arXiv:2301.02848v2 [math-ph] 2 Sep 2024

对角线处单粒子库仑密度矩阵五阶导数的有界性

PETER HEARNSHAW

Abstract. 本文证明了非相对论库仑波函数对应的单粒子约化密度矩阵在对角线附近的五阶导数有界。为证明这一结果，我们为涉及多个簇的波函数的簇导数建立了强逐点界。

1. Introduction and results

我们考虑由 $N \geq 2$ 个电子和 $N_0 \geq 1$ 个位置固定的原子核构成的非相对论量子系统，该系统代表一个原子或分子。为简单起见，我们省略自旋坐标，仅讨论原子情形（$N_0 = 1$），不过所有结果同样适用于包含自旋的情形，也很容易推广到分子情形。因此，电子的坐标为 $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_N)$ $x_k \in \mathbb{R}^3$, $k = 1, \ldots, N$，原子核的电荷为 $Z > 0$，其位置选定为固定在 $\mathbb{R}^3$ 的原点处。相应的薛定谔算子为

$$H = -\Delta + V \tag{1.1}$$

其中 $\Delta = \sum_{k=1}^{N} \Delta_{x_k}$ 是 $\mathbb{R}^{3N}$ 中的拉普拉斯算子，即 Δ_{x_k} 表示作用于变量 x_k 的拉普拉斯算子，而 V 是如下给出的库仑势

$$V(\mathbf{x}) = -\sum_{k=1}^{N} \frac{Z}{|x_k|} + \sum_{1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{|x_j - x_k|} \tag{1.2}$$

对于 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。该算子作用于 $L^2(\mathbb{R}^{3N})$，并且在 $H^2(\mathbb{R}^{3N})$ 上自伴，参见例如 [1, 定理 X.16]。我们在算子意义下考虑 H 的特征值问题的解，即

$$H\psi = E\psi \tag{1.3}$$

对于 $\psi \in H^2(\mathbb{R}^{3N})$ 和 $E \in \mathbb{R}$。

关于波函数ψ的正则性和可微性，已有长期的研究历史；部分精选参考文献见 [2], [3], [4], [5], [6], [7], [8]。近年来，人们对约化密度矩阵的正则性日益关注，这些对象由此类波函数导出。尤其值得关注的是其非光滑性

2020年数学主题分类。35B65、35J10、81V55、81V70。

在“对角线”处的非光滑性，这是电子间相互作用的特征。在 A.V. Sobolev 与本文作者此前的研究中，已证明密度矩阵在对角线处经至多四阶求导后仍有界， [9], 并且还提出，这一结论对五阶导数也应成立，另见 [10], [11]。本文证明了这一猜想正确。

现在我们引入记号，并精确定义研究对象。对于每个 $j = 1, \dots, N$，我们表示

$$\hat{\mathbf{x}}_j = (x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_N), \quad (x, \hat{\mathbf{x}}_j) = (x_1, \dots, x_{j-1}, x, x_{j+1}, \dots, x_N)$$

对于 $x \in \mathbb{R}^3$。我们将单粒子约化密度矩阵，或简称密度矩阵，定义为

$$\gamma(x, y) = \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \overline{\psi(y, \hat{\mathbf{x}})} \, d\hat{\mathbf{x}}, \qquad \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}_1. \tag{1.4}$$

对于 $x, y \in \mathbb{R}^3$。更常见的是，单粒子约化密度矩阵被定义为函数

$$\tilde{\gamma}(x, y) = \sum_{j=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \psi(x, \hat{\mathbf{x}}_j) \overline{\psi(y, \hat{\mathbf{x}}_j)} \, d\hat{\mathbf{x}}_j, \quad x, y \in \mathbb{R}^3. \tag{1.5}$$

然而，由于我们只关注正则性性质，只需研究式 (1.5) 中的一项，因此我们采用定义 (1.4)。事实上，只要 ψ 是全对称或反对称的，就有 $\tilde{\gamma}(x, y) = N\gamma(x, y)$；不过在本文中，我们不对 ψ 作任何对称性假设。另一个相关的重要函数是单粒子密度，或简称密度，在此定义为

$$\rho(x) = \gamma(x, x) = \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} |\psi(x, \hat{\mathbf{x}})|^2 \, d\hat{\mathbf{x}}, \quad x \in \mathbb{R}^3. \tag{1.6}$$

现在设 ψ 是满足式 (1.3) 且 $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^{3N})} = 1$ 的任意特征函数，并令 ρ 和 γ 分别为式 (1.6) 和 (1.4) 中定义的相应函数。在 [12], 中（另见 [13], ），证明了 $\gamma(x, y)$ 作为两个变量的函数，在集合

$$\mathcal{D} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 : x \neq 0, y \neq 0, x \neq y\}.$$

特别是，在对角线处（即 $x = y$ 所在处）并未证明实解析性。尽管如此，如 [14], 所示，密度 ρ 在集合 $\mathbb{R}^3 \backslash \{0\}$ 上具有实解析性，另见 [15]。因此，除点 $x = y = 0$ 外， γ 沿对角线 $x = y$ 在一个变量上具有实解析性。然而，如 [9, 中的注 1.2(7)] 所述，密度 γ 在对角线处并非光滑；这与 [16] 中密度矩阵算子的特征值呈多项式衰减有关，另见 [17], 和 [18]。我们还注意到，文献 [19] 也直接证明了 $(N-1)$ 粒子约化密度矩阵的不光滑性。

对角线处非光滑性的最初迹象似乎来自 [10], ，另见 [11]。在此，量子化学计算表明存在一个五阶

尖点，其形式为 $|x-y|^5$，位于对角线上。为严格阐明对角线处的结构，随后在 [9]中给出了集合 $\mathcal{D}$ 上 γ 的逐点导数估计。鉴于这些估计在当前结果中的重要性，我们陈述以下界，这些界源自 [9, 定理 1.1]。对于 $b \geq 0$， $t > 0$，先定义

$$h_b(t) = \begin{cases} t^{\min\{0,5-b\}} & \text{if } b \neq 5 \\ \log(t^{-1}+2) & \text{if } b = 5. \end{cases}$$

我们记 $\mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}$。对于所有满足 $|\alpha|$ 的 $R > 0$ 和 α，存在 C，使得 $\beta \in \mathbb{N}_0^3$，

$$|\partial_x^\alpha \partial_y^\beta \gamma(x,y)| \leq C\big(1+|x|^{2-|\alpha|-|\beta|} + |y|^{2-|\alpha|-|\beta|} + h_{|\alpha|+|\beta|}(|x-y|)\big) \|\rho\|_{L^1(B(x,R))}^{1/2} \|\rho\|_{L^1(B(y,R))}^{1/2}, \tag{1.7}$$

并且对于所有 $|\alpha| \geq 1$，存在 C，使得

$$|\partial_x^\alpha \gamma(x,y)| + |\partial_y^\alpha \gamma(x,y)| \leq C\big(1+|x|^{1-|\alpha|} + |y|^{1-|\alpha|} + h_{|\alpha|}(|x-y|)\big) \|\rho\|_{L^1(B(x,R))}^{1/2} \|\rho\|_{L^1(B(y,R))}^{1/2}, \tag{1.8}$$

对于所有满足 $x \neq 0$ 的 x 和 $y \in \mathbb{R}^3$，以及 $x \neq y$。记号 ∂_x^α 表示关于变量 x 的 α 阶偏导数。常数 C 取决于 α、 β、 R、 N 和 Z。右端有限，因为 ψ 已归一化，因此 $\rho \in L^1(\mathbb{R}^3)$。密度矩阵 γ 可见是局部 Lipschitz 连续的，这是因为 γ 在 $\mathbb{R}^6$ 上的一阶导数局部有界。此外，在对角线上直至四阶导数均局部有界。

最后，我们评述 T. Jecko 的一项近期结果： [20], 该结果表明，在 $(N-1)$ 粒子密度矩阵这一特殊情形下，可以得到一个公式，其中包含一个具有五阶尖点的项，以及一个更光滑的余项。由于证明方法涉及 ψ 在 [6], 中的解析表示，这一结果无法以直接明了的方式推广到一般的 k 粒子情形，包括单粒子情形。

我们的主要结果如下。

定理 1.1. 设 ψ 是 (1.3) 的一个特征函数。定义 $m(x,y) = \min\{1, |x|, |y|\}$。那么，对于所有 $|\alpha|+|\beta| = 5$，存在依赖于 Z、 N 和 E的 C，使得

$$|\partial_x^\alpha \partial_y^\beta \gamma(x,y)| \leq \begin{cases} Cm(x,y)^{-3} \|\rho\|_{L^1(B(x,1))}^{1/2} \|\rho\|_{L^1(B(y,1))}^{1/2} & \text{if } |\alpha|, |\beta| \geq 1 \\ Cm(x,y)^{-4} \|\rho\|_{L^1(B(x,1))}^{1/2} \|\rho\|_{L^1(B(y,1))}^{1/2} & \text{otherwise} \end{cases} \tag{1.9}$$

对于所有满足 $0 < |x-y| \leq m(x,y)/2$ 的 x、 $y \in \mathbb{R}^3$，均有。

注 1.2. (1) 界 (1.9) 自然地补充了 $|\alpha| + |\beta| \neq 5$ 的 (1.7) 和 (1.8)。

(2) 作为 [9, 命题 A.1] 和索伯列夫嵌入的推论，不等式 (1.9) 表明 $\gamma \in C^{4,1}\big((\mathbb{R}^3\backslash\{0\}) \times (\mathbb{R}^3\backslash\{0\})\big)$。该空间的定义见下文注 1.4。(3) 鉴于 [9, 注 1.2(7)]，，对角线处五阶导数的有界性与 [17] 中给出的密度矩阵算子的特征值衰减渐近性相一致。此外，这种分析表明，六阶导数通常将是无界的。

证明的思路是借助适当的截断函数，将密度矩阵 $\gamma(x, y)$ 的偏导数转化为积分下的某些方向导数，这些方向导数称为簇导数。随后，可以利用 ψ 的簇导数的逐点界来估计所得积分。这一方法借鉴了 [21], [14]、[8] 中用于对密度 ρ 求导，以及 [12], [9] 中用于对密度矩阵求导的类似策略。然而，要证明密度矩阵五阶导数有界，需要对这些技巧进行大幅改进。

我们将考察 $\gamma(x, y)$ 的导数，不仅考察沿 x 和 y 的导数，也考察沿方向 $x+y$ 的导数。事实证明，这类导数不会对对角线处的奇异性有所贡献。为证明这一点，我们需要关于 ψ 的簇导数界，这些导数涉及多个簇，而且关键的是，界需要区分各簇导数的阶数。所得结果即为定理 1.3，并在第 2 节中证明。第 3 节将引入截断函数，它们与 [12], [9] 中使用的截断函数类似，但更为精细，因为粒子不仅被分组成与 x、y 相关的不同所谓簇，还会被分组成与 $x+y$ 相关的簇，这一点至关重要。在第 4 节中，我们将证明，由于关于 $(x+y)$ 阶导数的结果，只需证明导数 $\partial_x^\alpha \partial_y^\beta \gamma$ 满足 $|\alpha|$、$|\beta| \geq 1$ 时在对角线处有界。对于这类导数，我们需要将 ψ 的簇导数表示为一个“好”项和一个“坏”项，见定理 1.3 的 (1.34)。对“好”项的界比以往结果更强，例如 [8, 命题 1.12] 和 [9, 定理 4.3] 中所得的界。利用 [22] 的最优乘法因子，可以证明这一进一步加强的结果。“ 坏 ” 项无法得到足够强的界，但可以通过一系列涉及分部积分的步骤来处理。

记号。正如前文所述，我们采用标准记号，其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N}$, $x_j \in \mathbb{R}^3$, $j = 1, \dots, N$，且 N 表示电子数。此外，定义 $1 \leq j, k \leq N$, $j \neq k$,

$$\hat{\mathbf{x}}_j = (x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_N) \tag{1.10}$$

$$\hat{\mathbf{x}}_{j,k} = (x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_N) \tag{1.11}$$

若 j, k 等于 1 或 N，以及若 $k < j$，则作显而易见的修改。我们定义 $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}_1$，，并将在全文中使用。置于 $\hat{\mathbf{x}}_j$ 和 $\hat{\mathbf{x}}_{j,k}$ 之前的变量将置于

如下所示的空缺位置中：对任意 $x, y \in \mathbb{R}^3$，我们有

$$(x, \hat{\mathbf{x}}_j) = (x_1, \ldots, x_{j-1}, x, x_{j+1}, \ldots, x_N), \tag{1.12}$$

$$(x, y, \hat{\mathbf{x}}_{j,k}) = (x_1, \ldots, x_{j-1}, x, x_{j+1}, \ldots, x_{k-1}, y, x_{k+1}, \ldots, x_N). \tag{1.13}$$

由此，$\mathbf{x} = (x_j, \hat{\mathbf{x}}_j) = (x_j, x_k, \hat{\mathbf{x}}_{j,k})$。

对于变量 $x, y \in \mathbb{R}^3$，方向导数 ∂_{x+y} 定义为

$$\partial^\alpha_{x+y} = \partial^\alpha_x + \partial^\alpha_y \quad \text{for } \alpha \in \mathbb{N}^3_0, |\alpha| = 1. \tag{1.14}$$

Hig更高阶导数 ∂^α_{x+y} 由连续的一阶导数定义。

我们将簇定义为任意子集 $P \subset \{1, \ldots, N\}$。记作 $P^c = \{1, \ldots, N\} \backslash P$，$P^* = P \backslash \{1\}$。我们还需要簇集 $\mathbf{P} = (P_1, \ldots, P_M)$，其中 $M \geq 1$和$P_1, \ldots, P_M$为簇。

对于非空簇 P，一阶簇导数定义为

$$D^\alpha_P = \sum_{j \in P} \partial^\alpha_{x_j} \quad \text{for } \alpha \in \mathbb{N}^3_0, |\alpha| = 1. \tag{1.15}$$

对于 $P = \emptyset$，D^α_P 定义为恒等映射。对于 $\alpha = (\alpha', \alpha'', \alpha''') \in \mathbb{N}^3_0$ 且满足 $|\alpha| \geq 2$，高阶簇导数定义为依次应用一阶簇导数，如下所示，

$$D^\alpha_P = (D^{e_1}_P)^{\alpha'} (D^{e_2}_P)^{\alpha''} (D^{e_3}_P)^{\alpha'''} \tag{1.16}$$

其中，e_1、e_2、e_3是 $\mathbb{R}^3$的标准单位基向量。设 $\mathbf{P} = (P_1, \ldots, P_M)$ 和$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_M)$，$\alpha_j \in \mathbb{N}^3_0$、$1 \leq j \leq M$，则我们将多簇导数（通常简称为簇导数）定义为

$$D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}} = D^{\alpha_1}_{P_1} \ldots D^{\alpha_M}_{P_M}. \tag{1.17}$$

不难看出，簇导数满足莱布尼茨法则。

在全文中，字母 C 表示一个正定常数，其具体取值并不重要，且可能依赖于 Z、N 以及特征值 E。

距离函数记号与初等结果。对于非空簇 P，定义

$$\Sigma_P = \Big\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N} : \prod_{j \in P} |x_j| \prod_{\substack{l \in P \\ m \in P^c}} |x_l - x_m| = 0 \Big\}. \tag{1.18}$$

对于 $P = \emptyset$，我们设定 $\Sigma_P := \emptyset$。记 $\Sigma^c_P = \mathbb{R}^{3N} \backslash \Sigma_P$。对于每个 P，我们有 $\Sigma_P \subset \Sigma$，其中

$$\Sigma = \Big\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N} : \prod_{1 \leq j \leq N} |x_j| \prod_{1 \leq l < m \leq N} |x_l - x_m| = 0 \Big\} \tag{1.19}$$

V 是库仑势的奇点集合，（1.2）。对于任意簇 P，我们可以定义以下距离

$$d_P(\mathbf{x}) := \operatorname{dist}(\mathbf{x}, \Sigma_P) = \min\left\{|x_j|, 2^{-1/2}|x_j - x_k| : j \in P, k \in P^c\right\} \tag{1.20}$$

$$\lambda_P(\mathbf{x}) := \min\{1, d_P(\mathbf{x})\} \tag{1.21}$$

$$\nu_P(\mathbf{x}) := \min\{1; |x_j| : j \in P\} \tag{1.22}$$

对所有的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。

利用公式 (1.20)，例如参见 [9, 引理 4.2]，可以证明

$$|d_P(\mathbf{x}) - d_P(\mathbf{y})|, |\lambda_P(\mathbf{x}) - \lambda_P(\mathbf{y})|, |\nu_P(\mathbf{x}) - \nu_P(\mathbf{y})| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \tag{1.23}$$

对所有的 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{3N}$。

设 $\mathbf{P} = (P_1, \ldots, P_M)$ 为一个簇集，且 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_M) \in \mathbb{N}_0^{3M}$为一个多重指标。定义

$$\Sigma_{\boldsymbol{\alpha}} = \bigcup_{j\,:\,\alpha_j \neq 0} \Sigma_{P_j} \tag{1.24}$$

对于非零的 $\boldsymbol{\alpha}$，且当 $\boldsymbol{\alpha} = 0$ 时，令 $\Sigma_{\boldsymbol{\alpha}} = \emptyset$。记 $\Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}^c = \mathbb{R}^{3N} \backslash \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$。对于非零的 $\boldsymbol{\alpha}$，我们还可以定义距离

$$d_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = \min\{d_{P_j}(\mathbf{x}) : \alpha_j \neq 0, j = 1, \ldots, M\}, \tag{1.25}$$

$$\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = \min\{\lambda_{P_j}(\mathbf{x}) : \alpha_j \neq 0, j = 1, \ldots, M\}, \tag{1.26}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。注意，我们还有如下恒等式

$$d_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = \operatorname{dist}(\mathbf{x}, \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}).$$

事实上，由于对于满足 $\alpha_j \neq 0$ 的任意 j，都有 $\Sigma_{P_j} \subset \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$，因此 $\operatorname{dist}(\mathbf{x}, \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}) \leq d_{P_j}(\mathbf{x})$，从而 $\operatorname{dist}(\mathbf{x}, \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}) \leq d_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$。反过来，对于每个 $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$，都有某个 j 使得 $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma_{P_j}$ 且满足 $\alpha_j \neq 0$，因此 $|\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}| \geq d_{P_j}(\mathbf{x})$。所以，$|\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}| \geq d_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$。对 $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$ 取下确界，即得反向不等式。

。我们还将使用以下相关量，它们涉及非零 $\boldsymbol{\alpha}$ 的相关距离的最大值，

$$q_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = \max\{d_{P_j}(\mathbf{x}) : \alpha_j \neq 0, j = 1, \ldots, M\} \tag{1.27}$$

$$\mu_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = \max\{\lambda_{P_j}(\mathbf{x}) : \alpha_j \neq 0, j = 1, \ldots, M\}. \tag{1.28}$$

对于 $\boldsymbol{\alpha} = 0$，我们令 $d_{\boldsymbol{\alpha}}$、$q_{\boldsymbol{\alpha}} \equiv 0$，以及 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}$、$\mu_{\boldsymbol{\alpha}} \equiv 1$。

为陈述结果，我们先对任意函数 u 和任意 $r > 0$ 定义如下：

$$f_\infty(\mathbf{x}; r; u) := \|\nabla u\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r))} + \|u\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r))} \tag{1.29}$$

对于 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。球 $B(\mathbf{x}, r)$ 在 $\mathbb{R}^{3N}$ 中考虑。通常，这一记号将用于 $u = \psi$，此时我们采用如下记号

$$f_\infty(\mathbf{x}; r) := f_\infty(\mathbf{x}; r; \psi). \tag{1.30}$$

此外，之后我们将不再跟踪对 r 的依赖，因此定义如下会比较方便

$$f_\infty(\mathbf{x}) := f_\infty\Big(\mathbf{x}; \frac{1}{2}; \psi\Big). \tag{1.31}$$

逐点簇导数界。为证明定理 1.1，我们将陈述并证明一个关于特征函数 ψ 的簇导数的新逐点界，该结果本身也具有独立研究价值。我们将通过椭圆正则性证明，对于所有 $\boldsymbol{\alpha}$，弱簇导数 $D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}\psi$ 在集合 $\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$ 中存在。我们考察当集合 $\Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$ 逐渐逼近时，这些簇导数的行为。

此前，S. Fournais 和 T. Ø. Sørensen 已给出了单个簇 P 的 ψ 簇导数的局部 L^p-范数界。事实上，在 [8, 命题 1.12] 中，他们证明了对于任意多重指标 $0 \neq \alpha \in \mathbb{N}_0^3$，$p \in (1, \infty]$，以及任意 $0 < r < R < 1$，都存在一个 C，它依赖于 r、R、p 和 α，使得

$$\|D^\alpha_P \psi\|_{L^p(B(\mathbf{x}, r\lambda_P(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_P(\mathbf{x})^{1-|\alpha|}\big(\|\nabla\psi\|_{L^p(B(\mathbf{x}, R\lambda_P(\mathbf{x})))} + \|\psi\|_{L^p(B(\mathbf{x}, R\lambda_P(\mathbf{x})))}\big) \tag{1.32}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_P$。注意，根据 $\lambda_P(\mathbf{x})$ 的定义，对于每个 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_P$，我们都有 $B(\mathbf{x}, r\lambda_P(\mathbf{x})) \subset \Sigma^c_P$。由于 ψ 和 $\nabla\psi$ 都是局部有界的，指数 $1 - |\alpha|$ 是自然的，因此我们仅在 $|\alpha| \geq 2$ 处得到奇异性。

下面定理的目标是在 $p = \infty$ 的情形下，将界 (1.32) 推广到可能包含多个簇的簇集 $\mathbf{P}$。关于簇集的界见 [9, 定理 4.3]，，但在这里我们得到的估计取决于 $\mathbf{P}$ 中每个簇上的导数阶数。这对于证明密度矩阵的五阶导数在对角线处有界至关重要。符号 ∇ 表示 $\mathbb{R}^{3N}$ 中的梯度算子。

定理 1.3。对于每个簇集 $\mathbf{P} = (P_1, \ldots, P_M)$、多重指标 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^{3M}$ 以及任意 $R > 0$，存在 C，其取决于 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 R，使得对于 $k = 0, 1$，

$$|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}} \nabla^k \psi(\mathbf{x})| \leq C\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{1-k}\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|} \ldots \lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|} f_\infty(\mathbf{x}; R) \tag{1.33}$$

对所有的 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$。

此外，对每个 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq 1$，都存在一个函数 $G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}} : \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}} \to \mathbb{C}^{3N}$，使得

$$D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}} \nabla\psi = G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}} + \psi\, D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}} \nabla F_c, \tag{1.34}$$

其中 F_c 在式 (2.1) 中定义；并且对每个 $0 \leq b < 1$，都存在 C，它依赖于 $\boldsymbol{\alpha}$、R 和 b，使得

$$|G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(\mathbf{x})| \leq C\mu_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^b \lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|} \ldots \lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|} f_\infty(\mathbf{x}; R) \tag{1.35}$$

对所有的 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$。

注 1.4. (1) 在单个簇且 $k = 0$ 的情形下，界 (1.33) 重新得到了 $p = \infty$ 情形下的 (1.32)，尽管右端 L^∞ 范数中的半径更大，但这与我们无关。

(2) 对于 $k = 0$，界 (1.33) 中出现的单个 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$ 幂会抵消 j 的最小 $\lambda_{P_j}(\mathbf{x})$ 的一个负幂，使得 $\alpha_j \neq 0$。注意，适当的 j 取决于 $\mathbf{x}$。(3) 当 $k = 1$ 时，(1.35) 中的界强于 (1.33) 中的界。这是因为 j 的最大 $\lambda_{P_j}(\mathbf{x})$ 的一个负幂会被 $\mu_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$ 的正幂部分抵消，使得 $\alpha_j \neq 0$。(1.34) 中的项 $\psi D^{\mathfrak{a}}_{\mathbf{P}} \nabla F_c$ 对于 $k = 1$ 只能满足类似 (1.33) 的界，因此代表了 $D^{\mathfrak{a}}_{\mathbf{P}} \nabla \psi$ 中妨碍导数界得到改进的部分。

定理 1.3 的证明将采用与最初用于[8, 命题 1.12], 并在 [9, 定理 4.3]中进一步发展的策略类似的方法。证明 (1.35) 还需要一项额外结果。该结果 [22], 表明，通过乘以一个因子，可以使 ψ 成为 $W^{2,\infty}_{loc}(\mathbb{R}^{3N})$；所谓该因子具有普适性，是指它仅依赖于 N 和 Z。

我们需要以下椭圆正则性结果，并将在证明中使用。在此之前，我们先明确将要使用的定义的准确形式。设 Ω 为开集，$\theta \in (0, 1]$ 和 $k = \mathbb{N}_0$。我们正式定义函数 f 的 θ-H¨older 半范数如下：

$$[f]_{\theta,\Omega} = \sup_{\substack{x,y\in\Omega \\ x\neq y}} \frac{|f(x) - f(y)|}{|x - y|^{\theta}},$$
$$[\nabla^k f]_{\theta,\Omega} = \sup_{|\alpha|=k} [\partial^{\alpha} f]_{\theta,\Omega}.$$

空间 $C^{k,\theta}(\Omega)$ 定义为所有满足以下条件的 $f \in C^k(\Omega)$：对于每个紧包含于 Ω 中的 Ω'，$[\nabla^k f]_{\theta,\Omega'}$ 均有限。此外，空间 $C^{k,\theta}(\Omega)$ 定义为所有满足 $[\nabla^k f]_{\theta,\Omega}$ 有限的 $f \in C^k(\Omega)$。该空间的范数定义为

$$\|f\|_{C^{k,\theta}(\overline{\Omega})} = \|f\|_{C^k(\overline{\Omega})} + [\nabla^k f]_{\theta,\Omega}.$$

对于开集 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$，我们可以考虑以下椭圆方程，

$$Lu := -\Delta u + \mathbf{c} \cdot \nabla u + du = g \tag{1.36}$$

其中 $\mathbf{c} : \Omega \to \mathbb{C}^n$，且 $d, g : \Omega \to \mathbb{C}$。算子 L对应的双线性形式形式上定义为

$$\mathcal{L}(u, \chi) = \int_{\Omega} \left(\nabla u \cdot \nabla \chi + (\mathbf{c} \cdot \nabla u)\chi + du\chi \right) dx$$

对于所有 $u \in H^1_{loc}(\Omega)$ 和 $\chi \in C^{\infty}_c(\Omega)$。我们称函数 $u \in H^1_{loc}(\Omega)$ 是 Ω 中方程 (1.36) 的弱解，如果对每个 $\chi \in C^{\infty}_c(\Omega)$，都有 $\mathcal{L}(u, \chi) = \int_{\Omega} g\chi \, dx$。

下述定理是对 [9,命题 3.1] （[8, 命题 A.2] 类似）的重述，并补充了由证明得出的 Hölder 正则性。

定理 1.5。设 $x_0 \in \mathbb{R}^n$、 $R > 0$ 和 c d、 $g \in L^\infty$（B（x_0， R））及 $u \in H^1$（B（x_0， R））是方程 (1.36) 的一个弱解，则对每个 $\theta \in [0,1)$，我们有 $u \in C^{1,\theta}$（B（x_0， R））$\cap H^2_{loc}$（B（x_0，R））， 并且对任意 $r \in$（0， R），我们有

$$\|u\|_{C^{1,\theta}(\overline{B(x_0,r)})} \leq C(\|u\|_{L^2(B(x_0,R))} + \|g\|_{L^\infty(B(x_0,R))}) \tag{1.37}$$

对于 $C = C(n, K, r, R, \theta)$，其中

$$\|\mathbf{c}\|_{L^\infty(B(x_0,R))} + \|d\|_{L^\infty(B(x_0,R))} \leq K.$$

2. Proof of Theorem 1.3

证明将通过使用一个乘法因子来提高 ψ 的正则性。在数学文献中，这种因子常称为 Jastrow 因子。这一策略已被成功用于例如 [21], [4]，以阐明 ψ 的正则性性质。我们首先定义函数 $F = F(\mathbf{x})$，它仅依赖于 N 和 Z，使得函数 $e^{-F}\psi$ 满足一个具有有界系数的椭圆方程。这些系数在簇导数作用下表现良好。这使我们能够利用椭圆正则性，为 $e^{-F}\psi$ 的簇导数建立界，进而也为 ψ 本身建立界。

2.1. Jastrow 因子。我们先定义

$$F(\mathbf{x}) = F_c(\mathbf{x}) - F_s(\mathbf{x}), \quad F_c(\mathbf{x}) = F_c^{(en)}(\mathbf{x}) + F_c^{(ee)}(\mathbf{x}) \tag{2.1}$$

其中

$$F_c^{(en)}(\mathbf{x}) = -\frac{Z}{2}\sum_{1\leq j\leq N}|x_j|, \quad F_c^{(ee)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4}\sum_{1\leq l<k\leq N}|x_l - x_k|, \tag{2.2}$$

$$F_s(\mathbf{x}) = -\frac{Z}{2}\sum_{1\leq j\leq N}\sqrt{|x_j|^2+1} + \frac{1}{4}\sum_{1\leq l<k\leq N}\sqrt{|x_l - x_k|^2+1}, \tag{2.3}$$

对于 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。函数 F 曾用于 [8]。现在我们详细介绍这些函数的一些基本事实。首先，

$$\Delta F_c = V \tag{2.4}$$

其中 V 是库仑势 (1.2)。函数 F_s 在无穷远处的行为与 F_c 相同。然而， $F_s \in C^\infty(\mathbb{R}^{3N})$ 和

$$\partial^\alpha F_s \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N}) \quad \text{for all } \alpha \in \mathbb{N}_0^{3N}, |\alpha| \geq 1. \tag{2.5}$$

最后，函数 F 满足

$$F, \nabla F \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N}). \tag{2.6}$$

函数 F 用于定义以下对象，该对象将在整个证明过程中使用：

$$\phi = e^{-F}\psi. \tag{2.7}$$

利用 (1.3) 可以证明，对于弱解 ϕ，以下椭圆方程成立 ，

$$-\Delta\phi - 2\nabla F \cdot \nabla\phi + (\Delta F_s - |\nabla F|^2 - E)\phi = 0. \tag{2.8}$$

由于在 $\mathbb{R}^{3N}$ 中所有系数都有界，由定理 1.5 可知 $\phi \in C^{1,\theta}(\mathbb{R}^{3N})$ 对每个 $\theta \in [0,1)$ 都成立。此外，根据同一定理，对于任意一对 $0 < r < R$，我们可以找到常数 C、C'，它们仅依赖于 N、Z、E、r、R 和 θ，使得

$$\|\phi\|_{C^{1,\theta}(\overline{B(\mathbf{x},r)})} \leq C \|\phi\|_{L^2(B(\mathbf{x},R))} \leq C' \|\phi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},R))} \tag{2.9}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$ 均成立。

根据 ϕ 的定义、(2.7) 以及 (2.6)，存在新的常数 $C < C'$，它们仅依赖于 Z 和 N（因此与 $R > 0$ 无关），使得

$$C \|\phi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},R))} \leq \|\psi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},R))} \leq C' \|\phi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},R))} \tag{2.10}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$ 均成立。

2.2. F 的导数。非正式地说，我们的目标是对椭圆方程 (2.8) 求簇导数，并应用椭圆正则性。为此，我们需要对该方程中系数的簇导数给出界。这正是本节的目标。首先，我们陈述并证明以下预备引理，其中涉及 (1.21)、(1.26) 和 (1.28) 中引入的距离。

引理 2.1。对于任意 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \ldots, \sigma_M) \in \mathbb{N}_0^{3M}$，我们有：对于 $k = 0, 1,$

$$\mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{k-|\boldsymbol{\sigma}|} \leq \lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^k \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \ldots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \tag{2.11}$$

对所有 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{3N}$ 均成立。此外，对于某个 $n \geq 1$，令 $\boldsymbol{\beta}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\beta}^{(n)}$ 为 $\mathbb{N}_0^{3M}$ 中任意一组多重指标，满足 $\boldsymbol{\beta}^{(1)} + \cdots + \boldsymbol{\beta}^{(n)} = \boldsymbol{\sigma}$，则

$$\prod_{j=1}^{n} \lambda_{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}(\mathbf{y}) \leq \lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y}) \tag{2.12}$$

对所有 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{3N}$ 均成立。

证明。当 $\boldsymbol{\sigma} = 0$ 时，结论显然成立，因此下文假设 $\boldsymbol{\sigma}$ 非零。首先，注意对所有 $j = 1,$ ....., M,

$$\begin{aligned} \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{-|\sigma_j|} &\leq \lambda_{P_j}(\mathbf{y})^{-|\sigma_j|} \\ \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-|\sigma_j|} &\leq \lambda_{P_j}(\mathbf{y})^{1-|\sigma_j|} \quad \text{if } \sigma_j \neq 0 \end{aligned}$$

根据 $\mu_{\boldsymbol{\sigma}}$的定义。现在对该乘积作如下显然的展开，

$$\begin{aligned} \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{-|\boldsymbol{\sigma}|} &= \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \ldots \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \\ &\leq \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \ldots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \end{aligned}$$

这就证明了 $k = 0$的（2.11）。对于 $k = 1$，注意到对每个 y，我们都可以找到 l =1, . . . , M，使得 $\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}$(y) $= \lambda_{P_l}$(y) 且 $\sigma_l \neq 0$。于是，

$$\begin{aligned}\mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-|\boldsymbol{\sigma}|} &= \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-|\sigma_l|} \dots \mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \\ &\leq \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \lambda_{P_l}(\mathbf{y})^{1-|\sigma_l|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \\ &= \lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y}) \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|}\end{aligned}$$

正如所要求的。

。最后，我们证明 (2.12)。如上所述，取任意的 y 以及相应的 l ，使得$\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}$(y) $= \lambda_{P_l}$(y)，其中 $\sigma_l \neq 0$。对于每个 $1 \leq j \leq n$ ，我们将 $\boldsymbol{\beta}^{(j)}$ 的 $\mathbb{N}_0^3$ 分量记为$\boldsymbol{\beta}^{(j)} = (\beta_1^{(j)}, \dots, \beta_M^{(j)})$。我们知道 $\boldsymbol{\beta}^{(1)} + \dots + \boldsymbol{\beta}^{(n)} = \boldsymbol{\sigma}$，因此特别有 $\beta_l^{(1)} + \dots + \beta_l^{(n)} = \sigma_l$。由于 $\sigma_l \neq 0$，存在至少一个 $1 \leq r \leq n$，使得 $\beta_l^{(r)} \neq 0$。因此，根据 $\lambda_{\boldsymbol{\beta}^{(r)}}$ 的定义，

$$\lambda_{\boldsymbol{\beta}^{(r)}}(\mathbf{y}) = \min\{\lambda_{P_s}(\mathbf{y}) : \beta_s^{(r)} \neq 0,\, s = 1, \dots, M\} \leq \lambda_{P_l}(\mathbf{y}) = \lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y}).$$

其余因子 $\lambda_{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}$(y)（其中 $j \neq r$）均可分别用 1 作为上界。

□

以下引理有助于证明关于求取 F 的簇导数的结果，其中 F 如 (2.1) 所定义。这是 [9, Lemma 4.4] 的一个类似但更强的版本。稍后，我们将应用该引理，将 $f(x)$ 用作 $x \in \mathbb{R}^3$ 的函数 $|x|$，或用作其导数。

引理 2.2. 设 $f \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \backslash \{0\})$ 和 $k \in \mathbb{N}_0$ 满足：对每个 $\sigma \in \mathbb{N}_0^3$，都存在 C 使得

$$|\partial^\sigma f(x)| \leq C|x|^{k-|\sigma|} \text{ for all } x \neq 0. \tag{2.13}$$

那么，对任意满足 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq k$ 的 $\boldsymbol{\alpha} \neq 0$，都存在某个新的 C，使得对任意 l、m = 1, . . . , N，弱导数 $D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l))$ 和 $D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l - x_m))$ 在 $\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$ 上均为光滑函数，并且满足

$$|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l))|,\, |D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l - x_m))| \leq C q_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{k-|\boldsymbol{\alpha}|}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$。

证明。任取满足 $\alpha_j \neq 0$ 的 $j = 1$、. . .、 M，则有 $D^{\alpha_j}_{P_j}(f(x_l)) \equiv 0$ 对每个 $l \in P_j^c$ 都成立。因此，若要使 $D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l))$ 不恒为零，则要求对每个满足 $\alpha_j \neq 0$ 的 j，都有 $l \in P_j$。对于这样的 l，由于 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$，我们有 $x_l \neq 0$，并且

$$|x_l| \geq d_{P_j}(\mathbf{x})$$

对于每个满足 $\alpha_j \neq 0$ 的 j，根据 (1.20)，因此，对于 (2.13) 中的常数 C，我们有

$$|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l))| = |\partial^{\alpha_1 + \dots + \alpha_M} f(x_l)| \leq C|x_l|^{k-|\boldsymbol{\alpha}|} \leq C q_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{k-|\boldsymbol{\alpha}|}$$

因为 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq k$。类似地，对于每个 $j = 1$, . . ., M，若 $\alpha_j \neq 0$，则有 $D^{\alpha_j}_{P_j}(f(x_l - x_m)) \equiv 0$，当 $l, m \in P_j$ 或 $l, m \in P_j^c$ 中任一条件成立时。因此，为使 $D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}(f(x_l - x_m))$ 不恒等于

零，我们要求

$$(l,m) \in \bigcap_{j\,:\,\alpha_j \neq 0} \big((P_j \times P_j^c) \cup (P_j^c \times P_j)\big).$$

对于这样的（l, m），我们有 $x_l \neq x_m$，因为 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}^c$，并且

$$|x_l - x_m| \geq \sqrt{2}\, d_{P_j}(\mathbf{x})$$

对于每个 j，由（1.20）可得 $\alpha_j \neq 0$。因此，存在某个常数 C'，

$$|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}}(f(x_l - x_m))| = |\partial^{\alpha_1+\cdots+\alpha_M} f(x_l - x_m)| \leq C|x_l - x_m|^{k-|\boldsymbol{\alpha}|} \leq C' q_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{k-|\boldsymbol{\alpha}|}$$

因为 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq k$。 □

下面的引理给出了涉及 F 的函数的簇导数的逐点界。

引理 2.3。对于任意簇集 P 以及任意 $|\boldsymbol{\sigma}| \geq 1$，存在 C，其取决于 $\boldsymbol{\sigma}$，使得对于 $k = 0$, 1,

$$\big|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}} \nabla^k F(\mathbf{y})\big|, \big|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}} \nabla^k (e^F)(\mathbf{y})\big| \leq C\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-k} \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \tag{2.14}$$

$$\big|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}} |\nabla F(\mathbf{y})|^2\big| \leq C\lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \tag{2.15}$$

对所有 $\mathbf{y} \in \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$。（2.14）中第一个量的界在将 F 替换为 F_c时也成立。

证明。令 τ 为如下定义的函数：对于 $x \in \mathbb{R}^3$, $\tau(x) = |x|$。于是，根据定义可写为 (2.1)

$$F_c(\mathbf{y}) = -\frac{Z}{2} \sum_{1 \leq j \leq N} \tau(y_j) + \frac{1}{4} \sum_{1 \leq l < m \leq N} \tau(y_l - y_m). \tag{2.16}$$

对于每个 $r = 1$, ..., N，用 ∇_{y_r}表示变量 y_r的三维梯度。于是有

$$\nabla_{y_r} F_c(\mathbf{y}) = -\frac{Z}{2} \nabla\tau(y_r) + \frac{1}{4} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq r}}^{N} \nabla\tau(y_r - y_m). \tag{2.17}$$

我们对（2.16）和（2.17）分别应用 $D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}}$-阶导数，并分别在 $f = \tau$和 $f = \nabla\tau$ 处使用引理 2.2。这表明，对于 $k = 0$，函数 $D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}} \nabla^k F_c$ 存在，且在集合 $\Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$上光滑。此外，存在一个依赖于 $\boldsymbol{\sigma}$的 C，使得

$$|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}} \nabla^k F_c(\mathbf{y})| \leq C q_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-k-|\boldsymbol{\sigma}|} \leq C\mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-k-|\boldsymbol{\sigma}|} \tag{2.18}$$

对所有的 $\mathbf{y} \in \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$。在第二个不等式中，我们利用了 $\mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y}) \leq q_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})$。回顾一下，$\nabla F_s$ 是光滑的，且所有导数都有界，见 (2.5)。由于 $F = F_c - F_s$ 和 $\mu_{\boldsymbol{\sigma}} \leq 1$，对于每个 $\boldsymbol{\sigma} \neq 0$ 和 $k = 0$, 1，都存在依赖于 $\boldsymbol{\sigma}$的 C，使得

$$|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}} \nabla^k F(\mathbf{y})| \leq C\mu_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})^{1-k-|\boldsymbol{\sigma}|} \tag{2.19}$$

对所有的 $\mathbf{y} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\sigma}}$。通过直接应用引理 2.1，可得 (2.14) 中的第一个界，其中 $k = 0$,1。

。我们继续证明 (2.14) 中的第二个界。对于每个 $\boldsymbol{\eta} \le \boldsymbol{\sigma}$，我们有 $\Sigma_{\boldsymbol{\eta}} \subset \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}$，因此 $D^{\boldsymbol{\eta}}\,{}_{\mathbf{P}}\nabla^k F$ 存在且在 $\Sigma^c_{\boldsymbol{\sigma}}$ 上光滑，其中 $k = 0$，1。我们使用弱导数链式法则证明 $D^{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{P}}(e^F)$ 在 $\Sigma^c_{\boldsymbol{\sigma}}$ 中存在，且等于若干项之和，每一项都具有如下形式

$$e^F \prod_{1\le j\le n} D^{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}_{\mathbf{P}} F \tag{2.20}$$

其中某个 $1 \le n \le |\boldsymbol{\sigma}|$ 以及一组 $0 \ne \boldsymbol{\beta}^{(j)} \in \mathbb{N}_0^{3M}$ 满足 $j = 1$，....., n，其中 $\boldsymbol{\beta}^{(1)} + \cdots + \boldsymbol{\beta}^{(n)} = \boldsymbol{\sigma}$。对于每个 $j = 1$，....., n，我们用 $\boldsymbol{\beta}^{(j)} = (\beta^{(j)}_1$，....., $\beta^{(j)}_M)$ 表示 $\boldsymbol{\beta}^{(j)}$ 的 $\mathbb{N}^3_0$ 分量。类似地，弱导数 $D^{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{P}}\nabla(e^F)$ 在 $\Sigma^c_{\boldsymbol{\sigma}}$ 中存在，而一般项 (2.20) 的梯度等于

$$e^F \nabla F \prod_{1\le j\le n} D^{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}_{\mathbf{P}} F + e^F \sum_{r=1}^{n} \Big(D^{\boldsymbol{\beta}^{(r)}}_{\mathbf{P}} \nabla F \prod_{\substack{1\le j\le n\\ j\ne r}} D^{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}_{\mathbf{P}} F \Big). \tag{2.21}$$

现在我们来为上述表达式求界。为此，我们将使用 (2.19) 来为 F 的簇导数求界。结合引理 2.1 中的 (2.11) 和 (2.12)，我们可以为以下乘积求界

$$\begin{aligned}
\Big| \prod_{j=1}^{n} D^{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}_{\mathbf{P}} F(\mathbf{y}) \Big| &\le C \prod_{j=1}^{n} \mu_{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}(\mathbf{y})^{1-|\boldsymbol{\beta}^{(j)}|} \\
&\le C \prod_{j=1}^{n} \lambda_{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}(\mathbf{y}) \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\beta^{(j)}_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\beta^{(j)}_M|} \\
&= C \Big(\prod_{j=1}^{n} \lambda_{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}(\mathbf{y}) \Big) \Big(\prod_{l=1}^{M} \lambda_{P_l}(\mathbf{y})^{-|\beta^{(1)}_l|} \dots \lambda_{P_l}(\mathbf{y})^{-|\beta^{(n)}_l|} \Big) \\
&\le C \lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y}) \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|}
\end{aligned}$$

其中 C 是某个常数，取决于 $\boldsymbol{\sigma}$，且对所有 $\mathbf{y} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\sigma}}$ 均成立。我们利用了对于每个 $l = 1$，....., M，根据 $\boldsymbol{\beta}^{(1)} + \cdots + \boldsymbol{\beta}^{(n)} = \boldsymbol{\sigma}$ 可得 $|\beta^{(1)}_l| + \cdots + |\beta^{(n)}_l| = |\sigma_l|$。现在我们以类似方式使用 (2.19) 和引理 2.1，为以下乘积求界。对于任意 $r = 1$，....., n，

$$\Big| D^{\boldsymbol{\beta}^{(r)}}_{\mathbf{P}} \nabla F(\mathbf{y}) \prod_{\substack{1\le j\le n\\ j\ne r}} D^{\boldsymbol{\beta}^{(j)}}_{\mathbf{P}} F(\mathbf{y}) \Big| \le C \lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|}$$

对某个常数 C，该常数依赖于 $\boldsymbol{\sigma}$，且对所有 $\mathbf{y} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\sigma}}$ 均成立。利用 e^F 和 ∇F 在 $\mathbb{R}^{3N}$ 中有界这一事实，现在很容易适当地估计 (2.20) 和 (2.21)。由此完成了 (2.14) 的证明。

。最后，我们证明不等式 (2.15)。可以证明，下列莱布尼茨法则成立

$$D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}}|\nabla F|^2 = \sum_{\boldsymbol{\beta}\leq\boldsymbol{\sigma}} \binom{\boldsymbol{\sigma}}{\boldsymbol{\beta}} D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\beta}}\nabla F \cdot D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\beta}}\nabla F$$

在 $\Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$ 中。对于每个 $\boldsymbol{\beta} \leq \boldsymbol{\sigma}$，如果 $\boldsymbol{\beta} = 0$，则可用一个常数界定 $D^{\boldsymbol{\beta}}{}_{\mathbf{P}}\nabla F$；否则可由 (2.19) 界定。由此可得某个常数 C，它依赖于 $\boldsymbol{\sigma}$，使得

$$\left|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}}|\nabla F(\mathbf{y})|^2\right| \leq C\sum_{\boldsymbol{\beta}\leq\boldsymbol{\sigma}} \mu_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{y})^{-|\boldsymbol{\beta}|}\mu_{\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{y})^{-|\boldsymbol{\sigma}|+|\boldsymbol{\beta}|}$$

对所有 $\mathbf{y} \in \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$ 均成立。应用引理 2.1 的 (2.11) 后，即可得到所需的界。

□

。以下结果将引理 2.3 给出的界推广至球内的 L^∞-范数。值得注意的是，若 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$，对于 $\boldsymbol{\sigma} \neq 0$，则对所有 $\nu \in (0,1)$，均有 $B(\mathbf{x}\ \nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})) \subset \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$。

引理 2.4。对于任意 $|\boldsymbol{\sigma}| \geq 1$ 以及任意 $\nu \in (0,1)$，存在 C，它依赖于 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 ν，使得对于 $k = 0,\ 1$,

$$\left\|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}}\nabla^k F\right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},\nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})))}, \left\|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}}\nabla^k(e^F)\right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},\nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})^{1-k}\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\sigma_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\sigma_M|} \tag{2.22}$$

$$\left\|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\sigma}}|\nabla F|^2\right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},\nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\sigma_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\sigma_M|} \tag{2.23}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$ 均成立。(2.22) 中第一个范数的界在将 F 替换为 F_c 时也成立。

证明。取任意 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\sigma}}^c$。由 (1.23)，对于每个 $\mathbf{y} \in B(\mathbf{x}\ \nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}))$，我们有

$$|\lambda_{P_j}(\mathbf{x}) - \lambda_{P_j}(\mathbf{y})| \leq |\mathbf{x}-\mathbf{y}| \leq \nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) \leq \nu\lambda_{P_j}(\mathbf{x})$$

对于每个 $j = 1,\dots,M$，满足 $\sigma_j \neq 0$。上面的最后一个不等式用到了 (1.26) 中 $\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}$ 的定义。重新整理可得

$$(1-\nu)\lambda_{P_j}(\mathbf{x}) \leq \lambda_{P_j}(\mathbf{y}). \tag{2.24}$$

因此,

$$\lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} \leq (1-\nu)^{-|\boldsymbol{\sigma}|}\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\sigma_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\sigma_M|} \tag{2.25}$$

对所有的 $\mathbf{y},\ \in B(\mathbf{x}\ \nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}))$。现在我们证明一个类似的不等式。首先，我们看到，对于某个 $1 \leq l \leq M$，有 $\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \lambda_{P_l}(\mathbf{x})$，其中 $\sigma_l \neq 0$ 将取决于 $\mathbf{x}$ 的选择。

我们还注意到，对所有的 y， $\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}$(y) $\leq \lambda_{P_l}$(y)，这可由 $\sigma_l \neq 0$ 和 $\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}$ 的定义推出。因此，

$$\begin{aligned}\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{y})\lambda_{P_1}(\mathbf{y})^{-|\sigma_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{y})^{-|\sigma_M|} &\leq \lambda_{P_l}(\mathbf{y})^{1-|\sigma_l|}\prod_{\substack{j=1\\ j\neq l}}^{M}\lambda_{P_j}(\mathbf{y})^{-|\sigma_j|}\\ &\leq (1-\nu)^{1-|\boldsymbol{\sigma}|}\lambda_{P_l}(\mathbf{x})^{1-|\sigma_l|}\prod_{\substack{j=1\\ j\neq l}}^{M}\lambda_{P_j}(\mathbf{x})^{-|\sigma_j|}\\ &= (1-\nu)^{1-|\boldsymbol{\sigma}|}\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\sigma_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\sigma_M|} \qquad (2.26)\end{aligned}$$

对所有 y $\in B$(x $\nu\lambda_{\boldsymbol{\sigma}}$(x)) 均成立。在第二步中，我们应用了 (2.24)。随后，根据具体情况，所需的界由引理 2.3 以及 (2.25) 或 (2.26) 得出。

□

2.3. φ 和 ψ 的簇导数。
。我们引入以下记号。对于簇集 P $=(P_1,\dots,P_M)$ 和 $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{N}_0^{3M}$，定义

$$\phi_{\boldsymbol{\alpha}} = D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}\phi.$$

我们此前已经得到了方程 (2.8) 中系数及其导数的估计。对该方程取簇导数，可得到椭圆方程，其弱解为 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$。通过重新缩放，并采用[8], 中提出的方法，我们将应用椭圆正则性，对 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$和 $\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$的 L^∞-范数给出定量界。由此可以直接得到 $D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}\psi$ 和$D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}\nabla\psi$的相应界。

引理 2.5. 对于每个 $|\boldsymbol{\alpha}|\geq 1$， $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 都是以下方程的弱解

$$\begin{aligned}&-\Delta\phi_{\boldsymbol{\alpha}} - 2\nabla F\cdot\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}} + (\Delta F_s - |\nabla F|^2 - E)\phi_{\boldsymbol{\alpha}} \qquad (2.27)\\ &\qquad = \sum_{\substack{\boldsymbol{\sigma}\leq\boldsymbol{\alpha}\\ \boldsymbol{\sigma}\neq 0}}\binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\sigma}}\left(2D^{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{P}}\nabla F\cdot\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\sigma}} - D^{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{P}}(\Delta F_s - |\nabla F|^2)\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\sigma}}\right) =: g_{\boldsymbol{\alpha}}\end{aligned}$$

在 $\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$ 中，因此 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}\in C^1(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})\cap H^2_{loc}(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$。

证明。我们用归纳法证明，从 $|\boldsymbol{\alpha}|=1$ 开始。设 $\mathcal{L}(\cdot,\cdot)$ 为与作用于 (2.27) 左端 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 上的算子对应的双线性形式，其定义见 (1.36)。由于 $\phi\in H^2_{loc}(\mathbb{R}^{3N})$，我们有 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}\in H^1_{loc}(\mathbb{R}^{3N})$。我们用分部积分证明，对于任意 $\chi\in C^\infty_c(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$,

$$\mathcal{L}(\phi_{\boldsymbol{\alpha}},\chi) = -\mathcal{L}(\phi, D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{P}}\chi) + \int_{\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}} g_{\boldsymbol{\alpha}}\chi\, d\mathbf{x}. \qquad (2.28)$$

现在， $\mathcal{L}(\phi, D^{\alpha}_{\mathbf{P}}\chi) = 0$ ，因为 ϕ 是 (2.8) 的弱解，因此 (2.27) 成立。由引理 2.3 以及 $\phi \in C^1(\mathbb{R}^{3N})$，可知 $g_{\boldsymbol{\alpha}} \in L^{\infty}_{loc}(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$。因此，由定理 1.5， $\phi_{\boldsymbol{\alpha}} \in C^1(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}) \cap H^2_{loc}(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$

假设对于某个 $k \geq 2$，所有多重指标 $1 \leq |\boldsymbol{\alpha}| \leq k-1$ 都满足该假设。任取一个多重指标 $|\boldsymbol{\alpha}| = k$。我们将证明 $\boldsymbol{\alpha}$ 的归纳假设。首先，我们陈述一个有用的事实：对于任意 $\boldsymbol{\sigma} \leq \boldsymbol{\alpha}$ ，都有 $\Sigma_{\boldsymbol{\sigma}} \subset \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$。取一个满足 $|\boldsymbol{\eta}| = 1$ 的 $\boldsymbol{\eta} \leq \boldsymbol{\alpha}$ 。于是注意到，根据归纳假设， $\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\eta}} \in H^2_{loc}(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$，因此 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}} \in H^1_{loc}(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$。这使得可以为任意 $\chi \in C^{\infty}_c(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$ 定义 $\mathcal{L}(\phi_{\boldsymbol{\alpha}}, \chi)$。随后，对 $D^{\boldsymbol{\eta}}{}_{\mathbf{P}}$ 导数采用分部积分，方法类似于 (2.28)。结合归纳假设并进一步应用分部积分，我们发现 (2.27) 对作为弱解的 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 成立。 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的正则性证明方式与 $|\boldsymbol{\alpha}| = 1$ 情形类似。事实上，可利用归纳假设证明 $g_{\boldsymbol{\alpha}} \in L^{\infty}_{loc}(\Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}})$。

□

现在，我们通过重新缩放过程，将定理 1.5 的 C^1-椭圆正则性估计应用于方程 (2.27)。

引理 2.6. 对于所有 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq 1$ 和 $0 < r < R < 1$ ，存在 C，其仅依赖于 E、 Z、 N、 r 和 R，使得

$$\|\nabla \phi_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^{\infty}(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{-1}\big(\|\phi_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^{\infty}(B(\mathbf{x}, R\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} + \lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^2 \|g_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^{\infty}(B(\mathbf{x}, R\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \big) \tag{2.29}$$

对所有 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$。函数 $g_{\boldsymbol{\alpha}}$ 由 (2.27) 给出。

证明。固定一个 $\mathbf{y}$ $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$ ，并记 $\lambda = \lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$。证明通过重新缩放进行。定义

$$\begin{aligned} w(\mathbf{y}) &= \phi_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y}) \\ \mathbf{c}(\mathbf{y}) &= -2\nabla F(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y}) \\ d(\mathbf{y}) &= \Delta F_s(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y}) - |\nabla F(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y})|^2 - E \\ f(\mathbf{y}) &= g_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y}) \end{aligned}$$

对所有 $\mathbf{y} \in B(0, 1)$。于是由引理 2.5 可知， w 是以下方程的弱解

$$-\Delta w + \lambda \mathbf{c} \cdot \nabla w + \lambda^2 dw = \lambda^2 f \tag{2.30}$$

在 $B(0, 1)$ 中。由 (2.6)、(2.5) 以及根据定义 $\lambda \leq 1$ ，可得

$$\lambda \|\mathbf{c}\|_{L^{\infty}(B(0,1))} + \lambda^2 \|d\|_{L^{\infty}(B(0,1))} \leq K$$

存在某个 K，它仅依赖于 E、 Z 和 N，尤其与我们对 $\mathbf{x}$ 的选择无关。因此，由定理 1.5，取 $\theta = 0$，可得某个 C，它仅依赖于 N、 K、 r 和 R，使得

$$\|w\|_{C^1(\overline{B(0,r)})} \leq C(\|w\|_{L^{\infty}(B(0,R))} + \lambda^2 \|f\|_{L^{\infty}(B(0,R))}). \tag{2.31}$$

最后，我们利用链式法则得出 $\nabla w(\mathbf{y}) = \lambda \nabla \phi_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{y})$，并重写 (2.31)，得到 (2.29)。

□

下面的命题通过归纳法，为 $\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 写出估计，其界仅涉及 ϕ 的零阶和一阶导数。证明中用到了附录中的推论 A.3，以提高 ϕ 的二阶导数的正则性；通过归纳法，这一益处传递到所有更高阶的导数。函数 $f_\infty(\cdot; R; \phi)$ 定义于 (1.29)。

命题 2.7. 对于任意 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq 1$、任意 $0 < r < R < 1$ 和任意 $0 \leq b < 1$，存在一个依赖于 $\boldsymbol{\alpha}$、r、R 和 b 的 C，使得对于 $k = 0$、1，且 $k + |\boldsymbol{\alpha}| \geq 2$，

$$\left\|\nabla^k \phi_{\boldsymbol{\alpha}}\right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{1-k}\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|}\ldots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|}\mu_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^b f_\infty(\mathbf{x}; R; \phi)$$

对于所有 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$。若取 $b = 0$，该不等式对于 $|\boldsymbol{\alpha}| = 1$ 和 $k = 0$ 也成立 .

证明。设 $|\boldsymbol{\alpha}| = 1$ 和 $k = 1$。令 l 为满足 $\alpha_l \neq 0$的指标 $1 \leq l \leq M$。则 $\mu_{\boldsymbol{\alpha}} = \lambda_{P_l}$ 和 $\Sigma_{\boldsymbol{\alpha}} = \Sigma_{P_l}$。由推论 A.3（取 $P = P_l$）即可得到该界。事实上，对于每个 $s > 0$，我们都可以找到某个常数 C_s，使得对于所有 $t > 0$，$\log(t) \leq C_s t^s$。我们将这一事实与简单不等式 $\lambda_{P_l} \leq \nu_{P_l}$结合使用。

对于 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq 2$，我们用归纳法证明。假设对于所有满足 $1 \leq |\boldsymbol{\alpha}| \leq m-1$的多重指标$\boldsymbol{\alpha}$，命题都成立，其中 $m \geq 2$。任取满足 $|\boldsymbol{\alpha}| = m$的 $\boldsymbol{\alpha}$。我们依次证明 $k = 0$和 $k = 1$ 两种情形。这里先陈述以下事实很有用：对于所有 $\boldsymbol{\sigma} \leq \boldsymbol{\alpha}$，都有 $\Sigma_{\boldsymbol{\sigma}} \subset \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$，因此 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) \leq \lambda_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x})$。

$k = 0$ 情形可直接应用归纳假设，说明如下。首先，对于每个 $\mathbf{x} \in \Sigma^c_{\boldsymbol{\alpha}}$，显然存在某个 $1 \leq l \leq M$，使得 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) = \lambda_{P_l}(\mathbf{x})$，且其中 $\alpha_l \neq 0$。因此，我们可以找到某个 $\boldsymbol{\eta} \leq \boldsymbol{\alpha}$，使得$|\boldsymbol{\eta}| = 1$，并且对于每个 $j \neq l$ 都有 $\eta_j = 0$，其中 $1 \leq j \leq M$。现在，根据簇导数的定义 (1.16)，

$$\|\phi_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq N \left\|\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\eta}}\right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))}. \tag{2.32}$$

然后，我们可以利用归纳假设证明存在 C，使得

$$\begin{aligned}\left\|\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\eta}}\right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} &\\ \leq C\lambda_{P_l}(\mathbf{x})\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|}\ldots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|}\mu_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})^b f_\infty(\mathbf{x}; R; \phi),&\end{aligned} \tag{2.33}$$

此时，我们可以利用 $\lambda_{P_l}(\mathbf{x}) = \lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$ 和 $\mu_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}) \leq \mu_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$，从而在 $k = 0$ 情形下，为所选的 $\boldsymbol{\alpha}$ 完成所需的界。

$k = 1$ 情形可由归纳假设和引理 2.6 得出。令 $r' = (r + R)/2$。首先，根据 $g_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的定义、式 (2.27)，以及式 (2.5) 和引理 2.4，我们可以找到依赖于 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 r'的 C，使得

$$\begin{aligned}\|g_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r'\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C \sum_{\substack{\boldsymbol{\sigma} \leq \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\sigma} \neq 0}} \lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\sigma_1|}\ldots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\sigma_M|}\Big(&\|\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\sigma}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r'\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \\ &+ \|\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\sigma}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r'\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))}\Big).\end{aligned}$$

由归纳假设（使用 $b = 0$）以及 f_∞的定义和式 (1.30)，可知我们可以找到依赖于 $\boldsymbol{\alpha}$、r' 和 R的某个 C，使得

$$\|g_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r'\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|}f_\infty(\mathbf{x};R;\phi) \tag{2.34}$$

对所有的 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}^c$。接下来，我们应用引理 2.6，得到某个常数 C，它取决于 r和 r'，使得

$$\|\nabla\phi_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\big(\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})^{-1}\|\phi_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r'\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} + \lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})\|g_{\boldsymbol{\alpha}}\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r'\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))}\big).$$

我们利用上面已证明的 $k = 0$ 情形，来界定上述不等式右侧第一项中 $\phi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 的 L^∞-范数。对于第二项，我们应用 (2.34) 以及简单不等式 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) \leq \mu_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$。综合起来，这些结果给出了 $k = 1$ 所需的界，以及我们对 $\boldsymbol{\alpha}$ 的选择。至此，归纳法完成。

□

现在，我们利用上一个命题中关于 ϕ 的结果，得到特征函数 ψ 的簇导数的界。

定理 1.3 的证明。显然，当 $\boldsymbol{\alpha} = 0$ 时，(1.33) 成立。因此，考虑 $|\boldsymbol{\alpha}| \geq 1$。我们先证明 $k = 0$ 时 (1.33) 成立。取 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}^c$，则根据簇导数的莱布尼茨法则，我们有

$$D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}}\psi = \sum_{\boldsymbol{\beta}\leq\boldsymbol{\alpha}}\binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\beta}}D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\beta}}\big(e^F\big)\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}} \tag{2.35}$$

在 $B(\mathbf{x}\ r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}))$ 中。现在，对每个 $\boldsymbol{\beta} \leq \boldsymbol{\alpha}$，都存在某个与 $\mathbf{x}$ 无关的 C，使得

$$\Big\|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\beta}}\big(e^F\big)\phi_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}\Big\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|}f_\infty(\mathbf{x};R;\phi).$$

为证明这一点，我们对 $b = 0$ 使用引理 2.4 和命题 2.7。此外，若 $\boldsymbol{\beta} = 0$，我们使用 (2.6)；若 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\alpha}$，我们使用定义 (1.30)。若 $\boldsymbol{\beta} \notin \{0, \boldsymbol{\alpha}\}$，我们使用不等式$\lambda_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x})\lambda_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x}) \leq \lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})$，该不等式由引理 2.1 得出。因此，由 (2.35) 和 (2.9)-(2.10) 可得 $k = 0$ 所需的界 (1.33)。

取 $\mathbf{x} \in \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}^c$。根据定义 $F = F_c - F_s$、等式 $\nabla\psi = \psi\nabla F + e^F\nabla\phi$ 以及莱布尼茨法则，我们得到 (1.34)，其中

$$G_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}} = \sum_{\substack{\boldsymbol{\beta}\leq\boldsymbol{\alpha}\\|\boldsymbol{\beta}|\geq 1}}\binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\beta}}D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\beta}}\psi\, D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}\nabla F + \sum_{\boldsymbol{\beta}\leq\boldsymbol{\alpha}}\binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{\beta}}\nabla\phi_{\boldsymbol{\beta}}\, D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}\big(e^F\big) - \psi\, D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}}\nabla F_s. \tag{2.36}$$

我们按照 (1.35) 对 $G_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}}$ 中的每一项取界。任取满足 $|\boldsymbol{\beta}| \geq 1$ 的 $\boldsymbol{\beta} \leq \boldsymbol{\alpha}$。注意到 $\Sigma_{\boldsymbol{\beta}} \subset \Sigma_{\boldsymbol{\alpha}}$，因此 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) \leq \lambda_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x})$。现在，存在一个与 $\mathbf{x}$ 无关的 C，使得

$$\Big\|D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\beta}}\psi\, D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}\nabla F\Big\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x})\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|}\dots\lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|}f_\infty(\mathbf{x};R). \tag{2.37}$$

为证明该不等式，当 $\boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\alpha}$ 时，我们利用引理 2.4 对 F 的导数进行估界；当 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\alpha}$时，则利用 (2.6)。随后利用 (1.33) 和 $k = 0$ 对导数 $D^{\boldsymbol{\beta}}{}_{\mathbf{P}}\psi$ 进行估界，而这一点

已在上文证明。利用简单的界 $\lambda_{\boldsymbol{\beta}} \leq \mu_{\boldsymbol{\alpha}}$，可像 (1.35) 那样对 (2.37) 的右端进行估界。接下来，仍考虑 $|\boldsymbol{\beta}| \geq 1$，我们可以找到与 $\mathbf{x}$ 无关的 C，使得

$$\left\| \nabla\phi_{\boldsymbol{\beta}}\, D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}\big(e^F\big) \right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\mu_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x})^b \lambda_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x}) \lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|} f_\infty(\mathbf{x}; R; \phi).$$

利用命题 2.7 对导数 $\nabla\phi_{\boldsymbol{\beta}}$ 进行估计，并利用引理 2.4 和 (2.6) 对 e^F 的导数进行估计，即可证明这一结论。利用 (2.9)-(2.10) 以及不等式 $\mu_{\boldsymbol{\beta}} \leq \mu_{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}} \leq 1$ 后，上述不等式右端可像 (1.35) 中那样得到估计。此外，根据引理 2.4，存在 C 使得

$$\left\| \nabla\phi\, D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}}\big(e^F\big) \right\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}) \lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|} f_\infty(\mathbf{x}; R; \phi).$$

与前面一样，利用 (2.9)-(2.10) 以及不等式 $\lambda_{\boldsymbol{\alpha}} \leq \mu_{\boldsymbol{\alpha}}$ 即可得到正确的估计。最后，利用 (2.5) 可轻易对 (2.36) 中的最后一项作出适当估计。鉴于 (2.36)，这就完成了 (1.35) 的证明。

为证明 $k = 1$ 时的 (1.33)，我们使用 (1.34)、(1.35) 以及下列不等式，

$$\|\psi D_{\mathbf{P}}^{\boldsymbol{\alpha}} \nabla F_c\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\lambda_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x})))} \leq C\lambda_{P_1}(\mathbf{x})^{-|\alpha_1|} \dots \lambda_{P_M}(\mathbf{x})^{-|\alpha_M|} f_\infty(\mathbf{x}; R)$$

这对某个 C 成立，是引理 2.4 的直接推论。

□

3. 截断函数

在定理 1.1 的证明中，密度矩阵的偏导数在积分号下会转化为 ψ 的簇导数。本节将介绍一些将并入密度矩阵的截断函数。这些截断函数可以构成一个单位分解，其作用是确保 ψ 的簇导数仅在远离其奇点的区域内有支撑。

本节介绍的截断函数是对 [14],[12] 和 [9] 中所用类似截断函数的扩展。它们涉及变量（即“粒子”）x、y 和 x_j、$2 \leq j \leq N$。对于给定的截断函数，我们将定义相应的簇 P 和 S。在该截断函数的支撑上，P（或 S）中的粒子将靠近 x（或 y）。簇 P（或 S）最终将便于对密度矩阵取 x-（或 y-）阶导数。

我们还需要对变量 $x + y$ 中的密度矩阵求导。为此，自然要考虑一个更大的簇 Q，其中包含 P 和 S，但也可以包含其他粒子。Q 中的粒子被限制在靠近 x 和 y 的位置，但限制可能不如 P 和 S 中的粒子分别靠近 x 和 y 那么严格。

3.1. Φ的定义。首先，取一些 $\xi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$、$0 \leq \xi(s) \leq 1$，使得

$$\xi(s) = \begin{cases} 1 & \text{if } |s| \leq 1 \\ 0 & \text{if } |s| \geq 2. \end{cases} \tag{3.1}$$

对于 $s \in \mathbb{R}$。对每个 $t > 0$，我们可以定义以下两个截断因子 $\zeta_t = C_c^\infty(\mathbb{R}^3)$和 $\theta_t \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$:

$$\zeta_t(z) = \xi\Big(\frac{4N|z|}{t}\Big), \qquad \theta_t(z) = 1 - \zeta_t(z), \qquad z \in \mathbb{R}^3. \tag{3.2}$$

我们有　以下是截断因子的支撑判据。对于任意 $z \in \mathbb{R}^3$ 和 $t > 0$ ，

- 若 $\zeta_t(z) \neq 0$ 则 $|z| < (2N)^{-1}t$,
- 若 $\theta_t(z) \neq 0$ 则 $|z| > (4N)^{-1}t$。

取任意 δ, ϵ，满足 $0 < 2\delta \leq \epsilon$。我们将定义截断函数，它以 δ 和 ϵ 为参数，是一个函数 $\Phi = \Phi_{\delta,\epsilon}(x, y, \hat{\mathbf{x}})$，定义如下

$$\Phi_{\delta,\epsilon}(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \prod_{2\leq j\leq N} g_j^{(1)}(x - x_j) \prod_{2\leq j\leq N} g_j^{(2)}(y - x_j) \prod_{2\leq k<l\leq N} f_{k,l}(x_k - x_l) \tag{3.3}$$

对于 x、$y \in \mathbb{R}^3$ 和 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$，以及其中 $g_j^{(1)}$、$g_j^{(2)}$、$f_{k,\,l} \in \{\zeta_\delta, \theta_\delta\zeta_\epsilon, \theta_\epsilon\}$ 对于 $2 \leq j \leq N$ 和 $2 \leq k < l \leq N$。此外，对于 $2 \leq k < l \leq N$，我们定义 $f_{l,\,k} = f_{k,\,l}$。

其思想是，在 Φ 的支集上，我们可以得到各种粒子对之间距离的上界和/或下界。例如，若取粒子 x_j 和 x_k，则有 $\zeta_\delta(x_j - x_k)$ 使这两个粒子保持在相对于距离 δ 而言较近的位置，$\theta_\epsilon(x_j - x_k)$ 使它们保持在相对于距离 ϵ 而言较远的位置，而 $(\theta_\delta\zeta_\epsilon)(x_j - x_k)$ 则使它们之间保持中等距离。

在 (3.3) 中定义的截断函数 Φ 构成一个单位分解，如下述引理所示。

引理 3.1. 存在一组截断函数 (3.3) $\{\Phi^{(j)}\}_{j=1}^J$，其整数 J 仅依赖于 N，使得每当 $0 < 2\delta \leq \epsilon$ 时，我们有

$$\sum_{j=1}^{J} \Phi^{(j)}(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = 1$$

对所有 x、$y \in \mathbb{R}^3$、$\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$ 均成立。

证明. 根据定义 (3.2) 和支撑判据，很容易验证

$$\theta_\delta(z)\theta_\epsilon(z) = \theta_\epsilon(z), \qquad \zeta_\delta(z)\theta_\epsilon(z) = 0, \qquad \zeta_\delta(z)\zeta_\epsilon(z) = \zeta_\delta(z) \tag{3.4}$$

对所有 $z \in \mathbb{R}^3$ 均成立。因此，在 $\mathbb{R}^3$ 上，

$$1 \equiv \big(\zeta_\delta + \theta_\delta\big)\big(\zeta_\epsilon + \theta_\epsilon\big) = \zeta_\delta + \theta_\delta\zeta_\epsilon + \theta_\epsilon. \tag{3.5}$$

。对于任意的 A、$B \subset \{2, \ldots, N\}$，若满足 $A \cap B = \emptyset$，我们定义

$$\tau_{A,B}(\mathbf{x}) = \prod_{j\in A} \zeta_\delta(x_1 - x_j) \prod_{j\in B} (\theta_\delta\zeta_\epsilon)(x_1 - x_j) \prod_{j\in\{2,\ldots,N\}\setminus(A\cup B)} \theta_\epsilon(x_1 - x_j)$$

对于 $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N}$。因此,

$$\sum_{\substack{A\subset\{2,\ldots,N\}\\ B\subset\{2,\ldots,N\}\setminus A}} \tau_{A,B}(\mathbf{x}) = \prod_{2\le j\le N} \big\{\zeta_\delta(x_1 - x_j) + (\theta_\delta\zeta_\epsilon)(x_1 - x_j) + \theta_\epsilon(x_1 - x_j)\big\} = 1$$

对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。令 $\Xi = \{(j,k)\colon\ 2 \le j < k \le N\}$。对于每个满足 $Y \cap Z = \emptyset$ 的 $Y, Z \subset \Xi$，我们定义

$$T_{Y,Z}(\hat{\mathbf{x}}) = \prod_{(j,k)\in Y} \zeta_\delta(x_j - x_k) \prod_{(j,k)\in Z} (\theta_\delta\zeta_\epsilon)(x_j - x_k) \prod_{(j,k)\in \Xi\setminus(Y\cup Z)} \theta_\epsilon(x_j - x_k)$$

对 $\hat{\mathbf{x}} = (x_2, \ldots, x_N) \in \mathbb{R}^{3N-3}$。因此,

$$\sum_{\substack{Y\subset\Xi\\ Z\subset\Xi\setminus Y}} T_{Y,Z}(\hat{\mathbf{x}}) = \prod_{2\le j<k\le N} \big(\zeta_\delta(x_j - x_k) + (\theta_\delta\zeta_\epsilon)(x_j - x_k) + \theta_\epsilon(x_j - x_k)\big) = 1$$

对所有 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$。总之，对所有 $x, y \in \mathbb{R}^3$，$\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$,

$$\sum_{\substack{A\subset\{2,\ldots,N\}\\ B\subset\{2,\ldots,N\}\setminus A}} \sum_{\substack{C\subset\{2,\ldots,N\}\\ D\subset\{2,\ldots,N\}\setminus C}} \sum_{\substack{Y\subset\Xi\\ Z\subset\Xi\setminus Y}} \tau_{A,B}(x, \hat{\mathbf{x}})\tau_{C,D}(y, \hat{\mathbf{x}})T_{Y,Z}(\hat{\mathbf{x}}) = 1,$$

这是形如 (3.3) 的截断函数之和。

□

3.2. 与 Φ 对应的簇。现在，我们为每个 Φ 引入三个相应的簇。为了定义这些簇，我们首先仅根据定义 (3.3) 中截断因子 $g_j^{(1)}$ 、 $g_j^{(2)}$ 和 $f_{k,\,l}$ 的选择来引入指标集。因此，这些指标集和簇不依赖于 x、 y、$\hat{\mathbf{x}}$，也不依赖于缩放参数 δ 和 ϵ。

我们定义指标集 $L \subset \{(j,k) \in \{1,\ldots,N\}^2\colon\ j \ne k\}$ 如下。

- 当 $f_{j,k} \ne \theta_\epsilon$ 对于 $j,k = 2,\ldots,N$ 时，有 $(j,k) \in L$。此外，对于 $(g_{(1)\,j}, g_{(2)\,j}) \ne (\theta_\epsilon, \theta_\epsilon)$，当 $j = 2,\ldots,N$ 时，$(1,j)$ 、 $(j,1) \in L$。

此外，我们定义另外两个指标集 $J, K \subset \{(j,k) \in \{1,\ldots,N\}^2\colon\ j \ne k\}$ 如下。

- 当 $f_{j,k} = \zeta_\delta$ 对于 $j,k = 2,\ldots,N$ 时，有 $(j,k) \in J$。此外，对于 $g_{(1)\,j} = \zeta_\delta$ 在 $j = 2,\ldots,N$ 时，$(1,j)$ 、 $(j,1) \in J$。
- 我们有 $(j,k) \in K$ 当 $f_{j,k} = \zeta_\delta$ 对于 $j,k = 2,\ldots,N$。另外，$(1,j), (j,1) \in K$ 当 $g_{(2)\,j} = \zeta_\delta$ 对于 $j = 2,\ldots,N$。

这些指标集满足 $J, K \subset L$。对于任意指标集 $I \subset \{(j,k) \in \{1,\ldots,N\}^2 : j \ne k\}$，我们称两个指标 $j,k \in \{1,\ldots,N\}$ 是 I-相连的，如果 $j = k$，或者 $(j,k) \in I$，或者存在两两不同的指标 $j_1,\ldots,j_s$ （ $1 \le s \le N-2$），它们均不同于 j 和 k，且满足 $(j,j_1), (j_1,j_2) \ldots, (j_s,k) \in I$。

。簇 $Q = Q(\Phi)$ 定义为所有与 1 L-相连的指标构成的集合。簇$P = P(\Phi)$ 定义为所有与 1 J-相连的指标构成的集合。簇 $S = S(\Phi)$ 定义为所有与 1 K-相连的指标构成的集合。由于 $J, K \subset L$ ，我们看到 $P, S \subset Q$。

3.3. Φ的支撑集。下面的引理表明，在 Φ 的支撑集上，簇$P^* := P\backslash\{1\}$ 表示一个粒子集合，其位置 x_j, $j \in P^*$ 接近于 x；而簇 $S^* := S\backslash\{1\}$ 表示一个粒子集合，其位置 x_j, $j \in S^*$ 接近于 y。这两种情况下，这种接近程度都是相对于参数 δ而言的。在Φ的支撑集上，簇 $Q^* := Q\backslash\{1\}$ （回想一下 $P, S \subset Q$）表示一个粒子集合，其位置x_j, $j \in Q^*$同时接近于 x 和 y，不过这种接近程度可能较为宽松，因为它是相对于更大的参数 ϵ而言的。

引理 3.2。除非 $= 0$，否则我们有 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}})$

$$|x - x_k|, |y - x_k|, |x_j - x_k| > (4N)^{-1}\epsilon \qquad j \in Q^*, k \in Q^c, \tag{3.6}$$

$$|x - x_j|, |y - x_k| > (4N)^{-1}\delta \qquad j \in P^c, k \in S^c, \tag{3.7}$$

$$|x_r - x_s| > (4N)^{-1}\delta \qquad r \in P^*, s \in P^c \text{ 或 } r \in S^*, s \in S^c. \tag{3.8}$$

证明。取 $j \in Q^*$ 和 $k \in Q^c$。根据簇 Q 的定义，我们在定义 Φ的公式 (3.3) 中有 $f_{j,\ k} = \theta_\epsilon$和 $g_k^{(1)} = g_k^{(2)} = \theta_\epsilon$。若假设 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) \neq 0$，则 $\theta_\epsilon(x - x_k)$ $\theta_\epsilon(y - x_k)$ 和 $\theta_\epsilon(x_j - x_k)$ 的支撑判据给出 (3.6)。不等式 (3.7) 和 (3.8) 的证明方法类似。□

引理 3.3。设 $0 < 2\delta \leq \epsilon$。则 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = 0$ 除非

$$|x - x_k| < \delta/2 \quad for \quad k \in P^*, \tag{3.9}$$

$$|y - x_k| < \delta/2 \quad for \quad k \in S^*, \tag{3.10}$$

并且如果 $|x - y| \geq \delta$ 那么 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = 0$ 除非

$$|y - x_k| > \delta/2 \quad for \quad k \in P^*, \tag{3.11}$$

$$|x - x_k| > \delta/2 \quad for \quad k \in S^*. \tag{3.12}$$

因此，如果 $P^* \cap S^* \neq \emptyset$ 那么 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = 0$ 对所有 $|x - y| \geq \delta$ 和 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$。

此外，如果 $|x|, |y| \geq \epsilon$ 那么 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = 0$ 除非

$$\min\{|x - x_k|, |y - x_k|\} < \epsilon/2 \quad for \quad k \in Q^*, \tag{3.13}$$

$$|x_k| > \epsilon/2 \quad for \quad k \in Q^*. \tag{3.14}$$

证明。根据定义，若 $k \in P^*$或者 $g_k^{(1)} = \zeta_\delta$，或者存在两两不同的 j_1、……、$j_s \in \{2, \ldots, N\}$，满足 $1 \leq s \leq N - 2$，使得 $g_{j_1}^{(1)} = \zeta_\delta$ 和 $f_{j_1,\ j_2}$、$f_{j_2,\ j_3}$、……、$f_{j_s,\ k} = \zeta_\delta$。在前一种情况下，$\zeta_\delta(x - x_k)$ 的支撑判据给出 $|x - x_k| < (2N)^{-1}\delta$。在后一种情况下，支撑条件给出 $|x - x_{j_1}|$、$|x_{j_1} - x_{j_2}|$、……、$|x_{j_s} - x_k| < (2N)^{-1}\delta$，因此由三角不等式可得 $|x - x_k| < \delta/2$。现在，由反三角不等式可得 $|y - x_k| \geq |x - y| - |x - x_k| > \delta/2$。$k \in S^*$ 的情形类似。

。现在设 $k \in Q^*$。首先，考虑 $g_k^{(1)} \neq \theta_\epsilon$ 或 $g_k^{(2)} \neq \theta_\epsilon$（或两者同时成立）的情形。不失一般性，假设 $g_k^{(1)} \neq \theta_\epsilon$。那么， $g_k^{(1)} = \zeta_\delta$ 或 $g_k^{(1)} = \theta_\delta \zeta_\epsilon$，但两者都能给出如下不等式

$$|x - x_k| < (2N)^{-1}\epsilon$$

根据支撑判据。因此，在这种情况下（3.13）成立。现在假设 $g_k^{(1)} = g_k^{(2)} = \theta_\epsilon$。那么必定存在两两不同的 $j_1, \ldots, j_s \in \{2, \ldots, N\}$，满足 $1 \leq s \leq N-2$，使得 $f_{j_1,\, j_2}$， $f_{j_2,\, j_3}$， ...， $f_{j_s,\, k} \neq \theta_\epsilon$，并且 $g_{j_1}^{(1)} \neq \theta_\epsilon$ 或 $g_{j_1}^{(2)} \neq \theta_\epsilon$ 成立。不失一般性，取 $g_{j_1}^{(1)} \neq \theta_\epsilon$，于是和前面一样， $|x - x_{j_1}| < (2N)^{-1}\epsilon$。类似地，我们得到 $|x_{j_1} - x_{j_2}|$， ...， $|x_{j_s} - x_k| < (2N)^{-1}\epsilon$。因此，根据三角不等式， $|x - x_k| < \epsilon/2$。至此完成（3.13）的证明。最后，由（3.13）以及 $|x|$、 $|y| \geq \epsilon$ 可得（3.14）。□

3.4. 截断函数的因式分解。设 Φ 由 (3.3) 给出。我们可以将 Φ 的一个部分乘积定义为如下形式的函数

$$\Phi'(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \prod_{j \in R_1} g_j^{(1)}(x - x_j) \prod_{j \in R_2} g_j^{(2)}(y - x_j) \prod_{(k,l) \in R_3} f_{k,l}(x_k - x_l) \tag{3.15}$$

其中 R_1、 $R_2 \subset \{2, \ldots, N\}$、 $R_3 \subset \{(k,\ l) :\ 2 \leq k < l \leq N\}$。

现在，我们定义与一个簇相对应的 Φ 的部分乘积类。设 T 是一个满足 $1 \in T$ 的任意簇。那么，

$$\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; T) = \prod_{j \in T^*} g_j^{(1)}(x - x_j) \prod_{j \in T^*} g_j^{(2)}(y - x_j) \prod_{\substack{k,l \in T^* \\ k<l}} f_{k,l}(x_k - x_l), \tag{3.16}$$

$$\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; T^c) = \prod_{\substack{k,l \in T^c \\ k<l}} f_{k,l}(x_k - x_l), \tag{3.17}$$

$$\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; T, T^c) = \prod_{j \in T^c} g_j^{(1)}(x - x_j) \prod_{j \in T^c} g_j^{(2)}(y - x_j) \prod_{\substack{k \in T^* \\ l \in T^c}} f_{k,l}(x_k - x_l). \tag{3.18}$$

公式 (3.16) 和 (3.17) 分别是在簇包含 1 和不包含 1 的情况下给出的独立定义。

若令 x 和 y 都扮演粒子 1 的角色，则这些函数可分别解释为 $\Phi(\cdot;\ T)$，其中只涉及 T 中的粒子对； $\Phi(\cdot;\ T^c)$，其中只涉及 T^c 中的粒子对；以及 $\Phi(\cdot;\ T,\ T^c)$，其中涉及的粒子对中，一个粒子位于 T，另一个粒子位于 T^c。

引理 3.4. 给定形如 (3.3) 的截断函数 Φ 以及任意满足 $1 \in T$ 的簇 T，我们有

$$\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; T)\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; T, T^c)\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; T^c). \tag{3.19}$$

证明。该恒等式由定义 (3.16)-(3.18) 以及等式得出

$$\prod_{2 \leq k < l \leq N} f_{k,l}(x_k - x_l) = \prod_{\substack{k,l \in T^* \\ k<l}} f_{k,l}(x_k - x_l) \prod_{\substack{k \in T^* \\ l \in T^c}} f_{k,l}(x_k - x_l) \prod_{\substack{k,l \in T^c \\ k<l}} f_{k,l}(x_k - x_l),$$

因为对于任意 $2 \le k < l \le N$，根据定义有 $f_{k,l} = f_{l,k}$。 □

设 $Q = Q(\Phi)$。那么，部分乘积 $\Phi(\,\cdot\,; Q, Q^c)$ 仅由 θ_ϵ 截断因子构成，如下述引理所示。

引理 3.5。对于 $Q = Q(\Phi)$,

$$\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}; Q, Q^c) = \prod_{j \in Q^c} \theta_\epsilon(x - x_j) \prod_{j \in Q^c} \theta_\epsilon(y - x_j) \prod_{\substack{k \in Q^* \\ l \in Q^c}} \theta_\epsilon(x_k - x_l). \tag{3.20}$$

证明。根据簇 $Q(\Phi)$ 的定义，对于每个 $j \in Q^c$，都有 $g_j^{(1)} = g_j^{(2)} = \theta_\epsilon$，并且对于每个 $k \in Q^*$ 和 $l \in Q^c$，都有 $f_{k,l} = \theta_\epsilon$。公式随即由 (3.18) 得出。□

3.5. 导数。簇导数的定义 (1.15) 稍作扩展，使其可以作用于截断函数。对于任意簇 T，我们定义以下三个簇导数，它们可作用于 x、y 和 $\hat{\mathbf{x}}$ 的函数，例如 Φ。令

$$D^\alpha_{x,T} = \partial^\alpha_x + \sum_{j \in T^*} \partial^\alpha_{x_j} \quad \text{and} \quad D^\alpha_{y,T} = \partial^\alpha_y + \sum_{j \in T^*} \partial^\alpha_{x_j} \quad \text{for } \alpha \in \mathbb{N}_0^3,\ |\alpha| = 1, \tag{3.21}$$

$$D^\alpha_{x,y,T} = \partial^\alpha_x + \partial^\alpha_y + \sum_{j \in T^*} \partial^\alpha_{x_j} \quad \text{for } \alpha \in \mathbb{N}_0^3,\ |\alpha| = 1, \tag{3.22}$$

通过依次应用一阶导数，可将其扩展至更高阶多重指标 $\alpha \in \mathbb{N}_0^3$，如 (1.16) 中所示。

下面的引理给出了截断因子的偏导数估计。我们需要以下初等结果。对于每个 $\sigma \in \mathbb{N}_0^3$ 和 $s \in \mathbb{R}$，都存在 $C > 0$，使得对于任意 $x_0 \in \mathbb{R}^3$，我们有 $\left|\partial_x^\sigma |x + x_0|^s\right| \le C|x + x_0|^{s-|\sigma|}$，对所有 $x \in \mathbb{R}^3$、$x \neq -x_0$ 均成立。我们采用标准记号 $\mathbb{1}_S$ 表示集合 S 上的示性函数。

引理 3.6. 对于任意满足 $|\sigma| \ge 1$ 的 $\sigma \in \mathbb{N}_0^3$ 以及任意 $t > 0$，都存在 C，它依赖于 σ 但与 t 无关，使得

$$|\partial^\sigma \zeta_t(x)|,\ |\partial^\sigma \theta_t(x)| \le C t^{-|\sigma|} \mathbb{1}_{\{(4N)^{-1}t < |x| < (2N)^{-1}t\}}(x) \tag{3.23}$$

对所有 $x \in \mathbb{R}^3$ 均成立。

证明. 不失一般性，我们考虑 ζ_t 的情形，θ_t 的情形类似。回顾一下，$\xi = \xi(s)$ 在 (3.1) 中定义，我们用 $\xi^{(m)}$ 表示 ξ 的第 m 阶（一元）导数。由于 $|\sigma| \ge 1$，由链式法则可知，$\partial^\sigma \zeta_t(x)$ 可以写成如下形式各项之和：

$$(4Nt^{-1})^m \, \xi^{(m)}\big(4N|x|t^{-1}\big) \, \partial^{\sigma_1}|x| \, \dots \, \partial^{\sigma_m}|x| \tag{3.24}$$

wh其中 $1 \le m \le |\sigma|$，且 σ_1、.....、$\sigma_m \in \mathbb{N}_0^3$ 是满足条件的非零多重指标

$$\sigma_1 + \cdots + \sigma_m = \sigma.$$

由于 $m \geq 1$，我们有：若 $\xi^{(m)}(s) \neq 0$，则 $s \in (1, 2)$。因此，要使任意一项 (3.24) 非零，我们要求

$$(4N)^{-1}t < |x| < (2N)^{-1}t. \tag{3.25}$$

根据当前引理前面的注，存在依赖于 σ_1、.....、σ_m 的 C，使得

$$\partial^{\sigma_1}|x| \ldots \partial^{\sigma_m}|x| \leq C|x|^{m-|\sigma|} \leq C(4N)^{|\sigma|-m}t^{m-|\sigma|},$$

利用 (3.25)。因此，可以很容易地为各项 (3.24) 给出界，从而得到所需结果。□

We 现在给出作用于截断函数上的簇导数 (3.21)-(3.22) 的界 .

引理 3.7. 设 $Q = Q(\Phi)$。那么 $D^{\alpha}_{x,y,Q}\Phi(\,\cdot\,; Q) \equiv 0$ 对所有满足 $|\alpha| \geq 1$ 的 $\alpha \in \mathbb{N}_0^3$ 均成立。

证明。根据链式法则，乘积 (3.16) 中关于 $\Phi(\,\cdot\,; Q)$ 的每个函数在施加 $D^{\alpha}_{x,\,y,\,Q}$ 后，其导数均为零。□

对于下一个结果，我们将使用以下函数，该函数对所有 $t > 0$ 均定义为

$$\begin{aligned} M_t(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = &\sum_{2\leq j\leq N} \mathbb{1}_{\{(4N)^{-1}t<|x-x_j|<(2N)^{-1}t\}}(x - x_j) \\ &+ \sum_{2\leq j\leq N} \mathbb{1}_{\{(4N)^{-1}t<|y-x_j|<(2N)^{-1}t\}}(y - x_j) + \sum_{2\leq k<l\leq N} \mathbb{1}_{\{(4N)^{-1}t<|x_k-x_l|<(2N)^{-1}t\}}(x_k - x_l) \end{aligned} \tag{3.26}$$

对于 x、$y \in \mathbb{R}^3$ 以及 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$。

引理 3.8。设 $0 < 2\delta \leq \epsilon$ 和 $\Phi = \Phi_{\delta,\,\epsilon}$ 是形如 (3.3) 的截断函数。设 $Q = Q(\Phi)$。那么，对于任意多重指标 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^{3N+3}$，存在 C，其依赖于 $\boldsymbol{\alpha}$，但与 δ 和 ϵ 无关，使得对于 Φ 的任意部分乘积 Φ'，均有

$$|\partial^{\boldsymbol{\alpha}}\Phi'(x, y, \hat{\mathbf{x}})| \leq \begin{cases} C\epsilon^{-|\boldsymbol{\alpha}|} & \text{if } \Phi' = \Phi(\,\cdot\,; Q, Q^c) \\ C\big(\epsilon^{-|\boldsymbol{\alpha}|} + \delta^{-|\boldsymbol{\alpha}|}M_\delta(x, y, \hat{\mathbf{x}})\big) & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{3.27}$$

证明。引理 3.6 给出了函数 ζ_δ、θ_δ、ζ_ϵ、θ_ϵ 的偏导数的界。考虑 $\theta_\delta\zeta_\epsilon$，我们对 $\sigma \in \mathbb{N}_0^3$、$|\sigma| \geq 1$ 应用莱布尼茨法则，从而得到，对于 $z \in \mathbb{R}^3$

$$\partial^{\sigma}(\theta_\delta\zeta_\epsilon)(z) = \sum_{\mu\leq\sigma} \binom{\sigma}{\mu} \partial^{\mu}\theta_\delta(z)\partial^{\sigma-\mu}\zeta_\epsilon(z) = \partial^{\sigma}\theta_\delta(z) + \partial^{\sigma}\zeta_\epsilon(z), \tag{3.28}$$

因为，对于每个满足 $\mu \neq 0$ 和 $\mu \neq \sigma$ 的 $\mu \leq \sigma$，我们有

$$\partial^{\mu}\theta_\delta(z)\,\partial^{\sigma-\mu}\zeta_\epsilon(z) \equiv 0$$

由引理 3.6 可知 $2\delta \leq \epsilon$。

。现在，为了计算一般的 Φ' 的 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}}\Phi'$，我们在适当处使用式 (3.28)，对乘积 (3.15) 应用莱布尼茨法则。经微分的截断因子 ζ_δ、θ_δ、ζ_ϵ、θ_ϵ 由式 (3.23) 给出界。对于 ζ_ϵ 或 θ_ϵ，此界中的示性函数并非必需；而对于 ζ_δ 或 θ_δ，示性函数有上界 M_t。其余未微分的截断因子均以 1 为上界。若 $\Phi' = \Phi(\,\cdot\,;\, Q、\, Q^c)$，由引理 3.5 可知所有截断因子均为 θ_ϵ，因此我们只需使用式 (3.23) 中取 $t = \epsilon$ 时的界。

□

导数 $D_{x,y,Q}$ 作用于 Φ 时具有特殊性质：它对界的贡献仅涉及 ϵ 的幂（而不涉及 δ）。下一个引理将说明这一点。

引理 3.9. 设 $0 < 2\delta \le \epsilon$ 和 $\Phi = \Phi_{\delta,\epsilon}$ 为形如 (3.3) 的截断函数。设 $Q = Q(\Phi)$。对于任意多重指标 $\alpha \in \mathbb{N}_0^3$ 和 $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{N}_0^{3N+3}$，存在一个与 ϵ 和 δ 无关的 C，使得

$$|\partial^{\boldsymbol{\sigma}} D^{\alpha}_{x,y,Q}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})| \le C\epsilon^{-|\alpha|}\big(\epsilon^{-|\boldsymbol{\sigma}|} + \delta^{-|\boldsymbol{\sigma}|}M_\delta(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big)$$

对所有 x、y 和 $\hat{\mathbf{x}}$，均成立。

证明. 首先，令 $\Phi' = \Phi(\,\cdot\,;\, Q)$ $\Phi(\,\cdot\,;\, Q^c)$，并令 $\Phi'' = \Phi(\,\cdot\,;\, Q, Q^c)$。于是有

$$D^{\alpha}_{x,y,Q}\Phi = \Phi'\, D^{\alpha}_{x,y,Q}\Phi''$$

这由引理 3.4 和 3.7 得出，并且 $\Phi(\,\cdot\,; Q^c)$ 不依赖于涉及 $D^{\alpha}_{x,y,Q}$-导数的变量。根据定义 (3.22)，导数 $D^{\alpha}_{x,y,Q}\Phi''$ 可写为以下形式的偏导数之和 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}}\Phi''$，其中 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^{3N+3}$ 满足 $|\boldsymbol{\alpha}| = |\alpha|$。现在，根据莱布尼茨法则和引理 3.8，存在一些与 δ 和 ϵ 无关的常数 C 和C'，使得

$$\begin{aligned}
|\partial^{\boldsymbol{\sigma}}(\Phi'\,\partial^{\boldsymbol{\alpha}}\Phi'')| &\le \sum_{\boldsymbol{\tau}\le\boldsymbol{\sigma}} \binom{\boldsymbol{\sigma}}{\boldsymbol{\tau}} |\partial^{\boldsymbol{\tau}}\Phi'|\,|\partial^{\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\tau}+\boldsymbol{\alpha}}\Phi''| \\
&\le C\sum_{\boldsymbol{\tau}\le\boldsymbol{\sigma}} (\epsilon^{-|\boldsymbol{\tau}|} + \delta^{-|\boldsymbol{\tau}|}M_\delta)\epsilon^{-|\boldsymbol{\sigma}|+|\boldsymbol{\tau}|-|\boldsymbol{\alpha}|} \\
&\le C'\epsilon^{-|\alpha|}(\epsilon^{-|\boldsymbol{\sigma}|} + \delta^{-|\boldsymbol{\sigma}|}M_\delta),
\end{aligned}$$

完成证明。 □

3.6. 涉及 f_∞ 的积分。下面的命题是对 [9, 引理 5.1]的重述，并已在该论文中得到证明。(3.26) 中定义的函数 M_t 与论文中使用的对应函数形式略有不同，但这不会影响证明。回顾一下，f_∞ 在 (1.29) 中定义。

命题 3.10. 给定 $R > 0$，存在 C，使得

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}};R) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}};R)\,d\hat{\mathbf{x}} \le C\,\|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,2R))}\,\|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,2R))} \tag{3.29}$$

对于所有 x、$y \in \mathbb{R}^3$。此外，给定 $G \in L^1(\mathbb{R}^3)$，存在与 G 无关的 C，使得

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(|G(x_j - x_k)| + |G(z - x_k)| + |G(x_j)|\big) f_\infty(x, \hat{\mathbf{x}}; R) f_\infty(y, \hat{\mathbf{x}}; R)\, d\hat{\mathbf{x}} \leq C \|G\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,2R))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,2R))} \tag{3.30}$$

对所有 x、y、$z \in \mathbb{R}^3$ 以及 j、$k = 2$、.....、N、$j \neq k$ 均成立。特别地，对于任意 $t > 0$，存在与 t 无关的 C，使得

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} M_t(x, y, \hat{\mathbf{x}}) f_\infty(x, \hat{\mathbf{x}}; R) f_\infty(y, \hat{\mathbf{x}}; R)\, d\hat{\mathbf{x}} \leq C t^3 \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,2R))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,2R))} \tag{3.31}$$

对所有 x、$y \in \mathbb{R}^3$ 均成立。

回顾 根据 (1.31)，为方便起见，$f_\infty(\,\cdot\,)$ 被定义为 $f_\infty(\,\cdot\,; R)$，其中 $R = 1/2$.

引理 3.11. 设 $\Phi = \Phi_{\delta,\epsilon}$ 是具有 (3.3) 形式的截断函数，并设 j、k、r、s 如 (3.7) 和 (3.8) 中所示。那么，对于任意 $b = b_1 + b_2 + b_3$、$b \neq 3$、b_1、b_2、$b_3 \geq 0$，存在与 x、y 以及 δ、ϵ 无关的 C，使得

$$\int_{\operatorname{supp} \Phi(x,y,\,\cdot\,)} |x - x_j|^{-b_1} |y - x_k|^{-b_2} |x_r - x_s|^{-b_3} f_\infty(x, \hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y, \hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \leq C(1 + \delta^{\min\{0, 3-b\}}) \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))} . \tag{3.32}$$

证明。由杨氏不等式，

$$|x - x_j|^{-b_1} |y - x_k|^{-b_2} |x_r - x_s|^{-b_3} \leq \frac{1}{b}\big(b_1 |x - x_j|^{-b} + b_2 |y - x_k|^{-b} + b_3 |x_r - x_s|^{-b}\big).$$

因此，只需证明 (3.32)，其中 b_1、b_2 和 b_3 中只有一个非零。我们考虑 b_1 非零的情形，其余情形类似。我们将积分拆分为 $|x - x_j| \geq 1$ 的情形和 $|x - x_j| < 1$ 的情形。对于前者，可利用命题 3.10 的 (3.29) 得到界；对于后者，则利用同一命题的 (3.30)，其中 $G(x - x_j) = \mathbb{1}_{\{(4N)^{-1}\delta < |x - x_j| < 1\}}(x - x_j)|x - x_j|^{-b}$。根据引理 3.2 的 (3.7)，下界可以并入示性函数中。

□

4. Proof of Theorem 1.1

我们首先引入与密度矩阵 $\gamma(x, y)$ 相关的辅助函数，该密度矩阵定义于 (1.4) 中。对于 l，$m \in \mathbb{N}_0^3$ 且 $|l|$，$|m| \leq 1$，定义如下：

$$\gamma_{l,m}(x, y) = \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_x^l \psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \overline{\partial_y^m \psi(y, \hat{\mathbf{x}})}\, d\hat{\mathbf{x}}. \tag{4.1}$$

在此记号下 由此可见，$\gamma = \gamma_{0,\,0}$。通过积分号下求导，我们得到

$$\partial_x^l \partial_y^m \gamma(x, y) = \gamma_{l,m}(x, y). \tag{4.2}$$

此外，对于任意形如 (3.3) 的截断函数 Φ，我们定义

$$\gamma_{l,m}(x,y;\Phi)=\int_{\mathbb{R}^{3N-3}}\partial_x^l\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\partial_y^m\psi(y,\hat{\mathbf{x}})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}},$$

并定义 $\gamma(\cdot;\Phi)=\gamma_{0,0}(\cdot;\Phi)$。

为了得到 $|\alpha|+|\beta|=5$ 下导数 $\partial_x^\alpha\partial_y^\beta\gamma(x,y)$ 所需的界，我们分别考虑 $|\alpha|,|\beta|\geq 1$ 的情形，以及 α,β 中至少一个为零的情形。对于前一种情形，我们将立即在积分号下分别对 x 和 y 求一次导数。这是因为命题 4.2（见下文）不受命题中的 l 和 m 为零或表示单阶导数的影响。这本身是因为 ψ 和 $\nabla\psi$ 都是有界函数，而函数 ψ 只有在求两次导数后才会变为奇异。

当 α,β 中有一个为零时，我们可以将导数改写为涉及 $(x+y)$-导数的表达式，如下所示。不失一般性，设 $\beta=0$，因此 $|\alpha|=5$。令 $l,m\in\mathbb{N}_0^3$, $|l|=|m|=1$ 满足 $l+m\leq\alpha$。那么我们可以使用 $\partial_{x+y}^{l+m}=(\partial_x^l+\partial_y^l)(\partial_x^m+\partial_y^m)$（见 (1.14)）写出恒等式

$$\partial_x^{l+m}=\partial_{x+y}^{l+m}-\partial_y^{l+m}-\partial_x^l\partial_y^m-\partial_x^m\partial_y^l, \tag{4.3}$$

这在足够光滑的函数上成立。注意，重新排列即可得到相应的 ∂_y^{l+m}表达式。上面的最后三项引入了y阶导数，而由于我们已经有了 α的其余三个导数，因此可以像前一种情形一样，分别对 x 和 y求一次导数。上面等式中的第一项涉及一个$(x+y)$阶导数。我们将证明，这类导数不会对密度矩阵在对角线处的奇异性产生贡献。

4.1. 对密度矩阵求导——一般导数。下面的引理给出了对$\gamma_{l,m}(\cdot;\Phi)$求导时的界。随后我们将利用截断函数构成单位分解这一性质，得到对$\gamma_{l,m}$的导数的界。与前面一样，对于给定的 Φ，我们将令$P=P(\Phi)$ $S=S(\Phi)$ $Q=Q(\Phi)$表示上一节定义的相应簇。

引理 4.1. 设$\Phi=\Phi_{\delta,\epsilon}$是具有形式(3.3)且满足 $P^*\cap S^*=\emptyset$的截断函数。对于所有的l、$m\in\mathbb{N}_0^3$、$|l|$、$|m|\leq 1$，以及所有满足以下任一条件的 μ_1、μ_2、$\mu_3\in\mathbb{N}_0^3$

(i) $|\mu_2|+|\mu_3|\neq 3$，其中 μ_1 任意；

或 (ii) $|\mu_2|+|\mu_3|=3$ 且 $\mu_1=0$,

存在一个常数 C，使得对所有 $0<2\delta\leq\epsilon\leq 1$，均有

$$\begin{aligned}|\partial_{x+y}^{\mu_1}\partial_x^{\mu_2}\partial_y^{\mu_3}\gamma_{l,m}(x,y;\Phi_{\delta,\epsilon})|&\\ \leq C\epsilon^{-|\mu_1|-|\mu_2|-|\mu_3|}\delta^{\min\{0,3-|\mu_2|-|\mu_3|\}}&\|\rho\|_{L^1(B(x,1))}^{1/2}\|\rho\|_{L^1(B(y,1))}^{1/2}\end{aligned} \tag{4.4}$$

对所有 $|x|$、$|y|\geq\epsilon$ 和 $|x-y|\leq 2\delta$。

这个引理的证明相当冗长，因此推迟到定理 1.1 的证明之后给出。此处与前文一样，$m(x,y)=\min\{1,|x|,|y|\}$。

命题 4.2. 任取 $l, m \in \mathbb{N}_0^3$, $|l|, |m| \leq 1$, 以及引理 4.1 中的任意 μ_1, μ_2, μ_3。则存在 C 使得

$$|\partial_{x+y}^{\mu_1}\partial_x^{\mu_2}\partial_y^{\mu_3}\gamma_{l,m}(x,\ y)| \leq Cm(x,\ y)^{-|\mu_1|-|\mu_2|-|\mu_3|}|x-y|^{\min\{0,3-|\mu_2|-|\mu_3|\}}\|\rho\|_{L^1(B(x,1))}^{1/2}\|\rho\|_{L^1(B(y,1))}^{1/2} \tag{4.5}$$

对所有满足 $0 < |x-y| \leq m(x,y)/2$ 的 $x, y \in \mathbb{R}^3$ 均成立。

证明。首先，根据引理 3.1，存在有限个截断函数 $\Phi^{(j)}$, $j = 1, \ldots, J$，对于某个 J，使得

$$\gamma_{l,m} = \sum_{j=1}^{J} \gamma_{l,m}\big(\,\cdot\,; \Phi_{\delta,\epsilon}^{(j)}\big) \tag{4.6}$$

对于 $0 < 2\delta \leq \epsilon$ 的所有取值，该结论处处成立。

任取满足 $0 < |x-y| \leq m(x,y)/2$ 的 x, y。然后令 $\delta = |x-y|/2$ 且 $\epsilon = m(x,y)/2$。以 j_k 为指标，其中 $k = 1, \ldots, K$ 对于某个 $K \leq J$，且这些 j 满足 $P(\Phi^{(j)})^* \cap S(\Phi^{(j)})^* = \emptyset$。这些 j_k 不依赖于 δ 和 ϵ 的选取。根据引理 3.3,

$$\gamma_{l,m}(x', y') = \sum_{k=1}^{K} \gamma_{l,m}\big(x', y'; \Phi_{\delta,\epsilon}^{(j_k)}\big) \tag{4.7}$$

对所有 的 $|x'-y'| \geq |x-y|/2$ 均成立。然后由引理 4.1，对于每个 $k = 1, \ldots, K$，我们有 e

$$\begin{aligned}|\partial_{x'+y'}^{\mu_1}\partial_{x'}^{\mu_2}\partial_{y'}^{\mu_3}\gamma_{l,m}(x', y')| &\leq \sum_{k=1}^{K}\left|\partial_{x'+y'}^{\mu_1}\partial_{x'}^{\mu_2}\partial_{y'}^{\mu_3}\gamma_{l,m}\big(x', y'; \Phi_{\delta,\epsilon}^{(j_k)}\big)\right| \\ &\leq Cm(x,y)^{-|\mu_1|-|\mu_2|-|\mu_3|}|x-y|^{\min\{0,3-|\mu_2|-|\mu_3|\}}\|\rho\|_{L^1(B(x',1))}^{1/2}\|\rho\|_{L^1(B(y',1))}^{1/2}\end{aligned}$$

对于所有满足 $|x-y|/2 < |x'-y'| \leq |x-y|$ 且 $|x'|, |y'| \geq m(x,y)/2$ 的 x', y' 均成立。特别地，对于 $x' = x$ 和 $y' = y$ 也成立。常数 C 不依赖于 δ 和 ϵ 的选取，因此该界对所有所需的 x 和 y 均成立。

□

我们主定理的证明是该命题的直接推论 .

定理 1.1 的证明。若 $|\alpha|, |\beta| \geq 1$，则任取满足 $|l| = |m| = 1$ 的 $l \leq \alpha$ 和 $m \leq \beta$。于是我们可以写成

$$\partial_x^\alpha \partial_y^\beta \gamma = \partial_x^{\alpha-l}\partial_y^{\beta-m}\gamma_{l,m}.$$

于是，利用命题 4.2 以及 $\mu_1 = 0$、$\mu_2 = \alpha - l$ 和 $\mu_3 = \beta - m$，即可直接得到所需的界。

现在考虑 α 或 β 为零的情形。不失一般性，设 $\beta = 0$。令 $l \leq \alpha$ 和 $m \leq \alpha - l$ 满足 $|l| = |m| = 1$。由 (4.3) 可得,

$$\partial_x^\alpha \gamma = \partial_{x+y}^{l+m}\partial_x^{\alpha-l-m}\gamma - \partial_x^{\alpha-l-m}\partial_y^{l+m}\gamma - \partial_x^{\alpha-m}\partial_y^m\gamma - \partial_x^{\alpha-l}\partial_y^l\gamma$$

只需分别对每一项建立界。最后三项在 x 和 y上都至少有一个导数，因此可按之前的方法处理。接下来，第一项可改写为 $\partial_{x+y}^{l+m}\partial_x^{\alpha-l-m-r}\gamma_{r,\,0}$，其中某个 $r \le \alpha - l - m$ 满足 $|r| = 1$。利用 $\mu_1 = l + m$、$\mu_2 = \alpha - l - m - r$ 和 $\mu_3 = 0$ 应用命题 4.2，即可得到所需的界。□

4.2. 引理 4.1 的证明。第 3 节中引入的截断函数便于对 x、y 和 $x + y$ 同时求导。证明引理 4.1 的策略是将偏导数 $\gamma_{l,\,m}(\,\cdot\,;\Phi)$ 转化为积分下的簇导数。随后，定理 1.3 给出这些簇导数所需的逐点界，并且实际上区分了不同簇的导数

对 x 和 y 求偏导将产生簇 P、S、P^* 和 S^* 的簇导数，而对 $x + y$ 求导将产生簇 Q 的簇导数。我们希望分离 x- 和 y-导数的贡献，以及 $(x+y)$-导数的贡献。为此，将距离 λ_P 等归在一起会很方便；稍后对密度矩阵求导后应用定理 1.3 时，这些距离将会出现。我们现在将函数 λ 和 π 定义为这些距离的组合。

首先，我们固定一个截断函数 $\Phi = \Phi_{\delta,\epsilon}$，供本节全文使用，并令 P, S, Q 为相应的簇。我们假设 $P^* \cap S^* = \emptyset$ 和 $0 < 2\delta \le \epsilon \le 1$。

对于任意 $x, y \in \mathbb{R}^3$ 和 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$，我们定义

$$\lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \min\{\lambda_P(x, \hat{\mathbf{x}}),\ \lambda_{S^*}(x, \hat{\mathbf{x}}),\ \lambda_{P^*}(y, \hat{\mathbf{x}}),\ \lambda_S(y, \hat{\mathbf{x}})\}, \tag{4.8}$$

$$\pi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \min\{\lambda_Q(x, \hat{\mathbf{x}}),\ \lambda_Q(y, \hat{\mathbf{x}})\}. \tag{4.9}$$

回顾一下，根据定义 $1 \in P, S, Q$。利用 (1.20)，我们得到

$$\begin{aligned}\pi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \min\{1,\ |x|,\ |y|,\ |x_j| : j \in Q^*,\ 2^{-1/2}|x - x_k| : k \in Q^c,\\ 2^{-1/2}|y - x_k| : k \in Q^c,\ 2^{-1/2}|x_j - x_k| : j \in Q^*, k \in Q^c\}.\end{aligned} \tag{4.10}$$

利用 $P^* \cap S^* = \emptyset$，我们类似地得到

$$\begin{aligned}\lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}}) = \min\{1,\ |x|,\ |y|,\ |x_j| :\ j \in P^* \text{或}\ S^*,\ 2^{-1/2}|x - x_k| :\ k \in P^c,\\ 2^{-1/2}|y - x_k| : k \in S^c,\ 2^{-1/2}|x_j - x_k| : j \in P^*, k \in P^c \text{ or } j \in S^*, k \in S^c\}.\end{aligned} \tag{4.11}$$

引理 4.3. 对于任意满足 $|x|$ 的 $x, y \in \mathbb{R}^3$，有 $|y| \ge \epsilon$，

(i) t 存在 C，其与 δ、ϵ 和 x、y、$\hat{\mathbf{x}}$ 无关，使得当 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) \neq 0$ ，

$$\pi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) \ge C\epsilon, \tag{4.12}$$

$$\lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}}) \ge C\delta, \tag{4.13}$$

(ii) 对任意满足 $b \neq 3$ 的 $b \geq 0$，存在 C，其与 δ、ϵ 和 x、y 无关，使得

$$\int_{\operatorname{supp}\Phi(x,y,\cdot)} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-b} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \leq C\big(\epsilon^{-b} + \delta^{\min\{0,3-b\}}\big) \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))}. \tag{4.14}$$

证明。利用表达式 (4.10) 和 (4.11) 可以证明 (i)。由引理 3.2 以及引理 3.3 中的 (3.14) 可得此界，因为 $P, S \subset Q$。对于 (ii)，利用 (4.11) 可写为

$$\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-b} \leq C\big(\epsilon^{-b} + \sum_{k\in P^c} |x-x_k|^{-b} + \sum_{k\in S^c} |y-x_k|^{-b} + \sum_{\substack{j\in P^*, k\in P^c \text{ or} \\ j\in S^*, k\in S^c}} |x_j - x_k|^{-b}\big)$$

其中某个 C 依赖于 b。所需的不等式随即由上述第一项的命题 3.10 中的 (3.29) 以及其余各项的引理 3.11 得出。□

推论 4.4。对于任意 $x, y \in \mathbb{R}^3$，若 $|x|, |y| \geq \epsilon$，则

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-2} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}) |\nabla\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})|\, d\hat{\mathbf{x}} \leq C\epsilon^{-3} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))} \tag{4.15}$$

其中某个 C 与 δ, ϵ 及 x, y 无关。

证明。利用引理 3.9 和 (4.13)，可将该积分界定为某个常数乘以

$$\int_{\operatorname{supp}\Phi(x,y,\cdot)} \big(\epsilon^{-1}\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-2} + \delta^{-3} M_\delta(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big) f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}.$$

展开后，第一项由（4.14）有界，第二项则利用命题 3.10 的（3.31）有界。

□

现在我们汇总一些将在本节中用到的结果。首先考虑形式为（3.21）、（3.22）的截断函数 Φ 的簇导数。这类导数可以展开为偏导数。因此，取某些 $\eta \in \mathbb{N}_0^3$ 和 $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2) \in \mathbb{N}_0^6$，由引理 3.9 可知，存在 C，它依赖于 η、$\boldsymbol{\nu}$，但与 δ、ϵ 无关，使得

$$|D^\eta_{x,y,Q} D^{\nu_1}_{x,P} D^{\nu_2}_{y,S} \Phi_{\delta,\epsilon}(x,y,\hat{\mathbf{x}})| \leq C\epsilon^{-|\eta|}\big(\epsilon^{-|\boldsymbol{\nu}|} + \delta^{-|\boldsymbol{\nu}|} M_\delta(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big) \tag{4.16}$$

对所有 x、$y \in \mathbb{R}^3$ 以及 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N-3}$ 均成立。

现在任取 x、$y \in \mathbb{R}^3$，其中 $|x|$、$|y| \geq \epsilon$，并假设 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) \neq 0$。那么，根据引理 4.3，我们有 $\pi(x, y, \hat{\mathbf{x}})$ 和 $\lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}})$ 均为正。因此，根据定义 (4.8)、(4.9) 以及 (1.20)、(1.21)，

$$(x,\hat{\mathbf{x}}) \in \Sigma^c_Q \cap \Sigma^c_P \cap \Sigma^c_{S^*} \quad \text{and} \quad (y,\hat{\mathbf{x}}) \in \Sigma^c_Q \cap \Sigma^c_{P^*} \cap \Sigma^c_S.$$

这使我们能够在点 $(x, \hat{\mathbf{x}})$ 处对 ψ 上的簇 Q、P、S^* 应用定理 1.3 的簇导数，并在点 $(y, \hat{\mathbf{x}})$ 处对 ψ 上的 Q、P^*、S 应用该定理。事实上，利用定义 (4.8) 和 (4.9)，对于每个 $\eta \in \mathbb{N}_0^3$、$\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2) \in \mathbb{N}_0^6$ 某个 C，有

$$\sum_{k=0,1} \left| D_Q^{\eta} D_{\{P,S^*\}}^{\boldsymbol{\nu}} \nabla^k \psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \right| \leq C\pi(x, y, \hat{\mathbf{x}})^{-|\eta|} \lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}})^{-|\boldsymbol{\nu}|} f_\infty(x, \hat{\mathbf{x}}), \tag{4.17}$$

$$\sum_{k=0,1} \left| D_Q^{\eta} D_{\{P^*,S\}}^{\boldsymbol{\nu}} \nabla^k \psi(y, \hat{\mathbf{x}}) \right| \leq C\pi(x, y, \hat{\mathbf{x}})^{-|\eta|} \lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}})^{-|\boldsymbol{\nu}|} f_\infty(y, \hat{\mathbf{x}}), \tag{4.18}$$

其中，我们在此引入记号 $D_{\{P,S^*\}}^{\boldsymbol{\nu}} = D_P^{\nu_1} D_{S^*}^{\nu_2}$，类似地，$D_{\{P^*,S\}}^{\boldsymbol{\nu}} = D_{P^*}^{\nu_1} D_S^{\nu_2}$。

引理 4.5. 设 μ_1、μ_2、$\mu_3 \in \mathbb{N}_0^3$ 任意，且 l、$m \in \mathbb{N}_0^3$ 满足 $|l|$、$|m| \leq 1$。导数 $\partial_{x+y}^{\mu_1} \partial_x^{\mu_2} \partial_y^{\mu_3} \gamma_{l,m}(x, y; \Phi)$ 等于以下形式的积分的线性组合

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \left(D_Q^{\alpha_1} D_{\{P,S^*\}}^{(\alpha_2,\alpha_3)} \partial_x^l \psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \right) \left(D_Q^{\beta_1} D_{\{P^*,S\}}^{(\beta_2,\beta_3)} \partial_y^m \psi(y, \hat{\mathbf{x}}) \right) \left(D_{x,y,Q}^{\sigma_1} D_{x,P}^{\sigma_2} D_{y,S}^{\sigma_3} \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) \right) d\hat{\mathbf{x}} \tag{4.19}$$
$$\text{where } |\alpha_i| + |\beta_i| + |\sigma_i| = |\mu_i|,\ i = 1, 2, 3$$

对所有 $|x|$、$|y| \geq \epsilon$ 均成立。特别地，当 $|x|$、$|y| \geq \epsilon$ 满足 $x = y$ 时，该导数在对角线处存在。

证明. 对于 x 和 y 的每一种取值，我们定义一个依赖于 x 和 y 的变量替换 $\hat{}$，用于积分 $\gamma_{l,m}(x, y; \Phi)$。首先，我们定义两个向量 $\hat{\mathbf{a}} = (a_2, \ldots, a_N)$、$\mathbf{b} = (b_2, \ldots, b_N) \in \mathbb{R}^{3N-3}$，如下：

$$a_k = \begin{cases} x & \text{if } k \in P^* \\ y & \text{if } k \in S^* \\ 0 & \text{if } k \in P^c \cap S^c, \end{cases} \qquad b_k = \begin{cases} (x+y)/2 & \text{if } k \in Q^* \\ 0 & \text{if } k \in Q^c. \end{cases} \tag{4.20}$$

通过使用 $\hat{\mathbf{a}}$ 进行平移变量替换，我们可以写成

$$\gamma_{l,m}(x, y; \Phi) = \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_x^l \psi(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}}) \overline{\partial_y^m \psi(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}})} \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}})\, d\hat{\mathbf{x}}. \tag{4.21}$$

接下来，我们将使用积分号下求导。在此之前，我们先说明这些导数将如何作用于被积函数中的各个函数。作为示例，取一个定义在 $\mathbb{R}^{3N}$ 上的函数 f 和任意 $\eta \in \mathbb{N}_0^3$，根据链式法则可知

$$\begin{aligned} \partial_{x+y}^{\eta}[f(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{b}})] &= D_Q^{\eta} f(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{b}}), & \partial_x^{\eta}[f(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}})] &= D_{P^*}^{\eta} f(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}}), \\ \partial_{x+y}^{\eta}[f(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{b}})] &= D_Q^{\eta} f(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{b}}), & \partial_y^{\eta}[f(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}})] &= D_{S^*}^{\eta} f(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}}), \\ \partial_x^{\eta}[f(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}})] &= D_P^{\eta} f(x, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}}), & \partial_y^{\eta}[f(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}})] &= D_S^{\eta} f(y, \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{a}}). \end{aligned}$$

对截断函数 $\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}})$ 求导时也会出现类似的表达式，其中涉及形式为 (3.21)、(3.22) 的簇导数。

现在，我们对 (4.21) 关于 x 和 y 求导，并使用乘积法则，得到函数 $\partial_x^{\mu_2}\partial_y^{\mu_3}\gamma_{l,\ m}(x,y;\Phi)$ 是以下形式各项的线性组合

$$I_{(\alpha_2,\alpha_3,\beta_2,\beta_3,\sigma_2,\sigma_3)}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(D^{(\alpha_2,\alpha_3)}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l\psi(x,\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{a}})\big)\big(D^{(\beta_2,\beta_3)}_{\{P^*,S\}}\partial_y^m\psi(y,\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{a}})\big)D^{\sigma_2}_{x,P}D^{\sigma_3}_{y,S}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{a}})\big)\,d\hat{\mathbf{x}},$$

对于某些 $\alpha_2+\beta_2+\sigma_2=\mu_2$ 和 $\alpha_3+\beta_3+\sigma_3=\mu_3$。

现在，我们将对这种形式的积分施加一个 $(x+y)$ 阶导数。不过，首先我们进行变量替换，将 ˆa 替换为 b，使其作为积分变量 ˆx 的平移。然后，按照之前的方法，我们得到 $\partial^{\mu_1}_{x+y}I_{(\alpha_2,\alpha_3,\beta_2,\beta_3,\sigma_2,\sigma_3)}$ 是以下形式各项的线性组合

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(D^{\alpha_1}_Q D^{(\alpha_2,\alpha_3)}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l\psi(x,\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{b}})\big)\big(D^{\beta_1}_Q D^{(\beta_2,\beta_3)}_{\{P^*,S\}}\partial_y^m\psi(y,\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{b}})\big)\cdot$$
$$D^{\sigma_1}_{x,y,Q}D^{\sigma_2}_{x,P}D^{\sigma_3}_{y,S}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{b}})\big)\,d\hat{\mathbf{x}}.$$

对于某个 $\alpha_1+\beta_1+\sigma_1=\mu_1$。最后，再进行一次平移变量替换，消去 b，得到表达式 (4.19)。

□

现在，我们可以通过对前一个引理中产生的积分进行界定来证明引理 4.1。

引理 4.1 的证明。考虑满足 (i) 或 (ii) 的 μ_1、μ_2、μ_3。根据引理 4.5，只需证明形式如 (4.19) 的积分满足所需的界。定义 $a=|\alpha_1|+|\beta_1|+|\sigma_1|$、$b=|\alpha_2|+|\alpha_3|+|\beta_2|+|\beta_3|$ 和 $c=|\sigma_2|+|\sigma_3|$。注意，$a=|\mu_1|$ 和 $b+c=|\mu_2|+|\mu_3|$。然后，利用 (4.16)-(4.18) 和 (4.12)，可以将 (4.19) 的绝对值界定为某个常数乘以

$$\epsilon^{-a-c}\int_{\operatorname{supp}\Phi(x,y,\cdot)}\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-b}f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}})f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}$$
$$+\epsilon^{-a}\delta^{-c}\int_{\operatorname{supp}\Phi(x,y,\cdot)}M_\delta(x,y,\hat{\mathbf{x}})\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-b}f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}})f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}=:I_1+I_2.$$

对于 I_2，我们使用 (4.13) 将其界定为某个常数乘以

$$\epsilon^{-a}\delta^{-c-b}\int_{\mathbb{R}^{3N-3}}M_\delta(x,y,\hat{\mathbf{x}})f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}})f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\le C\epsilon^{-a}\delta^{3-b-c}\,\|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))}\,\|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))}$$

对于某个 C，其中我们用到了 (3.31)。这就得到了 I_2 时的 (4.4)。

对于 I_1，我们先考虑 $b\neq 3$ 的情形。根据 (4.14)，这可界定为某个常数乘以

$$(\epsilon^{-a-c-b}+\epsilon^{-a-c}\delta^{\min\{0,3-b\}})\,\|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))}\,\|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))}$$

随后由 (4.4) 得到其界。

现在我们考虑 I_1 对于 $b = 3$。若属于情形 (i)，则必有 $c \geq 1$，因为$b + c = |\mu_1| + |\mu_2| \neq 3$。这里，我们先使用 (4.13)，再使用 (4.14)，从而将 I_1 界定为某个常数乘以

$$\epsilon^{-a-c}\delta^{-1} \int_{\operatorname{supp}\Phi(x,y,\cdot)} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-2} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \\ \leq C\epsilon^{-a-c-2}\delta^{-1} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))}$$

对于某个 C，其随后由 (4.4) 给出界。最后，如果我们处于 $b = 3$ 的情形 (ii)，那么 I_1 无法得到适当的界。相反，我们利用以下事实：正试图求界的积分 (4.19) 必须具有 $\alpha_1 = \beta_1 = 0$ 和 $\sigma_i = 0$、$i = 1$、2、3。这使我们能够使用下文陈述并证明的引理 4.6，直接对 (4.19) 求界。

□

4.3. 引理 4.6 的证明。如前所述，$\Phi = \Phi_{\delta,\,\epsilon}$ 是形如 (3.3) 的任意截断函数，其对应的簇为 $P = P(\Phi)$ $S = S(\Phi)$ 和 $Q = Q(\Phi)$。我们始终假设 $P^* \cap S^* = \emptyset$ 和 $0 < 2\delta \leq \epsilon \leq 1$。

引理 4.6. 对任意满足 $|\boldsymbol{\alpha}| + |\boldsymbol{\beta}| = 3$ 的 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)$ $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2) \in \mathbb{N}_0^6$，以及任意满足 $|l|, |m| \leq 1$ 的 $l, m \in \mathbb{N}_0^3$，存在与 δ, ϵ 无关的 C，使得

$$\left| \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}} \partial_x^l \psi(x,\hat{\mathbf{x}})\big)\big(D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}} \partial_y^m \psi(y,\hat{\mathbf{x}})\big) \Phi_{\delta,\epsilon}(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \right| \\ \leq C\epsilon^{-3} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))} \|\rho\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))} \tag{4.22}$$

对所有满足 $|x - y| \leq 2\delta$ 的 $|x|, |y| \geq \epsilon$，均有。

首先，我们回顾第 2.1 节中的结论：

$$F = F_c - F_s = F_c^{(en)} + F_c^{(ee)} - F_s \tag{4.23}$$

其中 F_s 是光滑的，并且

$$F_c^{(en)}(\mathbf{x}) = -\frac{Z}{2} \sum_{1 \leq j \leq N} |x_j|, \qquad F_c^{(ee)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4} \sum_{1 \leq j < k \leq N} |x_j - x_k|. \tag{4.24}$$

引理 4.6 的证明涉及利用定理 1.3 中 (1.35) 的精细估计，考察 ψ 的簇导数。这些估计使我们能够将这类导数表示为一个“坏”项 F_c 和一个“好”项 $G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\mathbf{p}}$；后者在某些奇点附近具有更高的正则性。涉及 F_c 的贡献则通过分部积分进行显式处理。

令 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{N}_0^6$, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2) \in \mathbb{N}_0^6$，并令 $l, m \in \mathbb{N}_0^3$ 满足 $|l| = |m| = 1$。下文中，(4.25) 中的簇导数理解为作用于有序变量 $(x, x_2, \ldots, x_N)$，而 (4.26) 中的簇导数理解为作用于有序变量 $(y, x_2, \ldots, x_N)$。为方便后续处理，在

两个公式的右侧，所有关于 x 或 y 变量的导数均改写为作用于 x_j。现在假设 $|\boldsymbol{\alpha}|, |\boldsymbol{\beta}| \geq 1$, 则

$$D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l|x-x_j| = \begin{cases} (-1)^{|\alpha_1|+1}\partial_{x_j}^{\alpha_1+\alpha_2+l}|x-x_j| & \text{if } |\alpha_2|\geq 1 \text{ and } j\in S^* \\ 0 & \text{if } |\alpha_2|\geq 1 \text{ and } j\in S^c \\ (-1)^{|\alpha_1|+1}\partial_{x_j}^{\alpha_1+l}|x-x_j| & \text{if } \alpha_2 = 0 \text{ and } j\in P^c \\ 0 & \text{if } \alpha_2 = 0 \text{ and } j\in P^*. \end{cases} \tag{4.25}$$

$$D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\partial_y^m|y-x_j| = \begin{cases} (-1)^{|\beta_2|+1}\partial_{x_j}^{\beta_1+\beta_2+m}|y-x_j| & \text{if } |\beta_1|\geq 1 \text{ and } j\in P^* \\ 0 & \text{if } |\beta_1|\geq 1 \text{ and } j\in P^c \\ (-1)^{|\beta_2|+1}\partial_{x_j}^{\beta_2+m}|y-x_j| & \text{if } \beta_1 = 0 \text{ and } j\in S^c \\ 0 & \text{if } \beta_1 = 0 \text{ and } j\in S^*. \end{cases} \tag{4.26}$$

其中我们用到了 $P^*\cap S^* = \emptyset$ 以及恒等式 $(\nabla_t+\nabla_s)|t-s|\equiv 0$，其中 $t, s\in\mathbb{R}^n$。根据上文重述的 $F_c^{(ee)}$ 的定义，我们由此证明了以下引理。

引理 4.7. 对任意 $|l| = |m| = 1$ 和 $|\boldsymbol{\alpha}|, |\boldsymbol{\beta}| \geq 1$，我们有

$$D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l F_c^{(ee)}(x,\hat{\mathbf{x}}) = \begin{cases} \frac{(-1)^{|\alpha_1|+1}}{4}\sum_{j\in S^*}\partial_{x_j}^{\alpha_1+\alpha_2+l}|x-x_j| & \text{if } |\alpha_2|\geq 1 \\ \frac{(-1)^{|\alpha_1|+1}}{4}\sum_{j\in P^c}\partial_{x_j}^{\alpha_1+l}|x-x_j| & \text{if } \alpha_2 = 0, \end{cases} \tag{4.27}$$

$$D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\partial_y^m F_c^{(ee)}(y,\hat{\mathbf{x}}) = \begin{cases} \frac{(-1)^{|\beta_2|+1}}{4}\sum_{j\in P^*}\partial_{x_j}^{\beta_1+\beta_2+m}|y-x_j| & \text{if } |\beta_1|\geq 1 \\ \frac{(-1)^{|\beta_2|+1}}{4}\sum_{j\in S^c}\partial_{x_j}^{\beta_2+m}|y-x_j| & \text{if } \beta_1 = 0. \end{cases} \tag{4.28}$$

现在我们来估计这些导数。对于簇 P 和 S，我们将使用 $\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})$ 作为式 (4.8) 中定义的量。根据 (4.11)，并参见例如引理 3.6 前的注释，对每个 $|\alpha|\geq 1$，存在某个 C 使得

$$\left|\partial_{x_j}^{\alpha}|x-x_j|\right| + \left|\partial_{x_k}^{\alpha}|y-x_k|\right| \leq C\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{1-|\alpha|} \tag{4.29}$$

对于所有满足 $|\alpha| = 1$ 的 $2\leq j,k\leq N$，以及所有满足 $|\alpha|\geq 2$ 的 $j\in P^c, k\in S^c$。因此，由引理 4.7 和 $P^*\cap S^* = \emptyset$ 可知，对每个 $\boldsymbol{\nu}\in\mathbb{N}_0^6$，存在 C 使得

$$\left|D^{\boldsymbol{\nu}}_{\{P,S^*\}}\nabla_x F_c^{(ee)}(x,\hat{\mathbf{x}})\right| + \left|D^{\boldsymbol{\nu}}_{\{P^*,S\}}\nabla_y F_c^{(ee)}(y,\hat{\mathbf{x}})\right| \leq C\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-|\boldsymbol{\nu}|}. \tag{4.30}$$

此外，直接求导可知，对于每个 $\boldsymbol{\nu}\in\mathbb{N}_0^6$，都存在一个 C，使得

$$\left|D^{\boldsymbol{\nu}}_{\{P,S^*\}}\nabla_x F_c^{(en)}(x,\hat{\mathbf{x}})\right| + \left|D^{\boldsymbol{\nu}}_{\{P^*,S\}}\nabla_y F_c^{(en)}(y,\hat{\mathbf{x}})\right| \leq C\epsilon^{-|\boldsymbol{\nu}|} \tag{4.31}$$

只要 $|x|、|y|\geq\epsilon$。

现在我们继续证明本小节的主要结果。

引理 4.6 的证明。我们首先考虑较难的情形 $|l| = |m| = 1$。根据定理 1.3 和 $b = 1/2$，我们可以写出

$$D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\nabla\psi = G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}} + \psi\big(D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\nabla F_c\big) \qquad \text{对于 } |\boldsymbol{\alpha}| \geq 1, \tag{4.32}$$

$$D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\nabla\psi = G^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}} + \psi\big(D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\nabla F_c\big) \qquad \text{对于 } |\boldsymbol{\beta}| \geq 1, \tag{4.33}$$

并且在这些情况下，我们有以下估计

$$\big|G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}(x,\hat{\mathbf{x}})\big| \leq C\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{1/2-|\boldsymbol{\alpha}|}f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}), \tag{4.34}$$

$$\big|G^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}(y,\hat{\mathbf{x}})\big| \leq C\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{1/2-|\boldsymbol{\beta}|}f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}). \tag{4.35}$$

利用这些初步估计，我们可以证明 $|\boldsymbol{\alpha}|, |\boldsymbol{\beta}| \geq 1$ 时的情形。根据 (4.32)、(4.33) 和 $F_c = F_c^{(en)} + F^{\ (ee)}_{\ c}$，我们将积分 (4.22) 界定为

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big|G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}(x,\hat{\mathbf{x}})\big|\big|D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\nabla_y\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\big|\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\
&\quad+\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\nabla_x F_c(x,\hat{\mathbf{x}})\big||\psi(x,\hat{\mathbf{x}})|\big|G^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}(y,\hat{\mathbf{x}})\big|\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\
&\quad+\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\nabla_x F_c^{(en)}(x,\hat{\mathbf{x}})\big||\psi(x,\hat{\mathbf{x}})|\big|D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\nabla_y F_c(y,\hat{\mathbf{x}})\big||\psi(y,\hat{\mathbf{x}})|\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\
&\quad+\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\nabla_x F_c^{(ee)}(x,\hat{\mathbf{x}})\big||\psi(x,\hat{\mathbf{x}})|\big|D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\nabla_y F_c^{(en)}(y,\hat{\mathbf{x}})\big||\psi(y,\hat{\mathbf{x}})|\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\
&\quad+\Big|\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l F_c^{(ee)}(x,\hat{\mathbf{x}})\big)\big(D^{\boldsymbol{\beta}}_{\{P^*,S\}}\partial_y^m F_c^{(ee)}(y,\hat{\mathbf{x}})\big)\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\hat{\mathbf{x}})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\Big|.
\end{aligned}$$

根据引理 4.7，上面的最后一项可以展开为形如 (4.37) 的项，因为$S^* \subset P^c$ 且 $P^* \subset S^c$。随后，引理 4.8 给出了相应的界。现在我们将证明，上面其余每个积分都可以界定为某个常数乘以形如以下形式的积分

$$\epsilon^{-a}\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-b}f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}})f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}. \tag{4.36}$$

对某些 a、$b \geq 0$、$b \leq 5/2$ 和 $a + b \leq 3$ 成立。这可由估计式 (4.30)、(4.31)、(4.34) 和 (4.35) 得出。我们还使用 (4.18) 来界定第一项中 ψ(y, ˆx) 的簇导数。所需的界随即由引理 4.3 得出。

接下来考虑 $|\boldsymbol{\alpha}| = 3$ 和 $\boldsymbol{\beta} = 0$的情形。另一种 $|\boldsymbol{\beta}| = 3$和 $\boldsymbol{\alpha} = 0$ 的情形经过显而易见的修改后也类似。由 (4.32) 和 $F_c = F_{c}^{(en}{}_{\ } + F_c^{(ee))}$，我们

将积分 (4.22) 界定为

$$\begin{aligned}&\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big|G^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}(x,\hat{\mathbf{x}})\big||\nabla\psi(y,\hat{\mathbf{x}})|\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\&\quad+\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big|D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l F_c^{(en)}(x,\hat{\mathbf{x}})\big||\psi(x,\hat{\mathbf{x}})||\nabla\psi(y,\hat{\mathbf{x}})|\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\&\quad+\Big|\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l F_c^{(ee)}(x,\hat{\mathbf{x}})\big)\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\partial_y^m\psi(y,\hat{\mathbf{x}})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\Big| =: I_1+I_2+I_3.\end{aligned}$$

利用 (4.34) 可对积分 I_1 进行界定，随后即可应用引理 4.3。对 I_2 进行界定只需直接应用 (4.31) 和命题 3.10。对于 I_3，我们使用表达式 $\psi = e^F\phi$，其中 ϕ 已在 (2.7) 中引入。由于 $F = F_c^{(ee)} + F_{(en)c} - F_s$，我们可以写成

$$\partial_y^m\psi(y,\hat{\mathbf{x}}) = e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})}\partial_y^m\phi(y,\hat{\mathbf{x}}) + \psi(y,\hat{\mathbf{x}})\partial_y^m F_c^{(ee)}(y,\hat{\mathbf{x}}) + \psi(y,\hat{\mathbf{x}})\big(\partial_y^m F_c^{(en)}(y,\hat{\mathbf{x}}) - \partial_y^m F_s(y,\hat{\mathbf{x}})\big).$$

我们根据该表达式展开 I_3。根据引理 4.7，第一项可以展开为形如 (4.45) 的各项，因此可由引理 4.9 给出界。同样根据引理 4.7，第二项可以针对 $\beta = m$ 和 $|\alpha| = 4$ 展开为形如 (4.37) 的各项，因此可由引理 4.8 给出界。因此，只需对下式给出界

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(D^{\boldsymbol{\alpha}}_{\{P,S^*\}}\partial_x^l F_c^{(ee)}(x,\hat{\mathbf{x}})\big)\big(\partial_y^m F_c^{(en)}(y,\mathbf{x}) - \partial_y^m F_s(y,\mathbf{x})\big)\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\mathbf{x})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}.$$

我们利用引理 4.7 展开 $F_c^{(ee)}$ 的导数。该展开中的一般项具有如下形式

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha+l}|x-x_j|\big(\partial_y^m F_c^{(en)}(y,\mathbf{x}) - \partial_y^m F_s(y,\mathbf{x})\big)\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\mathbf{x})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}$$

对于某个 $j\in P^c$ 和 $|\alpha| = 3$。我们将此积分写成如下形式，并利用分部积分从 $|x-x_j|$ 中消去一个导数，

$$\begin{aligned}&-\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha}|x-x_j|\big(\partial_y^m F_c^{(en)}(y,\mathbf{x}) - \partial_y^m F_s(y,\mathbf{x})\big)\partial_{x_j}^l\big(\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\mathbf{x})}\big)\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\&\quad-\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha}|x-x_j|\big(\partial_y^m F_c^{(en)}(y,\mathbf{x}) - \partial_y^m F_s(y,\mathbf{x})\big)\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\mathbf{x})}\partial_{x_j}^l\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\&\quad+\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha}|x-x_j|\partial_{x_j}^l\partial_y^m F_s(y,\mathbf{x})\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\mathbf{x})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\end{aligned}$$

因为 $\partial_{x_j}^l\partial_y^m F_{(en)c}(y,\mathbf{x}) \equiv 0$。现在我们使用 (4.29)，即 $\nabla F_{(en)c} \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N})$，以及对于任意整数 $k\geq 1$，$\nabla^k F_s \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N})$，见 (2.5)。因此，这些项可以由某个常数乘以

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-2} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}})f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}})\big(\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}}) + |\nabla\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})|\big)\,d\hat{\mathbf{x}}$$

这由引理 4.3 和推论 4.4 适当地给出了界。

最后，还需考虑 l、m 中一个或两个为零的情形。策略类似，但更简单。我们指出，在 $\eta = 0$ 和 $k = 0$ 的情形下，可以使用 (4.17) 和 (4.18) 的以下改进版本。对于任意 $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2) \in \mathbb{N}_0^6$，若满足 $|\boldsymbol{\nu}| \geq 1$，则存在某个 C 使得

$$\begin{aligned}\left|D^{\boldsymbol{\nu}}_{\{P,S^*\}}\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\right| &\leq C\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{1-|\boldsymbol{\nu}|}f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}),\\ \left|D^{\boldsymbol{\nu}}_{\{P^*,S\}}\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\right| &\leq C\lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{1-|\boldsymbol{\nu}|}f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}).\end{aligned}$$

这些不等式可直接由定理 1.3 的 (1.33) 得出。

□

现在陈述并证明前述证明中用到的两个辅助引理。

引理 4.8. 设 $|\alpha|$、$|\beta| \geq 1$ 满足 $|\alpha| + |\beta| \leq 5$。那么，对于任意一对满足以下条件的 $2 \leq j$、$k \leq N$：若 $|\alpha| \geq 2$，则 $j \in P^c$；若 $|\beta| \geq 2$，则 $k \in S^c$，我们有

$$I_{j,k} := \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial^\alpha_{x_j}|x - x_j|\partial^\beta_{x_k}|y - x_k|\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\overline{\psi(y,\hat{\mathbf{x}})}\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}, \tag{4.37}$$

存在与 δ 和 ϵ 无关的 C，使得

$$|I_{j,k}| \leq C\epsilon^{2-|\alpha|-|\beta|}\left\|\rho\right\|^{1/2}_{L^1(B(x,1))}\left\|\rho\right\|^{1/2}_{L^1(B(y,1))}$$

对于所有 $|x|$、$|y| \geq \epsilon$ 和 $|x - y| \leq 2\delta$，均成立。

证明。我们假设 $|\alpha| + |\beta| = 5$，否则由 (4.29) 和引理 4.3 可立即得到结论。

我们首先证明 $j \neq k$ 的情形，此时分部积分尤其简单。不妨设 $|\alpha| \geq |\beta|$。然后取任意满足 $|l| = 1$ 的 $l \leq \alpha$，并使用分部积分得到

$$I_{j,k} = -\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial^{\alpha-l}_{x_j}|x - x_j|\partial^\beta_{x_k}|y - x_k|\partial^l_{x_j}\big(\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big)\,d\hat{\mathbf{x}}. \tag{4.38}$$

随后利用 (4.29) 以及引理 4.3 或推论 4.4，即可按要求对其绝对值给出界。这就完成了 $j \neq k$ 情形下的证明。

在证明的其余部分，我们考虑 $j = k$ 的情形。首先，假设 $j \in P^c \cap S^c$。在接下来的过程中，我们将使用分部积分，将 $|y - x_j|$ 在 $I_{j,j}$ 中的所有导数全部消去。

由于 $|\beta| \geq 1$，我们可以找到某个多重指标 $\beta_1 \leq \beta$，使得 $|\beta_1| = 1$。然后进行分部积分可得

$$\begin{aligned}I_{j,j} = &-\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial^{\alpha+\beta_1}_{x_j}|x - x_j|\partial^{\beta-\beta_1}_{x_j}|y - x_j|\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\,d\hat{\mathbf{x}}\\ &-\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial^{\alpha}_{x_j}|x - x_j|\partial^{\beta-\beta_1}_{x_j}|y - x_j|\partial^{\beta_1}_{x_j}\big(\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big)\,d\hat{\mathbf{x}}.\end{aligned} \tag{4.39}$$

我们暂不处理上面的第二个积分。对于第一个积分，如果 $|\beta| - |\beta_1| \geq 1$，我们可以按照相同的步骤从 $|y - x_j|$ 中再消去一个一阶导数。也就是说，利用分部积分得到两个新项，如（4.39）所示。我们保留导数作用于 ψ（x，$\hat{\mathbf{x}}$）ψ（y，$\hat{\mathbf{x}}$）Φ（x，y，$\hat{\mathbf{x}}$）的项。而对于导数作用于 $|x - x_j|$ 的项，只要 $|y - x_j|$ 上仍至少有一个导数，我们就重复这一过程。通过这一过程，我们得到关于 $I_{j,\ j}$ 的公式。为表示该公式，我们首先令 $T = |\beta|$，并将 $\beta = \sum_{s=1}^{T} \beta_s$ 写成某个集合 $|\beta_s| = 1$，其中 $1 \leq s \leq T$。此外，我们定义

$$\beta_{<i} = \begin{cases} 0 & \text{if } i = 1 \\ \beta_1 & \text{if } i = 2 \\ \beta_1 + \cdots + \beta_{i-1} & \text{if } i \geq 3 \end{cases} \qquad \beta_{>i} = \begin{cases} 0 & \text{if } i = T \\ \beta_T & \text{if } i = T - 1 \\ \beta_{i+1} + \cdots + \beta_T & \text{if } i \leq T - 2. \end{cases}$$

于是，

(4.40)

$$I_{j,j} = (-1)^T \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha+\beta} |x - x_j||y - x_j| \psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \psi(y, \hat{\mathbf{x}}) \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} + \sum_{i=1}^{T} (-1)^i I_{j,j}^{(i)}$$

其中

$$I_{j,j}^{(i)} = \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha+\beta_{<i}} |x - x_j| \partial_{x_j}^{\beta_{>i}} |y - x_j| \partial_{x_j}^{\beta_i} \big(\psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \psi(y, \hat{\mathbf{x}}) \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}})\big)\, d\hat{\mathbf{x}}.$$

我们可以用与 (4.38) 相同的方法给出 $|I_{j\ ,j}^{(i)}|$ 关于 $1 \leq i \leq T - 1$ 的界，因为 $j \in P^c \cap S^c$。剩下需要给出 $I_{j\ j}^{(T)}{}_{,}$ 的界，以及公式 (4.40) 中的第一个积分。

我们先展开 $|y - x_j| = |x - x_j| + \big(|y - x_j| - |x - x_j|\big)$，并注意到

$$\big||y - x_j| - |x - x_j|\big| \leq |x - y| \leq 2\delta. \tag{4.41}$$

接下来很容易证明（例如，参见引理 3.6 前的说明），存在某些 C、C'，使得

$$\begin{aligned} \big|I_{j,j}^{(T)}\big| &\leq C \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} |x - x_j|^{-3} \big(2\delta + |x - x_j|\big) \big|\partial_{x_j}^{\beta_T} \big(\psi(x, \hat{\mathbf{x}}) \psi(y, \hat{\mathbf{x}}) \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}})\big)\big|\, d\hat{\mathbf{x}} \\ &\leq C' \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x, y, \hat{\mathbf{x}})^{-2} f_\infty(x, \hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y, \hat{\mathbf{x}}) \big(\Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}}) + |\nabla \Phi(x, y, \hat{\mathbf{x}})|\big)\, d\hat{\mathbf{x}} \end{aligned} \tag{4.42}$$

其中在第二步中，我们使用了公式 (4.11)，因为 $j \in P^c$，并结合 (4.13)。随后根据引理 4.3 和推论 4.4，可得到所需的界。

现在我们来估计 (4.40) 中的第一个积分。我们再次利用 $|y-x_j| = |x-x_j| + \big(|y-x_j| - |x-x_j|\big)$、(4.41) 和 (4.11)，证明只需对以下两个表达式给出界

$$\delta \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-4} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}) \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}, \tag{4.43}$$

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\alpha+\beta} |x-x_j||x-x_j| \psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}. \tag{4.44}$$

The 利用引理 4.3 的 (4.14) 式和 $b=4$，第一项很容易得到所需的界 .

接下来需要对 (4.44) 作界估计。为简化计算，记 $\sigma = \alpha+\beta$，并令 $\sigma = \sigma_1 + \cdots + \sigma_5$ 表示某个 $|\sigma_s| = 1$、 $s = 1$，....., 5。按与上文相同的方式定义（ $\beta_{<i}$ 和 $\beta_{>i}$ ）

$$\sigma_{<i} = \begin{cases} 0 & \text{if } i = 1 \\ \sigma_1 & \text{if } i = 2 \\ \sigma_1 + \cdots + \sigma_{i-1} & \text{if } 3 \le i \le 5, \end{cases} \qquad \sigma_{>i} = \begin{cases} 0 & \text{if } i = 5 \\ \sigma_5 & \text{if } i = 4 \\ \sigma_{i+1} + \cdots + \sigma_5 & \text{if } 1 \le i \le 3. \end{cases}$$

现在我们采用上文使用的相同方法，也就是通过分部积分依次转移一阶导数。每一步都将导数作用于 $\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})$ 时产生的项留作余项。由于 $|\sigma| = 5$ 是奇函数，这一过程进行五次后，所得结果是：(4.44) 恰好等于同一个积分的相反数再加上余项。这解释了下列公式中的 $_1\,_2$ 因子， -

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\sigma} |x-x_j||x-x_j| \psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \\ &\qquad = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5} (-1)^i \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^{\sigma_{>i}} |x-x_j| \partial_{x_j}^{\sigma_{<i}} |x-x_j| \partial_{x_j}^{\sigma_i} \big(\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big)\, d\hat{\mathbf{x}}. \end{aligned}$$

根据 (4.29)，这些积分中的每一个都可以用 (4.42) 右侧的表达式来界定，其中常数 C' 是新的。这就完成了 $j \in P^c \cap S^c$ 情形下的证明。

最后，当 $j = k$，而 $j \in P^*$ 或 $j \in S^*$时，我们必须给出 (4.37) 的界。我们假设 $j \in P^*$，情形 $j \in S^*$ 类似。因此，我们只需考虑 $|\alpha| = 1$。为了给出该积分的界，我们先进行分部积分，得到

$$\begin{aligned} I_{j,j} = &- \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} |x-x_j|\, \partial_{x_j}^{\beta+\alpha} |y-x_j|\, \psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \\ &- \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} |x-x_j|\, \partial_{x_j}^{\beta} |y-x_j|\, \partial_{x_j}^{\alpha} \big(\psi(x,\hat{\mathbf{x}})\psi(y,\hat{\mathbf{x}})\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\big)\, d\hat{\mathbf{x}}. \end{aligned}$$

由引理 3.3，当 $\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}}) \neq 0$ 时，我们有 $|x-x_j| < \delta/2$。结合 (4.29) 和 (4.13)，可得

$$|I_{j,j}| \leq C\delta \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-4} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}) \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} + C \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-2} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}) \big(\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}}) + |\nabla\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})|\big)\, d\hat{\mathbf{x}}$$

对于某个 C。这两项分别就是 (4.43) 和 (4.42) 的右端，因此可以得到适当的界。这就完成了所有所需情形的证明。

□

引理 4.9。设 $|\alpha| = 4$、$j \in P^c$ 和 $k \in S^c$。则这些积分

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial_{x_j}^\alpha |x-x_j| \psi(x,\hat{\mathbf{x}}) e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})} \overline{\nabla_y \phi(y,\hat{\mathbf{x}})} \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}, \tag{4.45}$$

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} e^{F(x,\hat{\mathbf{x}})} \nabla_x \phi(x,\hat{\mathbf{x}}) \partial_{x_k}^\alpha |y-x_k| \overline{\psi(y,\hat{\mathbf{x}})} \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \tag{4.46}$$

可以按照 (4.22) 得到界。

证明。我们证明 (4.45) 的界；(4.46) 的情形类似。我们使用 (3.1) 中引入的截断函数 $\xi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$，定义

$$\chi_1(z) := \xi(8|z|), \qquad \chi_2(z) := 1 - \chi_1(z)$$

$z \in \mathbb{R}^3$。于是，$\chi_1(z) \neq 0$ 意味着 $|z| < 1/4$，而 $\chi_2(z) \neq 0$ 意味着 $|z| > 1/\quad 8.$

我们将积分 (4.45) 写成

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \big(\chi_1(x-x_j) + \chi_2(x-x_j)\big) \partial_{x_k}^\alpha |x-x_j| \psi(x,\hat{\mathbf{x}}) e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})} \overline{\partial_y^m \phi(y,\hat{\mathbf{x}})} \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}. \tag{4.47}$$

展开后，并利用例如引理 3.6 前的说明，含有 χ_2 的积分的绝对值可由某个常数乘以.....来界定

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-6}} \int_{\{x_j : |x-x_j| > 1/8\}} |x-x_j|^{-3} |\psi(x,\hat{\mathbf{x}}) e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})} \nabla\phi(y,\hat{\mathbf{x}})| \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, dx_j d\hat{\mathbf{x}}_{1,j}.$$

接着，我们利用 (2.9)、(2.10) 以及 F 在 $\mathbb{R}^{3N}$ 上一致有界这一事实，将该积分界定为命题 3.10 的 (3.29) 乘以某个常数，其中可取 $R = 1/2$。

现在我们考虑 (4.47) 中的 χ_1 项。首先，回顾 (1.10)-(1.13) 中引入的记号，即我们可以写成

$$(y, x, \hat{\mathbf{x}}_{1,j}) = (y, x_2, \ldots, x_{j-1}, x, x_{j+1}, \ldots, x_N).$$

任取 $\theta \in (0,1)$。我们知道 $\phi \in C^{1,\theta}(\mathbb{R}^{3N})$。特别地，利用 (2.9) 和 (2.10)，存在一个常数 C，使得当 $|x-x_j|<1/4$ 时，

$$|\partial_y^m \phi(y,x,\hat{\mathbf{x}}_{1,j})| \leq \|\nabla\phi\|_{L^\infty(B((y,\hat{\mathbf{x}}),1/4))} \leq C f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}), \tag{4.48}$$

$$\left|\partial_y^m \phi(y,\hat{\mathbf{x}}) - \partial_y^m \phi(y,x,\hat{\mathbf{x}}_{1,j})\right| \leq |x-x_j|^\theta [\nabla\phi]_{\theta,B((y,\hat{\mathbf{x}}),1/4)} \leq C|x-x_j|^\theta f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}). \tag{4.49}$$

常数 C 取决于 θ，但与 x、y 和 $\hat{\mathbf{x}}$ 无关。

现在，我们将 (4.47) 中的 χ_1 项写成以下两个积分之和：

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \chi_1(x-x_j)\partial_{x_j}^\alpha |x-x_j| \psi(x,\hat{\mathbf{x}}) e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})} \overline{\partial_y^m \phi(y,x,\hat{\mathbf{x}}_{1,j})} \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}, \tag{4.50}$$

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \chi_1(x-x_j)\partial_{x_j}^\alpha |x-x_j| \psi(x,\hat{\mathbf{x}}) e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})} \overline{\left(\partial_y^m \phi(y,\hat{\mathbf{x}}) - \partial_y^m \phi(y,x,\hat{\mathbf{x}}_{1,j})\right)} \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}.$$

第二个积分可以用某个常数乘以下式来界定：

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-3+\theta} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}) \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}}$$

利用 (4.49) 以及 F 一致有界这一事实。随后可应用引理 4.3 得到所需的界。

只需对 (4.50) 作界定。在 (4.50) 中，对变量 x_j 进行分部积分，以从 $\partial_{x_j}^\alpha |x-x_j|$ 中移去一个导数。任取满足 $|l|=1$的 $l \leq \alpha$。因此，积分 (4.50) 可改写为

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \partial^l \chi_1(x-x_j)\, \partial_{x_j}^{\alpha-l} |x-x_j|\, \psi(x,\hat{\mathbf{x}})\, e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})}\, \overline{\partial_y^m \phi(y,x,\hat{\mathbf{x}}_{1,j})}\, \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\, d\hat{\mathbf{x}} \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \chi_1(x-x_j)\, \partial_{x_j}^{\alpha-l} |x-x_j|\, \overline{\partial_y^m \phi(y,x,\hat{\mathbf{x}}_{1,j})}\, \partial_{x_j}^l \left(e^{F(y,\hat{\mathbf{x}})} \psi(x,\hat{\mathbf{x}}) \Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})\right) d\hat{\mathbf{x}}.
\end{aligned}$$

我们可以利用 (4.29)、(4.48) 以及 F 和 ∇F 均一致有界这一事实，将其绝对值界定为某个常数乘以

$$\int_{\mathbb{R}^{3N-3}} \lambda(x,y,\hat{\mathbf{x}})^{-2} f_\infty(x,\hat{\mathbf{x}}) f_\infty(y,\hat{\mathbf{x}}) \left(\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}}) + |\nabla\Phi(x,y,\hat{\mathbf{x}})|\right) d\hat{\mathbf{x}}.$$

由引理 4.3 和推论 4.4 可得相应的界。

□

Appendix A. Second derivatives of ϕ

在 [22] 中，已经证明，按 (2.7) 定义的 ϕ 乘以某个仅依赖于 N 和 Z 的指数因子后，光滑性会得到改善。本节旨在利用这些结果，为 ϕ 本身的二阶导数给出逐点界，以满足定理 1.3 的证明所需。

上述作者引入了以下函数

$$\tilde{F} = -\frac{Z}{2}\sum_{j=1}^{N}\xi(|x_j|)|x_j| + \frac{1}{4}\sum_{1\le j<k\le N}\xi(|x_j - x_k|)|x_j - x_k|,$$

$$\tilde{G} = C_0 Z \sum_{1\le j<k\le N}\xi(|x_j|)\xi(|x_k|)(x_j\cdot x_k)\log\left(|x_j|^2 + |x_k|^2\right),$$

其中 $\xi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ 在（3.1）中定义，且 $C_0 = (2-\pi)/12\pi$。作者得到 $e^{-F-G}\psi \in W^{2,\infty}_{loc}(\mathbb{R}^{3N})$，[22, 定理 1.5]。我们注意到，这改进了一个众所周知的事实：对所有 $\theta \in (0,1)$，$\phi \in C^{1,\theta}(\mathbb{R}^{3N})$，参见第 2 节。

为了便于我们的论述，我们将他们的结果改写为指数因子的一个略有不同的形式。定义

$$\phi' = e^{-F-G}\psi$$

其中 $F = F_c - F_s$ 在（2.1）中定义，且

$$\begin{aligned} G &= C_0 Z\sum_{j<k}(x_j\cdot x_k)\log\left(|x_j|^2+|x_k|^2\right) - C_0 Z\sum_{j<k}(x_j\cdot x_k)\log\left(|x_j|^2+|x_k|^2+1\right)\\ &=: G_c - G_s. \end{aligned}$$

于是，对于……，我们可以写成 $\phi' = e^H e^{-F-G}\psi$

$$H = -F_c + F_s + \tilde{F} - G_c + G_s + \tilde{G}.$$

利用（2.5）和（2.6）以及直接计算，可以验证 H 是光滑的，并且对所有 $|\alpha| \le 2$、$\alpha \in \mathbb{N}_0^{3N}$，都有 $\partial^\alpha H \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N})$。因此，我们可以将 [22,定理 1.5] 改述如下。

定理 A.1（S. Fournais、M. 和 T. Hoffmann-Ostenhof、T.Ø. Sørensen）。对于所有 $0 < r < R$，存在一个常数 C，其取决于 r 和 R，使得

$$\|\phi'\|_{W^{2,\infty}(B(\mathbf{x},r))} \le C\,\|\phi'\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},R))} \tag{A.1}$$

对于所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$。该常数不依赖于 $\mathbf{x}$。

注。我们使用函数空间 $C^{1,1}(\overline{B})$ 与 $W^{2,\infty}(B)$ 的等价性（当开球为 B 时），例如参见 [23]。

以下引理可通过直接计算验证。这里，e_i 表示 $\mathbb{R}^3$, $i = 1,2,3$ 中的第 i 个单位基向量。

引理 A.2. $G, \nabla G \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N})$。此外，对于所有 $j,k = 1,\dots N$ 和 $r,s \in \{1,2,3\}$，存在某个 C 使得

$$|\partial_{x_j}^{e_r}\partial_{x_k}^{e_s}G(\mathbf{x})| \le \begin{cases} C\big(1 - \log\left(\min\{1, |x_j|^2 + |x_k|^2\}\right)\big) & \text{if } j \ne k \text{ and } r = s \\ C & \text{otherwise.} \end{cases}$$

由于 ϕ 不含涉及 G的额外指数因子，我们不认为它的二阶导数有界。不过，我们利用定理 A.1 推出以下推论，得到逐点界，表明 ϕ 的二阶导数只有对数奇点。回顾一下， ν_P 在式 (1.22) 中定义。

推论 A.3. 对所有 $0 < r < R < 1$，存在 C，其取决于 r 和 R，使得对于任意非空簇 P 以及任意满足 $|\eta| = 1$ 的 $\eta \in \mathbb{N}_0^3$，

$$\|D_P^\eta \nabla\phi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\nu_P(\mathbf{x})))} \leq C(1 - \log \nu_P(\mathbf{x})) \, \|\phi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x},R))}$$

对于所有满足 $\nu_P(\mathbf{x}) > 0$ 的 $\mathbf{x}$。

注 A.4. 根据定义，显然 $\nu_P \geq \lambda_P$，因此特别地，上述不等式在 Σ_P^c 上成立。

证明. 根据簇导数的定义 (1.15)，由引理 A.2 可知，存在某个 C，使得

$$|D_P^\eta \nabla G(\mathbf{x})| \leq C(1 - \log(\nu_P(\mathbf{x}))) \tag{A.2}$$

对于所有满足 $\nu_P(\mathbf{x}) > 0$ 的 $\mathbf{x}$。

由 (1.23)，可得对于所有满足 $\in B(\mathbf{x}\ r\nu_P(\mathbf{x}))$ 的 $\mathbf{y}$，$(1 - r)\nu_P(\mathbf{x}) \leq \nu_P(\mathbf{y})$。因此，对于如 (A.2) 中的 C，对所有满足 $\nu_P(\mathbf{x}) > 0$ 的 $\mathbf{x}$,

$$\|D_P^\eta \nabla G\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\nu_P(\mathbf{x})))} \leq C(1 - \log(1 - r) - \log(\nu_P(\mathbf{x}))) \tag{A.3}$$

$$\leq C'(1 - \log(\nu_P(\mathbf{x}))) \tag{A.4}$$

对于某个依赖于 r 的 C'。

根据定义 (2.7)，我们回忆起 $\phi = e^{-F}\psi$。因此 $\phi = e^G\phi'$。于是，我们有 $\nabla\phi = e^G\phi'\nabla G + e^G\nabla\phi'$。因此，下列公式成立,

$$D_P^\eta \nabla\phi = \big(D_P^\eta \nabla G + D_P^\eta G \, \nabla G\big)e^G\phi' + e^G D_P^\eta \phi' \, \nabla G + e^G D_P^\eta G \, \nabla\phi' + e^G D_P^\eta \nabla\phi'.$$

取范数，并利用引理 A.2 得到的 $G, \nabla G \in L^\infty$，我们便可得出 C，使得

$$\|D_P^\eta \nabla\phi\|_{L^\infty(B(\mathbf{x}, r\nu_P(\mathbf{x})))} \leq C(1 - \log(\nu_P(\mathbf{x}))) \, \|\phi'\|_{W^{2,\infty}(B(\mathbf{x}, r\nu_P(\mathbf{x})))} \, . \tag{A.5}$$

利用 $\nu_P \leq 1$，接着应用定理 A.1，再利用等式 $\phi = e^G\phi'$，即可得到所需结果。

□

致谢。作者谨此感谢 A. V. Sobolev 在本研究各方面所给予的宝贵讨论。

References

[1]M. Reed 和 B. Simon。《现代数理物理方法 II：傅里叶分析、自伴性》。Academic Press, Inc., 1975年。[2] T. Kato。论量子力学中多粒子系统的本征函数。《纯粹与应用数学通讯》，10:151–177，1957年。[3] M. Hoffmann-Ostenhof 和 R. Seiler。n电子系统本征函数的尖点条件。《物理评论 A》，23(1)，1981年。[4] M. Hoffmann-Ostenhof、T. Hoffmann-Ostenhof 和 T.Ø. Sørensen。《原子的电子波函数与密度》。《亨利·庞加莱年刊》，2:77–100，2001年。[5] H. Yserentant。混合导数希尔伯特空间中电子薛定谔方程的正则性。《数值数学》，98:731–759，2004年。[6] S. Fournais、M. Hoffmann-Ostenhof、T. Hoffmann-Ostenhof 和 T.Ø. Sørensen。《多体库仑波函数的解析结构》。《数学物理通讯》，289:291–310，2009年。[7] B. Ammann、C. Carvalho 和 V. Nistor。薛定谔算子本征函数的正则性。《数学物理快报》，101:49–84，2012年。[8] S. Fournais 和 T.Ø. Sørensen。库仑波函数及其电子密度的导数估计。《纯粹与应用数学杂志》，2021(775):1–38，2021年。[9] P. Hearnshaw 和 A.V. Sobolev。单粒子库仑密度矩阵的对角线行为。《概率与数理物理》，4(4):935–964，2023年。[10] J. Cioslowski。电子系统约化密度矩阵中的非对角导数不连续性。《化学物理杂志》，153(154108)，2020年。[11] J. Cioslowski。量子化学中的逆向工程：如何在不实际计算的情况下揭示单电子约化密度矩阵中的五阶非对角尖点。《国际量子化学杂志》，122(8)，2022年。e26651。[12] P. Hearnshaw 和 A.V. Sobolev。《单粒子密度矩阵的解析性》。《亨利·庞加莱年刊》，23:707–738，2022年。[13] T. Jecko。分子电子约化密度的解析性。《数学物理杂志》，63(1)，2022年。013509。[14] S. Fournais、M. Hoffmann-Ostenhof、T. Hoffmann-Ostenhof 和 T.Ø. Sørensen。《电子波函数密度的解析性》。《数学文献汇编》，42:87–106，2004年。[15] T. Jecko。《分子电子密度解析性的新证明》。《数学物理快报》，(93):73–83，2010年。[16] A.V. Sobolev。单粒子密度矩阵的本征值估计。《谱理论杂志》，12(2):857–875，2022年。[17]A.V. Sobolev。单粒子密度矩阵的本征值渐近。《杜克数学杂志》，171(17):3481–3513，2022年。[18] A.V. Sobolev。单粒子动能密度算子的本征值渐近。《泛函分析杂志》，283(8)，2022年。[19]T. Jecko 和 C. Noˆus。分子中特定电子约化密度矩阵的有限正则性。2023年。arXiv，2309.06318。[20]T. Jecko 和 C. Noˆus。具有固定原子核和 N个电子的分子的（N-1）粒子电子约化密度矩阵的正则性。2024年。arXiv，2407.03706。[21] S. Fournais、M. Hoffmann-Ostenhof、T. Hoffmann-Ostenhof 和 T.Ø. Sørensen。电子密度在原子核以外处光滑。《数学物理通讯》，228(3):401–415，2002年。[22] S. Fournais、M. Hoffmann-Ostenhof、T. Hoffmann-Ostenhof 和 T.Ø. Sørensen。《库仑多电子波函数的精确正则性结果》。《数学物理通讯》，255:183–227，2005年。[23] L.C. Evans 和 R.F. Gariepy。《测度论与函数的精细性质》。CRC出版社，第1版，1992年。

Centre for the Mathematics of Quantum Theory, University of Copenhagen, Univer-sitetsparken 5, DK-2100 Copenhagen Ø, Denmark电子邮件地址：ph@math.ku.dk