathcal{E}_0(0)) + I).$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1 [9]. Если имеет место случай 1, нуль называется *регулярной точкой* оператора $h(0)$.

ТЕОРЕМА 1. Пусть функции $\varepsilon_1(\cdot)$ и $\varepsilon_2(\cdot)$ являются линейно зависимыми. Если $h(0) \geq 0$, то $h(k) \geq 0$ для всех $k \in T^d$. Дополнительно, если нуль – регулярная точка оператора $h(0)$, то $(h(k)f, f) > 0$ для всех $f \neq 0$ и $k \in T^d$.

ЗАМЕЧАНИЕ. Условия теоремы 1 являются существенными для положительности $h(k)$ при $k \in T^3$ (см. пример 1). При выполнении условий теоремы 1 из того, что $h(k) \geq 0$ для некоторого $k \in T^3$, не всегда вытекает, что $h(0) \geq 0$ (см. пример 2).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Пусть $d = 3, 4$. Если имеет место один из случаев 2–4, то говорят, что оператор $h(0)$ имеет *виртуальный уровень в нуле* (на левом крае существенного спектра).

Нам понадобится следующая теорема, доказанная в работе [3].

ТЕОРЕМА 2. Пусть $d \geq 3$, выполнено указанное выше предположение и $\varepsilon_1(\cdot)$, $\varepsilon_2(\cdot)$ – условно отрицательно определенные функции¹⁾, дифференцируемые до второго порядка. Предположим, что $h(0)$ имеет виртуальный уровень (на левом крае существенного спектра). Тогда для каждого $k \in T^d \setminus \{0\}$ дискретный спектр оператора $h(k)$, лежащий левее $\varepsilon_{\min}(k)$, представляет собой непустое множество.

Пользуясь теоремой 1, из теоремы 2 получим

СЛЕДСТВИЕ. Пусть выполнены условия теоремы 2. Пусть, кроме того, функции $\varepsilon_1(\cdot)$, $\varepsilon_2(\cdot)$ являются линейно зависимыми и $h(0) \geq 0$. Тогда для каждого $k \in T^d \setminus \{0\}$ дискретный спектр оператора $h(k)$, лежащий левее существенного спектра, есть непустое множество, содержащееся в полуинтервале $[0, \varepsilon_{\min}(k))$.

¹⁾Функция $\varepsilon(\cdot)$ называется условно отрицательно определенной (см. [8]), если $\varepsilon(p) = \overline{\varepsilon(p)}$ и для каждого натурального числа n и для всех $p_1, \dots, p_n \in T^d$, $z = (z_1, \dots, z_n) \in \mathbb{C}^n$ (где $\mathbb{C}$ – комплексная плоскость) выполнено неравенство

$$\sum_{i,j=1}^n \varepsilon(p_i - p_j) z_i \bar{z}_j \leq 0.$$

В качестве примера функций $\varepsilon_1(\cdot)$ и $\varepsilon_2(\cdot)$, удовлетворяющих условиям следствия, можно рассмотреть $\varepsilon_j(\cdot) = \varepsilon(\cdot)/2m_j$, где m_j – масса частицы, $j = 1, 2$, и $\varepsilon(p) = 2 \sum_{k=1}^d (1 - \cos p_k)$. В этом случае преобразование Фурье $\hat{\varepsilon}(\cdot)$ функции $\varepsilon(\cdot)$ имеет вид

$$\hat{\varepsilon}(s) = \begin{cases} 2d & \text{при } s = 0, \\ -1 & \text{при } |s| = 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

2. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Доказательство теоремы 1. Предположим, что $h(0)$ является неотрицательным оператором, т.е. $h(0) \geq 0$. Оператор $h(k)$ запишем в виде

$$h(k) = \frac{m_2}{m_1 + m_2} h(0) + \frac{m_1}{m_1 + m_2} U_k h(0) U_k^{-1}, \quad k \in T^d \setminus \{0\},$$

где $U_k: L_2(T^d) \rightarrow L_2(T^d)$ – унитарный оператор, определенный формулой $(U_k f)(q) = f(k + q)$, $f \in L_2(T^d)$. Отсюда и из неотрицательности $h(0)$ имеем

$$(h(k)f, f) = \frac{m_2}{m_1 + m_2} (h(0)f, f) + \frac{m_1}{m_1 + m_2} (U_k h(0) U_k^{-1} f, f) \geq 0 \quad (2.1)$$

для каждого $f \in L_2(T^d)$.

Пусть нуль является регулярной точкой оператора $h(0)$. Тогда из $h(0)f \neq 0$ при $f \neq 0$ имеем $(h(0)f, f) = ([h(0)]^{1/2} f, h(0)[h(0)]^{1/2} f) > 0$. Поэтому из (2.1) вытекает, что $(h(k)f, f) > 0$ для всех $k \neq 0$ и $f \neq 0$. Теорема доказана.

ПРИМЕР 1. Рассмотрим случай, когда потенциал $\hat{v}$ рассматриваемой системы определен как парный контактный потенциал $\hat{v}(\cdot) = \mu \delta_{n_1 n_2}$, где $\mu > 0$ – энергия взаимодействия двух частиц, $\delta_{n_1 n_2}$ – символ Кронекера. В этом случае $h_\mu(k) = h(k)$ действует по формуле

$$(h_\mu(k)f)(p) = [\varepsilon_1(p) + \varepsilon_2(p - k)] f(p) - \frac{\mu}{(2\pi)^{d/2}} \int f(s) ds. \quad (2.2)$$

Пусть $d = 3$ и

$$\varepsilon_1(p) = \sum_{i=1}^3 (1 - \cos p_i) \cos^4 p_i, \quad \varepsilon_2(p) = \sum_{i=1}^3 \sin^4 p_i.$$

Функции $\varepsilon_1(\cdot)$, $\varepsilon_2(\cdot)$ являются линейно независимыми.

Легко проверить (см. [7]), что число $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma_{\text{cont}}(h_\mu(k))$ является собственным значением оператора $h_\mu(k)$ тогда и только тогда, когда

$$\Delta_\mu(k; z) = 1 - \frac{\mu}{(2\pi)^{3/2}} \int_{T^3} \frac{ds}{\varepsilon_1(s) + \varepsilon_2(s + k) - z} = 0.$$

Отметим, что интеграл

$$\int_{T^3} \frac{ds}{\varepsilon_1(s) + \varepsilon_2(s + k) - z}$$

существует при $z = 0$, $k \in T^3$. Пусть

$$\mu_0 = (2\pi)^{3/2} \left(\int_{T^3} \frac{ds}{\varepsilon_1(s) + \varepsilon_2(s)} \right)^{-1}.$$

Тогда $\Delta_\mu(0; z) \geq 0$ при $\mu \in (0, \mu_0]$ и $z \leq 0$. Следовательно, оператор $h_\mu(0)$ не имеет отрицательных собственных значений при $\mu \in (0, \mu_0]$. Отсюда и из неравенства $\varepsilon_{\min}(k) \geq 0$ получим $h(0) \geq 0$.

Покажем, что $h_\mu(k)$, $\mu \in (0, \mu_0]$, не является положительным оператором при $k^0 = (\pi/2, \pi/2, \pi/2)$.

Используя равенство

$$\varepsilon_1(p) + \varepsilon_2(p - k^0) = \sum_{i=1}^3 (1 - \cos p_i) \cos^4 p_i + \sum_{i=1}^3 \sin^4 \left(\frac{\pi}{2} - p_i \right) = \sum_{i=1}^3 (2 - \cos p_i) \cos^4 p_i$$

и учитывая периодичность функции $\varepsilon_1(p) + \varepsilon_2(p - k^0)$, получим равенство

$$\int_{T^3} \frac{ds}{\varepsilon_1(s) + \varepsilon_2(s + k^0) - z} = \int_{T^3} \frac{dp_1 dp_2 dp_3}{\sum_{i=1}^3 [2 - \cos(\pi/2 + p_i)] \sin^4 p_i - z}, \quad z < 0.$$

Согласно этому равенству для каждого фиксированного $\mu > 0$

$$\lim_{z \rightarrow -0} \Delta_\mu(k^0; z) = -\infty.$$

Функция $\Delta_\mu(k^0; \cdot)$ монотонна и непрерывна на луче $(-\infty, 0)$, $\lim_{z \rightarrow -\infty} \Delta_\mu(k^0; z) = 1$, поэтому $\Delta_\mu(k^0; z_0) = 0$ в некоторой точке $z_0 \in (-\infty, 0)$, т.е. оператор $h(k^0)$ имеет отрицательное собственное значение z_0 .

ПРИМЕР 2. Рассмотрим случай, когда в (2.2)

$$\varepsilon_1(p) = \varepsilon_2(p) = \sum_{i=1}^3 (1 - \cos p_i).$$

Пусть $\bar{k} = (\bar{k}_1, \bar{k}_2, \bar{k}_3) \in T^3 \setminus \{0\}$ и $\bar{\mu} > 0$ таково, что

$$\bar{\mu} \int_{T^3} \frac{ds}{\mathcal{E}_{\bar{k}}(s)} = (2\pi)^{3/2}.$$

Тогда $h_{\bar{\mu}}(k^0) \geq 0$. Покажем, что $h_{\bar{\mu}}(0)$ не является положительным оператором. Для этого достаточно показать существование отрицательного собственного значения оператора $h_{\bar{\mu}}(0)$.

Учитывая элементарное равенство

$$\varepsilon_1(p) + \varepsilon_2(p - k) = \sum_{i=1}^3 [2 - \sqrt{2 + 2 \cos k_i} \cos(p_i - \alpha(k_i))], \quad k = (k_1, k_2, k_3),$$

где $\alpha(k_i) = \arcsin \frac{\sin k_i}{\sqrt{2+2\cos k_i}}$, из периодичности функции $\varepsilon_k(\cdot)$ получаем, что

$$\begin{aligned}\Delta_{\bar{\mu}}(\bar{k}; 0) &= 1 - \frac{\bar{\mu}}{(2\pi)^{3/2}} \int_{T^3} \frac{dp_1 dp_2 dp_3}{\sum_{i=1}^3 [2 - \sqrt{2+2\cos \bar{k}_i} \cos(p_i - \alpha(\bar{k}_i))]} = \\ &= 1 - \frac{\bar{\mu}}{(2\pi)^{3/2}} \int_{T^3} \frac{ds_1 ds_2 ds_3}{\sum_{i=1}^3 [2 - \sqrt{2+2\cos \bar{k}_i} \cos s_i]}.\end{aligned}$$

Отсюда и из неравенства

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{ds}{a^2 + \sqrt{2+2\cos \bar{k}_i} \cos s} \leq \int_{-\pi}^{\pi} \frac{ds}{a^2 + 2\cos s},$$

верного при $a \neq 0$, имеем

$$0 = \Delta_{\bar{\mu}}(\bar{k}; 0) > 1 - \frac{\bar{\mu}}{(2\pi)^{3/2}} \int_{T^3} \frac{ds}{\varepsilon_1(s) + \varepsilon_2(s)} = \Delta_{\bar{\mu}}(0; 0).$$

Из условия $\lim_{z \rightarrow -\infty} \Delta_{\bar{\mu}}(0; z) = 1$ и непрерывности функции $\Delta_{\bar{\mu}}(0; \cdot)$ на $(-\infty, 0]$ получаем, что $\Delta_{\bar{\mu}}(0; z_0) = 0$ для некоторого $z_0 \in (-\infty, 0)$, т.е. оператор $h(0)$ имеет отрицательное собственное значение z_0 .

Доказательство следствия. Из теоремы 2 следует, что дискретный спектр оператора $h(k)$, лежащий левее $\varepsilon_{\min}(k)$, является непустым, т.е.

$$\sigma_{\text{disc}}(h(k)) \cap (-\infty, \varepsilon_{\min}(k)) \neq \emptyset.$$

По теореме 1 $h(k) \geq 0$ и поэтому $\sigma_{\text{disc}}(h(k)) \cap (-\infty, \varepsilon_{\min}(k)) \subset [0, \varepsilon_{\min}(k))$.

Благодарности. Работа выполнена при частичной поддержке ФПФИ АН РУз (грант № 77-06).

Список литературы

- [1] Л. Д. Фаддеев, *Тр. МИАН*, **69** (1963), 1–122.
- [2] D. C. Mattis, *Rev. Mod. Phys.*, **58** (1986), 361–379.
- [3] S. Albeverio, S. N. Lakaev, K. A. Makarov, Z. I. Muminov, *Commun. Math. Phys.*, **262** (2006), 91–115.
- [4] Е. Л. Лакштанов, Р. А. Минлос, *Функц. анализ и его прилож.*, **38:3** (2004), 52–69.
- [5] Е. Л. Лакштанов, Р. А. Минлос, *Функц. анализ и его прилож.*, **39:1** (2005), 39–55.
- [6] P. A. Faria da Veiga, L. Ioriatti, M. O'Carroll, *Phys. Rev. E*, **66** (2002), 016130.
- [7] С. Н. Лакаев, М. Э. Муминов, *ТМФ*, **135:3** (2003), 478–503.
- [8] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов*, Мир, М., 1982.
- [9] A. V. Sobolev, *Commun. Math. Phys.*, **156** (1993), 101–126.

Поступила в редакцию 15.01.2007,
после доработки 2.05.2007