XII.4. Методы суммирования в теории возмущений

Самая мысль, что функция может быть определена расходящимся асимптотическим рядом, была совершенно чужда сознанию девятнадцатого века. Когда Борель, в то время еще неизвестный молодой человек, открыл, что его методы суммирования дают «правильный» ответ для многих классических расходящихся рядов, он решил совершить путешествие в Стокгольм к Миттаг-Леффлеру, признанному главе комплексного анализа. Миттаг-Леффлер вежливо выслушал все то, что Борель хотел ему сказать, и затем, положив руку на полное собрание сочинений своего учителя Вейерштрасса, сказал по-латыни: «Мастер запрещает это».

РАССКАЗ МАРКА КАЦА

Итак, мы видели, что расходящийся ряд теории возмущений, такой, например, как ряд для уровней энергии оператора $p^2+x^2+\beta x^4$, тем не менее может давать некоторые сведения относительно истинных уровней энергии и что при достаточно широких условиях ряд Релея — Шредингера является асимптотическим. Мы видели также, что если о некотором ряде говорится, что он является асимптотическим, то это очень слабое утверждение; в частности, если $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ есть асимптотический ряд для $E(\beta)$, то это еще не дает нам никаких сведений о $E(\beta_0)$ при фиксированном $\beta_0 \neq 0$. В этом разделе мы изучим вопрос, не может ли тем не менее расходящийся ряд теории возмущений определять энергетический уровень $E(\beta)$, если пользоваться какими-либо более изощренными методами, чем прямое суммирование.

Прежде всего мы поищем какое-либо условие, более сильное, чем утверждение что $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ — асимптотический ряд для $E(\beta)$, и более слабое, чем утверждение, что ряд сходится, но такое, которое все же единственным образом определяет $E(\beta)$. Напомним, что неединственность функции, представляемой асимптотическим рядом, следует из того, что ненулевые функции, такие, как $\exp(-\beta^{-1})$, могут иметь нулевой асимптотический ряд. Мы ищем, таким образом, более сильное условие, которое гарантировало бы единственность. Такое условие дается следующей теоремой Карлемана.

Теорема XII.17 (теорема Карлемана). Пусть g — функция, аналитическая внутри сектора $S=\{z \mid 0 \leqslant |z| \leqslant B,\ |\arg z| \leqslant \pi/2\}$ и непрерывная на S. Предположим, что для каждого n

$$|g(z)| \leqslant b_n |z|^n$$

при всех z внутри сектора. Если еще $\sum_{n=1}^{\infty} b_n^{-1/n}=\infty$, то g — тождественный нуль.

Нам понадобится только частный случай теоремы Карлемана, который мы докажем ниже. Отметим, что условие $|g(z)|\leqslant b_n|z|^n$ утверждает в точности, что g имеет нулевой асимптотический ряд. Дополнительное условие $\sum_{n=1}^{\infty} b_n^{-1/n}=\infty$ есть граница, указывающая, насколько быстро $b_n^{-1/n}$ может стремиться к нулю, или, эквивалентно, насколько быстро b_n может стремиться к бесконечности. Так как $\sum_{n=1}^{\infty} n^{-1}$ только слегка расходится, то условие $\sum_{n=1}^{\infty} b_n^{-1/n}=\infty$ совсем ненамного слабее оценки $b_n\leqslant C_0B_0^n n^n$ с соответствующим образом выбранными C_0 и B_0, или, что эквивалентно, $b_n\leqslant CB^n n!$ с соответствующими C и B. Это позволяет придать теореме Карлемана такую форму:

Теорема XII.18. Допустим, что g есть функция, аналитическая внутри и непрерывная на $S=\{z \mid |\arg z|\leqslant {}^1/_2\pi+\varepsilon,\ 0<|z|\leqslant R\}$ с некоторым $\varepsilon>0$. Если существуют C и B, такие, что

$$|g(z)|\leqslant CB^n n!\,|z|^n$$

при всех $z\in S$ и при всех n, то g — тождественный нуль.

Доказательство. Для упрощения обозначений положим $w=z^{-1}$ и $f(w)=g(w^{-1})$. Тогда f аналитична в

$$\tilde{S}=\{w \mid |\arg w|\leqslant {}^1/_2\pi+\varepsilon,\ |w|\geqslant R^{-1}\}.$$

При всех n и всех $w\in\tilde{S}$ имеем $|f(w)|\leqslant CB^n n!\,|w|^{-n}$. По формуле Стирлинга, для любого $\delta>0$ можно найти такое D_δ, что $n!\leqslant D_\delta n^n e^{-n(1-\delta)}$. Выбирая n наибольшим целым, меньшим $|w|/B$, видим, что $|f(w)|\leqslant C'e^{-\varepsilon|w|}$ с некоторыми C' и ε. Пользуясь принципом Фрагмена — Линделёфа, мы покажем, что $f(w_0)=0$, если w_0 вещественно и $w_0>R^{-1}$, и с помощью аналитического продолжения заключим, что $f\equiv 0$. Выберем α так, что $\alpha({}^1/_2\pi+\varepsilon)={}^1/_2\pi$. Пусть $f_m(w)=f(w)\exp[m(w/w_0)^\alpha]$. Так как $\alpha<1$ и $|f(w)|\leqslant C'e^{-\varepsilon|w|}$, то $f_m(w)\to 0$ при $|w|\to\infty$. Следовательно, по принципу максимума,

$$|f_m(w_0)|\leqslant\max\{|f_m(w)| \mid |w|=R^{-1} \text{ или } |\arg w|={}^1/_2\pi+\varepsilon\}.$$

Положив $M_1=\max\{|f(w)| \mid |w|=R^{-1}\}$ и $M_2=\max\{|f(w)| \mid |\arg w|={}^1/_2\pi+\varepsilon\}$, видим, что

$$|f_m(w_0)|\leqslant\max\{M_1\exp[m(R^{-1}/w_0)^\alpha],\ M_2\},$$

откуда

$$|f(w_0)| \leqslant \max\{M_1 \exp[m(-1+(R^{-1}/w_0)^\alpha)],\ M_2 \exp[-m]\}.$$

Так как m произвольно, $f(w_0)=0$. ∎

В процессе доказательства мы установили, что если f аналитична в $\bar{S}$ и убывает экспоненциально, то f есть нуль. Некоторое расширение этого факта (теорему Карлсона) мы докажем и будем использовать в § XIII.13.

Как видно из доказанной теоремы, мы выделили условие более сильное, чем утверждение, что $E(\beta)$ имеет асимптотический ряд $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$.

Определение. Будем говорить, что функция $E(\beta)$, аналитическая в секторе $\{\beta \mid 0<|\beta|<B,\ |\arg\beta|<{}^1/_2\pi+\varepsilon\}$, удовлетворяет **сильному асимптотическому условию** и имеет $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ в качестве **сильного асимптотического ряда,** если существуют такие C и σ, что при всех N и всех β в данном секторе

$$\left|E(\beta)-\sum_{n=0}^{N} a_n\beta^n\right| \leqslant C\sigma^{N+1}(N+1)!\,|\beta|^{N+1}.$$

Теорема XII.19. Если $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ — сильный асимптотический ряд для двух аналитических функций f и g, то $f=g$.

Доказательство. В силу предположения,

$$|f(\beta)-g(\beta)| \leqslant 2C\sigma^{N+1}(N+1)!\,|\beta|^{N+1}$$

в $\{\beta \mid 0<|\beta|\leqslant{}^1/_2B,\ |\arg\beta|\leqslant{}^1/_2(\pi+\varepsilon)\}$, поэтому из теоремы XII.18 следует, что $f-g=0$. ∎

Чтобы понять, что дает идея сильного асимптотического условия в применении к собственным значениям, полезна следующая простая лемма технического характера (задача 26).

Лемма. Если f и g удовлетворяют сильным асимптотическим условиям и $\lim_{|\beta|\to 0} g(\beta)\neq 0$, то отношение f/g удовлетворяет сильному асимптотическому условию и его асимптотический ряд дается формальным отношением асимптотических рядов для f и g.

Пример 1. Рассмотрим уровни энергии ангармонического осциллятора $p^2+x^2+\beta x^4$. Мы видели, что $E(\beta)=(H(\bar\beta)\Omega_0,\ P(\beta)\Omega_0)/(\Omega_0,\ P(\beta)\Omega_0)$. По предыдущей лемме, достаточно получить оценку вида $C\sigma^{N+1}(N+1)!\,|\beta|^{N+1}$ нормы остатка $P(\beta)\Omega_0$ после вычитания первых N членов асимптотического ряда. Поскольку $P(\beta)$ задан как интеграл от резольвенты, следует лишь установить сильное асимптотическое условие для $(H(\beta)-E)^{-1}\Omega_0$ с оценкой, равномерной по $|E-E_0|=\varepsilon$. Остаточный член, который мы должны оценить, есть в точности остаточный член геометрического ряда:

$$(H(\beta)-E)^{-1}\Omega_0-\sum_{n=0}^{N}(-\beta)^n(H_0-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^n\Omega_0=$$
$$=(-\beta)^{N+1}(H(\beta)-E)^{-1}[V(H_0-E)^{-1}]^{N+1}\Omega_0.$$

Так как $\|(H(\beta)-E)^{-1}\|$ равномерно ограничена вследствие сходимости по норме, доказанной в предыдущем разделе, то нам нужно только доказать, что

$$\|[x^4(p^2+x^2-E)^{-1}]^{N+1}\Omega_0\|\leqslant C\sigma^{N+1}(N+1)!$$

при $|E-{}^1/_2|={}^1/_2$. В терминах стандартных операторов A, $A^\dagger$, обсуждавшихся в дополнении к § V.3, $x^4={}^1/_4(A+A^\dagger)^4$, так что интересующая нас норма может быть оценена посредством $(2^4)^{N+1}$ членов вида

$$4^{-N-1}\|A_1^\#\ldots A_4^\#(H_0-E)^{-1}A_5^\#\ldots A_{4N+4}^\#(H_0-E)^{-1}\Omega_0\|,$$

где каждый $A^\#$ есть или A, или $A^\dagger$. Оценка $C\sigma^{N+1}(N+1)!$ получается с помощью формул

$$A\Omega_n=\sqrt{n}\,\Omega_{n-1},\qquad A^\dagger\Omega_n=\sqrt{n+1}\,\Omega_{n+1},$$
$$(H_0-E)^{-1}\Omega_n=(2n+1-E)^{-1}\Omega_n.$$

Следовательно, энергетические уровни осциллятора $p^2+x^2+\beta x^4$ удовлетворяют сильному асимптотическому условию; в частности, уровни энергии ангармонического осциллятора единственным образом определяются соответствующими рядами Релея — Шредингера.

Саймон обобщил приведенное рассуждение на абстрактную ситуацию. Из полученных при этом результатов типичен следующий.

Теорема XII.20. Пусть H_0, V и M — самосопряженные операторы, удовлетворяющие следующим условиям:

(i) $H_0\geqslant 0$;

(ii) для каждого $a>0$ существует такое b, что $V_-\leqslant aH_0+b$;

(iii) $|V|\leqslant cH_0^2+d$ для некоторых c и d;

(iv) $0\leqslant M\leqslant H_0$;

(v) M и H_0 коммутируют;

(vi) $C^\infty(M)\subset D(V)$ и V переводит $C^\infty(M)$ в себя;

(vii) существуют такие константы e и f, что для любых n и всех $\psi \in C^\infty(M)$

$$\|(M+1)^n V\psi\| \leqslant e\|(M+f)^{n+2}\psi\|.$$

Пусть $H_0+\beta V$ определено как сумма форм при малых $|\beta|$ и $|\arg\beta|<\pi-\varepsilon$. Тогда любому изолированному невырожденному собственному значению H_0 отвечает при малых $|\beta|$ собственное значение $H_0+\beta V$ и ряд Релея — Шредингера есть его сильный асимптотический ряд.

Доказательство см. в литературе, указанной в Замечаниях.

Эта теорема позволяет распространить идею примера 1 на n-мерный ангармонический осциллятор. В частности, если $\mathscr{H}=L^2(\mathbb{R}^n)$,

$$H_0=\sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\omega_i^2x_i^2\right) \quad \text{и} \quad V=\sum_{i,j,k,l=1}^{n} a_{ijkl}x_ix_jx_kx_l,$$

где коэффициенты a таковы, что $V(x)\geqslant 0$ при всех $x\in\mathbb{R}^n$, то любому невырожденному собственному значению E_0 оператора H_0 отвечает ряд Релея — Шредингера, являющийся сильным асимптотическим рядом для собственного значения $E(\beta)$ оператора $H(\beta)=H_0+\beta V$, причем $E(0)=E_0$.

Пример 2 ($(\varphi^4)_2$ с пространственным обрезанием). В § X.7 мы коротко обсудили полевые теории с пространственным обрезанием в двумерном пространстве-времени:

$$H_0=\int\sqrt{m^2+k^2}\,a^\dagger(k)\,a(k)\,dk=d\Gamma\left(\sqrt{k^2+m^2}\right),$$
$$V=\int g(x):\varphi^4(x):dx,$$

где $g\in L^2\cap L^1$, $g\geqslant 0$ и

$$M=\int a^\dagger(k)\,a(k)\,dk=d\Gamma(1)$$

— оператор числа частиц. Можно убедиться, что выполнены все условия теоремы XII.20. Труднее всего доказать условие (ii), которое обсуждалось в § X.9. Следовательно, ряд Релея — Шредингера для энергии основного состояния есть сильный асимптотический ряд для энергии точного основного состояния. Как мы уже отмечали, ряд Релея — Шредингера в этом случае задается суммами фейнмановских диаграмм. Этот пример позволяет думать, что в более общей ситуации фейнмановский ряд может быть сильным асимптотическим рядом.

Из сильного асимптотического условия вытекает, что $|a_n|<C\sigma^n n!$. В простых примерах появляются ряды, в которых a_n

ведут себя как $(kn)!$ с $k>1$. Следовательно, в этих случаях сильное асимптотическое условие уже не может выполняться. Но из простых рассуждений, основанных на использовании масштабных преобразований и теоремы Карлемана, следует, что любая функция g, аналитическая в многолистной области $\{z \mid 0<|z|<B, |\arg z|<{}^1/_2 k\pi+\varepsilon\}$ и удовлетворяющая неравенству $|g(z)| \leqslant C\sigma^N[k(N+1)]!\,|z|^{N+1}$ при всех N и z в указанной области, равна нулю тождественно Это подсказывает такое

Определение. Будем говорить, что функция $E(\beta)$, аналитическая в секторе $\{\beta \mid 0<|\beta|<B, |\arg\beta|<{}^1/_2 k\pi+\varepsilon\}$, удовлетворяет **модифицированному сильному асимптотическому условию порядка k** и имеет $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ в качестве **сильного асимптотического ряда порядка k**, если существуют такие C и σ, что при любых N и всех β в указанном секторе

$$\left|E(\beta)-\sum_{n=0}^{N} a_n\beta^n\right| \leqslant C\sigma^{N+1}[k(N+1)]!\,|\beta|^{N+1}.$$

Обобщая теорему Карлемана, можно обобщить и теорему XII.19: если f и g обе имеют $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ в качестве сильного асимптотического ряда порядка k, то $f=g$.

Пример 3 (осциллятор x^{2m}). Пусть $H_0=-d^2/dx^2+x^2$. и $V=x^{2m}$ $(m\geqslant 3)$. Численные расчеты показывают, что коэффициенты Релея — Шредингера a_n для энергии основного состояния ведут себя при больших n как $(-1)^{n+1}C\sigma^n[(m-1)n]!\,[1+O(1/n)]$, откуда должно следовать, что обычное сильное асимптотическое условие не может быть выполнено. Однако можно показать, что $E(\beta)$ имеет продолжение в многолистный сектор $\{\beta \mid |\arg\beta| \leqslant {}^1/_2(m+1)\pi-\varepsilon, |\beta|\leqslant B_\varepsilon\}$ с любым $\varepsilon>0$ и что в таком секторе выполнено сильное асимптотическое условие порядка $m-1$. Стало быть, асимптотические ряды и в этих случаях определяют собственные значения.

Так как сильный асимптотический ряд определяет $E(\beta)$ единственным образом можно ожидать, что есть какой-то способ построить E с помощью a_n, раз мы знаем, что E удовлетворяет сильному асимптотическому условию. Метод явного построения E содержится в следующей теореме Ватсона, доказательство которой можно найти в ссылках на литературу.

Теорема XII.21 (теорема Ватсона). Предположим, что $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ есть сильный асимптотический ряд для $E(\beta)$ в секторе

$\{\beta \mid 0 < |\beta| < B,\ |\arg \beta| \leqslant {}^1/_2\pi + \varepsilon\}$. Рассмотрим функцию

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} z^n,$$

аналитическую в некотором круге с центром в $z=0$ вследствие сильного асимптотического условия. Тогда

(a) g имеет аналитическое продолжение в область $\{z \mid |\arg z| < \varepsilon\}$;

(b) если $|\beta| < B$ и $|\arg \beta| < \varepsilon$, то $\int\limits_0^\infty |g(x\beta)| e^{-x} dx < \infty$;

(c) если $|\beta| < B$ и $|\arg \beta| < \varepsilon$, то $E(\beta) = \int\limits_0^\infty g(x\beta) e^{-x} dx$.

Заметим, что так как $\int\limits_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$, то, если бы можно было переставить $\int\limits_0^\infty$ и $\sum\limits_{n=0}^{\infty}$, мы имели бы

$$\int\limits_0^\infty g(x\beta) e^{-x} dx = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \beta^n \quad \text{(формально).}$$

Описанный здесь способ получения суммы $\sum\limits_{n=0}^{\infty} a_n \beta^n$ есть частный пример **метода суммирования**, т. е. метода получения конечного ответа из расходящегося ряда, ответа, который *формально* является суммой такого ряда. Этот метод называется **методом суммирования по Борелю**; $g(z)$ называется **борелевым образом** $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$, а формула преобразования Лапласа $\int\limits_0^\infty g(x\beta) e^{-x} dx$ иногда называется обратным преобразованием Бореля.

Пример 1 (заново). Можно выбрать ε произвольно близким к π, так что g будет аналитической в плоскости с разрезом $\mathbb{C} \setminus (-\infty, -R)$, где R — радиус сходимости преобразования Бореля. В частном случае одномерного осциллятора известно, что $E(\beta)$ аналитична в $\{\beta \mid |\arg \beta| < \pi\}$, поэтому обратное преобразование Бореля сходится к E при любом положительном β (и, более общим образом, при любом β с $\operatorname{Re} \beta > 0$).

Пример 2 (заново). В этом случае мы можем восстановить $E(\beta)$ при достаточно малых $|\beta|$ и $|\arg \beta|$ из преобразования Бореля ряда Релея — Шредингера.

Пример 3 (заново). Метод Бореля прямо не применим, но работает его обобщение (задача 29 (b)). Конкретно, для осциллятора x^{2m} модифицированный борелев образ

$$g(z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a_n}{[n(m-1)]!}z^n$$

аналитичен в плоскости с разрезом $\mathbb{C}\setminus(-\infty,\ -R_m)$ и для положительных малых β

$$E(\beta)=\int_0^{\infty}g(\beta x^{m-1})\,e^{-x}\,dx.$$

Итак, мы видели, что описанный метод суммирования позволяет восстановить собственные значения. В некоторых частных случаях могут оказаться полезными другие методы, даже более удобные в вычислительном отношении; мы их коротко обсуждаем в Замечаниях.

XII.5. Концентрация спектра

В двух предыдущих разделах мы изучали возмущенные системы с изолированным собственным значением, расположенным поблизости от изолированного собственного значения невозмущенной системы, и ряды теории возмущений, которые почленно конечны во всех порядках, но не сходятся. В этом разделе мы хотим исследовать более сложную ситуацию, когда есть изолированное невозмущенное собственное значение и почленно конечный ряд теории возмущений, но нет возмущенного собственного значения!

Рассмотрим следующий простой пример. Пусть $H_0=-\Delta-1/r$ и $V=E_0\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}$, где $\mathbf{e}$ — фиксированный единичный вектор в $\mathbb{R}^3$. При вещественных β оператор $H_0+\beta V$ есть гамильтониан атома водорода в постоянном электрическом поле $-\beta E_0\mathbf{e}$, т. е. гамильтониан так называемого эффекта Штарка. В § X.5 мы доказали, что $H_0+\beta V$ самосопряжен в существенном на $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. С другой стороны, легко видеть, что если $\beta\neq 0$, то $H_0+\beta V$ не ограничен снизу. Мы покажем ниже (§ XIII.4), что $\sigma(H_0+\beta V)=(-\infty,\ \infty)$, если $\beta\neq 0$. Следовательно, коль скоро включено возмущение, все собственные значения H_0 оказываются погруженными в непрерывный спектр. Тем не менее ряд теории возмущений для энергии основного состояния, задаваемый формальными выражениями из § 1, почленно конечен. Что же это значит?

Прежде чем дать математический ответ на этот вопрос, при-