

Теорема Вигнера-фон Неймана: отталкивание уровней и вырожденные состояния.

Ю.Н. Демков и П.Б. Курасов

Аннотация. 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.

УДК 517.984, 530.2.

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

1. Введение

Метод расщеплений 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 приводящим к существенному упрощению (обычно к алгебраизации задачи). Физические приложения рассматриваются в [5], а математическая теория изложена в [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 этом случае можно рассматривать возбуждения как квазичастицы опять применяя тот же метод.

Используя метод потенциалов нулевого радиуса мы получаем уникальную возможность решать квантовомеханические задачи явно. 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 изучим свойства этих моделей с точки зрения обратной спектральной задачи и теоремы Вигнера-фон Неймана.

Знаменитая теорема Вигнера-фон Неймана [10] 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 энергетических кривых пересекутся, чрезвычайно мала и это явление получило название межуровневого отталкивания. Обычно два уровня пересекаются только если соответствующие собственные функции имеют различную симметрию. Следовательно появление вырожденных уровней можно ожидать в первую очередь у Гамильтонианов обладающих симметрией. В настоящей работе мы планируем изучить 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. [5, 2, 3] где приведены многочисленные ссылки).

Каждый Гамильтониан с N точечных взаимодействий 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 максимальной возможной кратности $N - 1$.

Работа построена следующим образом. Операторы Шредингера с точечными взаимодействиями введены математически строго в разделе 2 следуя в основном [2, 5]. Поскольку два локальных точечных взаимодействия не могут создать вырожденного уровня (даже кратности 2), мы изучим межуровневое отталкивание в разделе 3. Для случая трех, четырех и пяти центров кратность уровней 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 дельта взаимодействиями в точках $\{y^n\}_{n=1}^N$ формально задается выражением

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

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 чтобы определить этот оператор в \mathbb{R}^3 необходимо принять во внимание дополнительные соображения.

Рассмотрим операторы Лапласа

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

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 ноль в точках взаимодействия

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

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

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

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

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

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

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

Тогда граничные формы сопряженных операторов даются выражениями

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

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Оператор L_α^j есть сужение сопряженного оператора $-\Delta^{j0*}$ на множество функций из $\psi \in \text{Dom}(-\Delta^{j0*})$ удовлетворяющих граничным

условиям

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

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 определенном на функциях удовлетворяющих (8).

В размерности один можно доказать, что оператор соответствующий формальному выражению (1) действительно задается Определением 1. В размерности три необходимо использовать дополнительные соображения такие как однородность оператора Лапласа и дельта взаимодействия чтобы показать, что оператор соответствующий (1) задается Определением 1 (см. [3], Section 1.5.1). Но мы не будем останавливаться на этом моменте, поскольку наши последующие исследования основываются на Определении 1 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 [8]. (Можно показать, что недиагональные матрицы α в (8) приводят к нелокальным взаимодействиям.) Без ограничения общности мы 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 [6, 7, 9], поскольку каждый из операторов L_α^j есть конечномерное возмущение оператора Лапласа $-\Delta^j$ в резольвентном смысле. Следовательно существенный спектр оператора L_α чисто 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 может появиться положительных собственных значений. Точечный спектр оператора задается нулями определителя возмущения который появляется в формуле Крейна.

Уравнение на дискретный спектр можно получить и другим способом рассматривая следующий *Ansatz* для собственных функций

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

где $g^j(x, y)$ есть функции Грина для оператора Лапласа заданные (4). Функция ψ задаваемая (9) удовлетворяет уравнению на собственную функцию при энергии $\lambda = -\chi^2$

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

при любых значениях комплексных параметров a_n . Она является собственной функцией тогда и только тогда, когда она удовлетворяет граничным условиям

(8). Рассмотрим граничные значения функций Грина

(11)

$$g^1 = g^1(x - y^n) \Rightarrow g_{-m}^1 = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}, \quad g_{0m}^1 = \begin{cases} 1/2\chi, & m = n \\ \frac{e^{-\chi|y^n - y^m|}}{2\chi} & m \neq n \end{cases}$$

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

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

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

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

где G^j есть следующие Эрмитовы $N \times N$ матрицы

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

В дальнейшем мы будем изучать решения этих дисперсионных уравнений концентрируя наше 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 вырожденного состояния. Поэтому мы изучим в этом разделе отталкивание между уровнями. Оператор с двумя дельта потенциалами может быть параметризован тремя вещественными параметрами: $d > 0$ - расстояние между центрами, $\alpha_j, j = 1, 2$ - силы точечных взаимодействий.

Рассмотрим в начале случай двух центров в размерности один. Дисперсионное уравнение задается следующей формулой в этом случае

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

Будет удобно использовать следующие параметры

$$(16) \quad \gamma_i = -\frac{1}{2}\alpha_i, \quad i = 1, 2.$$

Тогда дисперсионное уравнение принимает вид

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

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

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

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

Введем два новых параметра

$$(19) \quad \gamma_j = 4\pi/\alpha_j, \quad j = 1, 2,$$

и получим дисперсионное уравнение

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

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

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

Рассмотрим оператор Шредингера с одним дельта взаимодействием

$$-\Delta + \alpha\delta(x).$$

Тогда соответствующий оператор имеет в точности одно связанное состояние с энергией

$$(21) \quad E = -\gamma^2 = -\frac{\alpha^2}{4}, \quad \text{при условии, что } \alpha < 0 \text{ в размерности один}$$

и

$$(22) \quad E = -\gamma^2 = -\frac{(4\pi)^2}{\alpha^2}, \quad \text{при условии, что } \alpha > 0 \text{ в размерности три.}$$

Энергии соответствующие отдельным взаимодействиям могут быть получены из дисперсионных уравнений (17) and (20) рассматривая предел $d \rightarrow \infty$. Экспоненциальная функция стремится к нулю и оба дисперсионных уравнения превращаются в уравнение

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

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

Другая возможность получить эти связанные состояния заключается в рассмотрении предела, когда взаимодействие соответствующее одному из центров

исчезает. Заметим, что исчезающее взаимодействие $\alpha_j = 0$ формально соответствует $\gamma_j = 0$ в \mathbf{R}^1 и $\gamma_j = \infty$ в \mathbf{R}^3 . Пределом уравнений (17) и (20) при $\gamma_2 \rightarrow 0$, соответственно $\gamma_2 \rightarrow \infty$ является уравнение

$$\chi - \gamma_1 = 0.$$

Последнее уравнение 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.

Давайте изучим число собственных значений в зависимости от значений параметров. Без ограничения общности мы можем считать, что $\gamma_1 \geq \gamma_2$. Мы 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, т.к. в этом случае никакая собственная функция не соответствует энергии $E = 0$. Соответствующая функция не лежит в Гильбертовом пространстве.

Давайте изучим три случая покрывающих все возможности (случаи, когда γ_1 или γ_2 равны нулю, могут быть исключены из рассмотрения), по отдельности для точечных взаимодействий в размерностях один и три

- $\gamma_2 \leq \gamma_1 < 0$

Для положительных χ функции $P^1(\chi)$ и $e^{-2\chi d}$ удовлетворяют следующим неравенствам

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

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

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

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

- $\gamma_2 < 0 < \gamma_1$

Функции $P^1(\chi)$ и $e^{-2\chi d}$ равны 1 при $\chi = 0$. Их вторые производные являются отрицательной, соответственно положительной. Значит уравнение (17) имеет не более одного положительного решения и это решение

существует тогда и только тогда, когда

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\chi}(e^{-2\chi d})|_{\chi=0} &< \frac{d}{d\chi}P^1(\chi)|_{\chi=0} \\ \Rightarrow \frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2} &< 2d. \end{aligned}$$

Решение принадлежит интервалу $(0, \gamma_1)$. Давайте обозначим это решение 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, ∞) .

- $0 < \gamma_2 \leq \gamma_1$

Функция P^1 обращается в ноль в точках $\chi = \gamma_1$ и $\chi = \gamma_2$. Она растет 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

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\chi}(e^{-2\chi d})|_{\chi=0} &< \frac{d}{d\chi}P^1(\chi)|_{\chi=0} \\ \Rightarrow \frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2} &< 2d. \end{aligned}$$

Второе решение будет обозначено через χ_2 .

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

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

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. Давайте изучим следующую обратную спектральную задачу для этих операторов

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 $d = 1$. Эта задача может быть решена следующим образом.

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

$\gamma_{1,2}$ удовлетворяют следующей системе уравнений

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

которая может быть переписана как

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

Каждое из двух уравнений является линейным по отношению к γ_i . Значит эта система уравнений может быть решена путем выражения γ_1 из первого уравнения и последующей подстановки во второе уравнение. На этом пути получается квадратичное уравнение, которое всегда может быть решено

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

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

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

Аналогично для трехмерной задачи мы имеем систему уравнений

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

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

Опять существует самосопряженный оператор только если дискриминант (28) неотрицательный.

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 $\chi_2^{\max} = \chi_2^{\max}(\chi_1)$ есть значение χ_2 соответствующее симметричному взаимодействию $\gamma_1 = \gamma_2$. Значения χ_2^{\max} являются единственным решениями следующих уравнений

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

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

Доказательство. Мы будем доказывать теорему для размерностей один и три по отдельности.

Размерность один. Энергии χ_1 и χ_2^{\max} соответствующие симметричному случаю $\gamma_1 = \gamma_2 \equiv \gamma$ могут быть вычислены из следующего уравнения

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

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 $\chi_2 = \chi_2^{\max}$ ($\gamma_1 = \gamma_2$ в этом случае) достаточно показать, что производная $\frac{\partial}{\partial \chi_2} D(\chi_1, \chi_2)$ 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 $B = \chi_1 + A(\chi_1, \chi_2)f(\chi_1)$ производная дискриминанта может быть вычислена

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

Чтобы доказать, что производная $\frac{\partial A(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_2}$ положительна 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

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

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

Размерность три. Давайте введем новые параметры

$$(32) \quad \begin{cases} \xi = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2) \\ \eta = \frac{1}{2}(\gamma_1 - \gamma_2) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \gamma_1 = \xi + \eta \\ \gamma_2 = \xi - \eta \end{cases}$$

Дисперсионное уравнение (20) принимает вид

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

Поскольку χ_1 является решением последнего уравнения мы получаем

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

Теперь частная производная $\frac{\partial \chi_2}{\partial \eta}$ может быть оценена

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

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

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

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

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

Давайте покажем, что дискриминант положителен для всех $\chi_2 \leq \chi_2^{\max}$. Дискриминант квадратичного уравнения (30) на 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 $(\chi_1 - \chi_2)^2 + \frac{(e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2})^2}{(\chi_1 - \chi_2)^2}$ может быть оценена через $(e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2})^2 + \frac{(e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2})^2}{(e^{-\chi_1} + e^{-\chi_2})^2}$ принимая во внимание, что $(\chi_1 - \chi_2)^2 \geq e^{-2\chi_1} - e^{-2\chi_2}$ в соответствии с (35). Значит дискриминант может быть оценен 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 $0 \leq \chi_2 \leq \chi_2^{\max}(\chi_1)$. \square

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 может быть проиллюстрировано следующим рисунком.

Область расположенная между кривыми является запрещенной, т.е. невозможно подобрать два точечных взаимодействия на расстоянии $d = 1$ таким образом чтобы собственные числа располагались в этой области. В пределе $\chi_{1,2} \rightarrow \infty$ обе 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 единственным решением уравнения $x = 1 + e^{-x}$.

Мы доказали, что оператор Шредингера с двумя локальными точечными взаимодействиями не может иметь вырожденных собственных значений. Более

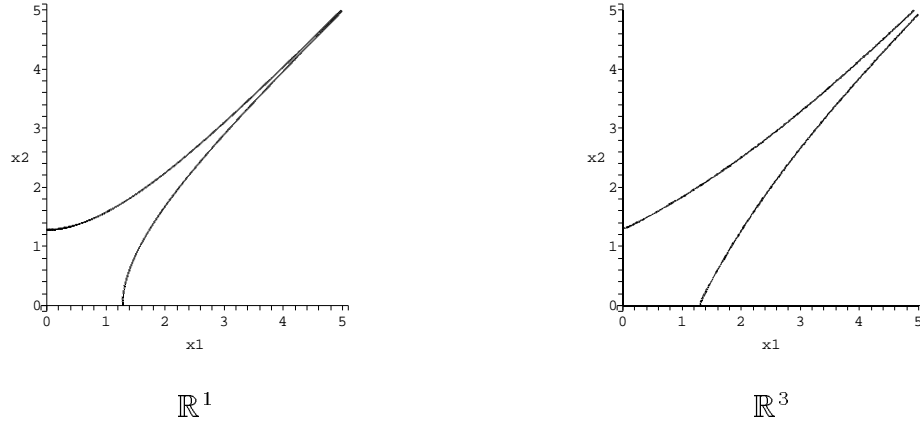


Рис. 1. Межуровневое отталкивание для двух центров.

того эти два собственных значения не могут располагаться произвольно близко друг к другу. Это является некоторым обобщением теоремы Вигнера-фон Неймана [10]. Следует отметить, что последнее утверждение выполнено 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 могут быть изучены 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

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

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. Давайте 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 дополнительно включить спектральный параметр χ . Общее число 2×2 миноров $\binom{n(n-1)}{2}$, но число независимых уравнений всего $\frac{n(n-1)}{2}$ из-за симметрии и специальной формы матрицы. Следовательно вообще говоря имеется $N_{\text{con}} = \frac{n(n-1)}{2}$ 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 внизу приведена максимально возможная размерность D 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 ($N \geq 8$) эта таблица показывает, что 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 3

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

ТЕОРЕМА 2. Для произвольного расположения $\{y^1, y^2, y^3\}$ трех точек в \mathbf{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 3 положительных значения $\gamma_j = 4\pi/\alpha_j$ и следовательно реконструировать параметры задающие дельта взаимодействия в точках y^j . \square

Теорема 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 4 параметрами, как это и было предсказано таблицей.

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

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

и

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

Вторая система описывает некоторую 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 Теоремой 3). После этого, расстояния и энергия тройного связанного состояния могут использоваться для нахождения сил точечных взаимодействий из первых четырех уравнений (38).

Для системы четырех центров давайте введем изопериметрические координаты - суммы длин противоположных ребер в тетраэдре образованном y^1, y^2, y^3, y^4

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

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 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ расположенных в точках y^1, y^2, y^3, y^4 . Этот оператор имеет тройное собственное значение тогда и только тогда, когда одно из следующих условий выполнено*

а) *Если все периметрические координаты различны, то расстояния между центрами должны удовлетворять одному из трех эквивалентных условий*

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

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

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

Энергия тройного собственного значения определяется геометрией центров

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

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

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

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

Тогда тройное собственное значение существует только если условие (41) выполнено, его значение определяется геометрией и дается формулой (44). Значения параметров α_j определяются формулой (38) (при помощи (19)).

с) *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 сторон которого является*

правильный треугольник, а три другие стороны 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.

а) Если все периметрические координаты различны, то параметр χ определяющий энергию тройного состояния может быть вычислен из (39) используя три различных уравнения

$$\begin{aligned}\chi &= -\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{13} - \ln d_{24}}{d_{12} + d_{34} - d_{13} - d_{24}}, \\ \chi &= -\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}}, \\ \chi &= -\frac{\ln d_{13} + \ln d_{24} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{13} + d_{24} - d_{14} - d_{23}}.\end{aligned}$$

Исключая χ тремя различными способами мы получаем (41,42,43) принимая во внимание, что χ должно быть положительным. После этого параметры α_j (или γ_j) могут быть получены из (38).

б) Если две из трех периметрических координат совпадают, например $D_{12} = D_{13}$, то система уравнений (39) эквивалентна следующим двум уравнениям

$$\begin{aligned}-\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{13} - \ln d_{24}}{d_{12} + d_{34} - d_{13} - d_{24}} &= -\frac{\ln d_{12} + \ln d_{34} - \ln d_{14} - \ln d_{23}}{d_{12} + d_{34} - d_{14} - d_{23}} > 0; \\ d_{12}d_{34} &= d_{13}d_{24}.\end{aligned}$$

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

с) Если все периметрические координаты совпадают, то (39) эквивалентно

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

и следовательно четыре центра определяют тетраэдр с одной стороной в виде правильного треугольника. Три оставшиеся стороны одинаковы. В этом случае уравнение (39) выполнено при любом значении энергии $-\chi^2$. После выбора этого параметра равным произвольному отрицательному числу можно вычислить значения всех параметров связи из (38). \square

Первое семейство точечных взаимодействий описывается пятью независимыми параметрами как и предполагалось (см. таблицу). Два других семейства описываются 4 и 3 параметрами соответственно. Последнее семейство представляется наиболее интересным поскольку содержит регулярный тетраэдр - наиболее симметричную конфигурацию четырех центров.

Пять центров. Мы будем рассматривать возможность для этой системы иметь собственное значение кратности 4. Неочевидно, 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 расположена в центре тетраэдра.

Мы обозначим через d длину стороны тетраэдра и через r - радиус описанной сферы содержащей все четыре вершины тетраэдра. Тогда система (36) принимает вид

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

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

$$\begin{aligned} -\chi + \gamma_2 = -\chi + \gamma_3 = -\chi + \gamma_4 = -\chi + \gamma_5 &= \frac{e^{-\chi d}}{d} \\ \Rightarrow \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = \gamma_5 &= \chi + e^{-\chi d}/d \end{aligned}$$

и

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

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

Шесть и более центров. Рассмотрим систему шести центров. Таблица предсказывает, что множество параметров приводящих к максимальной вырожденности описывается четырьмя параметрами. Давайте проанализируем наиболее симметричную конфигурацию шести центров - точки расположенные в вершинах октаэдра. Матрица принимает следующий вид

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

где d - длина ребра октаэдра. Строки параллельны только если выполнено

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

Но параметр χ должен быть положительным. Следовательно эта система не может иметь собственного значения кратности 5. Последнее уравнение определяет резонанс вместо собственного значения. Мы предполагаем, что система из 6 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 $N > 6$. Мы планируем вернуться к этой проблеме в одной из последующих публикаций.

Заключение. Авторы выражают благодарность Шведской Королевской Академии Наук и Фонду Фундаментальных Исследований (Vetenskapsrådet) за финансовую поддержку.

Литература

- [1] М.Н. Адамов, Ю.Н. Демков, В.Д. Обьедков, и Т.К. Ребанэ, Модель потенциалов нулевого радиуса для молекулярных систем, *Теор. Эксп. Химия*, **4** (1968), 147.
- [2] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Nøegh-Krohn, and H. Holden, Solvable models in quantum mechanics. Second edition. With an appendix by Pavel Exner. AMS Chelsea Publishing, Providence, RI, 2005.
- [3] S. Albeverio and P. Kurasov, *Singular perturbations of differential operators. Solvable Schrödinger type operators*, London Mathematical Society Lecture Note Series, 271. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [4] Ю.Н. Демков, Г.Ф. Друкарев, В.В. Кучинский, Диссоциация отрицательных ионов в приближении потенциалов нулевого радиуса, *ЖЭТФ*, **58** (1970), 944.
- [5] Ю.Н. Демков и В.Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, Изд-во Ленинградского Университета, Ленинград, 1975.
- [6] М.Г. Крейн, Об Эрмитовых операторах с индексами дефекта 1, *ДАН*, **43**, 131, 1944.
- [7] М.Г. Крейн, Об Эрмитовых операторах с индексами дефекта один Π , *ДАН*, **44**, 131, 1944.
- [8] P. Kurasov and A. Posilicano, Finite speed of propagation and local boundary conditions for wave equations with point interactions. *Proc. Amer. Math. Soc.* **133** (2005), 3071.
- [9] М. Наймарк, О спектральной функции симметричного оператора, *Известия АН СССР*, **7**, 285, 1943.
- [10] J. von Neumann and E. Wigner, Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen, *Phys. Zeit.*, **30** (1929), 467.

English title and abstract

**von Neumann-Wigner theorem:
level's repulsion and degenerate eigenvalues.**

Yu.N.Demkov and P.Kurasov

Abstract Spectral properties of Schrödinger operators with point interactions are investigated. Attention is focused on the interplay between the level's repulsion (von Neumann-Wigner theorem) and the symmetry of the points configuration. Explicit solvability of the problem allows to observe level's repulsion for two centers. For larger number of centers the families of point interactions leading to the highest possible degeneracy is investigated.

Сведения об авторах

Павел Борисович Курасов

(автор, которому должна быть адресована корреспонденция)

Научно-исследовательский Институт Физики, Санкт-Петербургский Университет

198904 Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Ульяновская улица, дом 1, Санкт-Петербургский Университет, Научно-исследовательский Институт Физики, Лаборатория Квантовых Сетей

и

Институт Математики, Университет г. Лунда, 221 00 Лунд, Швеция

e-mail: pak@math.su.se

Контактный телефон: (812) 2340791

Юрий Николаевич Демков

Научно-исследовательский Институт Физики, Санкт-Петербургский Университет

198904 Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Ульяновская улица, дом 1, Санкт-Петербургский Университет, Научно-исследовательский Институт Физики, Кафедра Квантовой Механики

Контактный телефон: (812) 2320267

Название Работы: Теорема Вигнера-фон Неймана: отталкивание уровней и вырожденные состояния.

Авторы: Ю.Н. Демков и П.Б. Курасов

Аннотация 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.

УДК 517.984, 530.2.

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

Particulars about the authors

Pavel Kurasov

(corresponding author)

Physics Research Institute, St.Petersburg University

Russia, 198904 St.Petersburg, St. Peterhof Ul'yanovskaya 1, St.Petersburg University,

Physics Research Institute, Laboratory of Quantum Networks

and

Dept. of Mathematics, Lund University, 221 00 Lund, Sweden

e-mail: pak@math.su.se

Contact phone number: (812) 2340791

Yurii N. Demkov

Physics Research Institute, St.Petersburg University

Russia, 198904 St.Petersburg, St. Peterhof Ul'yanovskaya 1, St.Petersburg University,

Physics Research Institute, Dept. of Quantum Mechanics

Contact phone number: (812) 2320267

Title: von Neumann-Wigner theorem: level's repulsion and degenerate eigenvalues.

Authors: Yu.N.Demkov and P.Kurasov

Abstract Spectral properties of Schrödinger operators with point interactions are investigated. Attention is focused on the interplay between the level's repulsion (von Neumann-Wigner theorem) and the symmetry of the points configuration. Explicit solvability of the problem allows to observe level's repulsion for two centers. For larger number of centers the families of point interactions leading to the highest possible degeneracy is investigated.

UDC 517.984, 530.2.

Keywords: Wigner-von Neumann theorem, zero-range potentials, extension theory, inverse spectral problem.