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, приведем другую интерпретацию изложенного. Пусть

$$V_n(r) = \begin{cases} E_0 \mathbf{e}\cdot\mathbf{r}, & \text{если } |\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}| < n, \\ E_0 n, & \text{если } \mathbf{e}\cdot\mathbf{r} \geqslant n, \\ -E_0 n, & \text{если } \mathbf{e}\cdot\mathbf{r} \leqslant -n. \end{cases}$$

Каждое V_n есть возмущение типа (A), так что при некотором $B^{(n)}$ ряд теории возмущений $\sum a_m^{(n)}\beta^m$ для энергии основного состояния $E^{(n)}(\beta)$ гамильтониана $H_0+\beta V_n$ сходится к $E^{(n)}(\beta)$, если $|\beta| \leqslant B^{(n)}$. Предположим, что $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m\beta^m$ есть формальный ряд теории возмущений для энергии основного состояния гамильтониана $H_0+\beta V$. Заметим, что $a_m^{(n)}$ сходится к a_m при $n \to \infty$. Мы, таким образом, интерпретируем $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m\beta^m$ как формальный предел сходящейся последовательности $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m^{(n)}\beta^m$. Эта интерпретация не очень удовлетворительна математически, ибо похоже, что $B^{(n)} \to 0$ и что $\sum\limits_{m=0}^{\infty} a_m\beta^m$ расходится при всех β, однако нужно подчеркнуть, что такая интерпретация правильна с физической точки зрения! Действительно, эксперимент с реальными атомами в реальном электрическом поле делается не в поле, простирающемся во всем пространстве; потенциал V — это идеализация. Потенциал V_n гораздо ближе к экспериментально получаемому потенциалу, а $E^{(n)}(\beta)$ — к измеряемой спектроскопической наблюдаемой. Но так как $E^{(n)}(\beta) \approx a_0 + a_1^{(n)}\beta$ для малых β и $a_1^{(n)} \approx a_1$ при больших n, то мы можем оценить $E^{(n)}(\beta)$, пользуясь a_1.

Несмотря на предыдущее замечание о физическом содержании задачи, нельзя не чувствовать, что и весь ряд теории возмущений все же должен иметь какое-то отношение к $H_0+\beta V$. Действительно, мы увидим, что спектр $H_0+\beta V$ «сгущается» возле невозмущенных собственных значений и что центр сгущения задается асимптотическим рядом $\sum a_m\beta^m$. Точный смысл «сгущения» раскрывается следующим определением.

Определение. Пусть H_n — семейство самосопряженных операторов, и пусть $\{P_n(\Omega)\}$ — семейство спектральных проекторов H_n. Пусть $\{S_n\}_{n=1}^{\infty}$ и T — подмножества в $\mathbb{R}$. Будем говорить, что **часть спектра H_n, лежащая в T, асимптотически попадает в S_n,** тогда и только тогда, когда

$$\operatorname*{s-lim}_{n\to\infty} P_n(T \setminus S_n) = 0.$$

Когда $H_n \to H$ в сильном резольвентном смысле, будем говорить, что **часть спектра H_n в S_n есть асимптотически часть спектра H в T**, если

$$\underset{n\to\infty}{\text{s-lim}}\, P_n(S_n) = P(T),$$

где $\{P(\Omega)\}$ — проекторнозначная мера оператора H.

Пример 1. Пусть $H = I$, $H_n = I + n^{-1}X$, где X — оператор $(Xf)(x) = xf(x)$ на $L^2(-\infty, \infty)$. Если $\chi_{(a,b)}$ — умножение на характеристическую функцию интервала (a, b), то $P_n(1-\alpha, 1+\beta) = \chi_{(-n\alpha, n\beta)}$. Часть спектра H_n в $(0, 2)$ асимптотически попадает в $(1-n^{-1/2}, 1+n^{-1/2})$, а часть спектра H_n в $(1-n^{-1/2}, 1+n^{-1/2})$ есть асимптотически часть спектра H в $(0, 2)$. Чтобы увидеть связь между этим асимптотическим «погружением» и интуитивным представлением о «сгущении», рассмотрим спектральные меры, связанные с фиксированным вектором ψ. Если $d\mu_n(\lambda) = d(\psi, P_n(\lambda)\psi)$, то $d\mu_n(\lambda) = d\mu_1(1 + (\lambda - 1)n^{-1})$. Следовательно, $d\mu_n \to \delta(\lambda - 1)$.

В этом примере мы замечаем характерную симметрию:

Предложение. Предположим, что $H_n \to H$ в сильном резольвентном смысле. Пусть $T = (a, b)$, причем $a, b \notin \sigma_{pp}(H)$. Пусть $S_n \subset T$ при достаточно больших n. Тогда часть спектра H_n в T асимптотически попадает в S_n тогда и только тогда, когда часть спектра H_n, лежащая в S_n, асимптотически является частью спектра H в T.

Доказательство. По теореме VIII.24, $\text{s-lim}\, P_n(T) = P(T)$. Следовательно, $\text{s-lim}\, P_n(S_n) = P(T)$ тогда и только тогда, когда $\text{s-lim}\, P_n(T \setminus S_n) = 0$. ∎

Подчеркнем, что понятие асимптотической концентрации есть свойство *последовательности* операторов $\{H_n\}_{n=1}^{\infty}$. Нет никакого смысла говорить, что один оператор H_n имеет спектр, сосредоточенный в S_n. В примере 1 все H_n унитарно эквивалентны, так что $\sigma(H_n) = \sigma(H_m)$.

Теперь мы можем высказать одну гипотезу о связи между $a_0 + a_1\beta$ и $H_0 + \beta V$ в рассмотренном примере эффекта Штарка. Допустим, что мы можем найти такой интервал I вокруг энергии a_0 невозмущенного основного состояния, что $\sigma(H_0) \cap I = \{a_0\}$, и такую функцию $f(\beta)$ с $f(\beta)/\beta \to 0$, что часть спектра $H(\beta)$ в $(a_0 + a_1\beta - f(\beta), a_0 + a_1\beta + f(\beta))$ является асимптотически частью спектра H_0 в I. Это свойство определяет a_1 единственным образом (задача 31). Поэтому, хотя $H(\beta)$ не имеет собственного значения вблизи $a_0 + a_1\beta$, он имеет спектр, сконцентрированный вблизи $a_0 + a_1\beta$, когда $\beta \to 0$. Средством для доказательства такой концентрации спектра служит понятие псевдособственного значения.

Определение. Предположим, что $H(\beta)$ — семейство самосопряженных операторов, определенных при малых вещественных β таким образом, что, когда $\beta \to 0$, $H(\beta) \to H_0$ в сильном резольвентном смысле. Пусть E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0 и ψ_0 — соответствующий нормированный собственный вектор. Семейство векторов $\psi(\beta)$ (β — вещественное) и семейство чисел $E_0+\beta E_1$ называются соответственно **псевдособственным вектором первого порядка** и **псевдособственным значением первого порядка** тогда и только тогда, когда

(i) $\lim\limits_{\beta\to 0} \|\psi(\beta)-\psi_0\|=0$;

(ii) $\lim\limits_{\beta\to 0} \beta^{-1}\|(H(\beta)-E_0-\beta E_1)\psi(\beta)\|=0$.

Далее вместо утверждения: «существует псевдособственный вектор первого порядка $\psi(\beta)$ с отвечающим ему псевдособственным значением $E_0+\beta E_1$», мы кратко будем говорить: «$E_0+\beta E_1$ есть псевдособственное значение $H(\beta)$».

Теорема XII.22. Предположим, что $H(\beta) \to H_0$ в сильном резольвентном смысле при $\beta \to 0$ и что все $H(\beta)$ самосопряжены. Пусть E_0 — изолированное невырожденное собственное значение H_0 и I — такой интервал, что $\bar{I} \cap \sigma(H_0) = \{E_0\}$. Тогда существует функция $f(\beta)$, удовлетворяющая условию $f(\beta)/\beta \to 0$, такая, что часть спектра $H(\beta)$, лежащая в I, асимптотически попадает в

$$I_\beta \equiv (E_0+\beta E_1 - f(\beta),\ E_0+\beta E_1+f(\beta))$$

в том и только том случае, когда $E_0+\beta E_1$ есть псевдособственное значение первого порядка для $H(\beta)$.

Доказательство. Пусть $P^\beta(\Omega)$ суть спектральные проекторы $H(\beta)$. Если часть $\sigma(H(\beta))$, лежащая в I, асимптотически попадает в I_β, то $P^\beta(I_\beta)$ сильно сходится к $P^0(I) = P^0(\{E_0\})$. В частности, если ψ_0 — невозмущенный собственный вектор оператора H и $\psi(\beta) = P^\beta(I_\beta)\psi_0$, то $\psi(\beta) \to \psi_0$ по норме. Более того,

$$\beta^{-1}\|[H(\beta)-E_0-E_1\beta]\psi(\beta)\| \leqslant \beta^{-1} f(\beta)\|\psi(\beta)\| \to 0,$$

когда $\beta \to 0$, так что $E_0+E_1\beta$ есть псевдособственное значение первого порядка.

Обратно, допустим, что $E_0+\beta E_1$ — псевдособственное значение, отвечающее псевдособственному вектору $\psi(\beta)$. Положим

$$f(\beta) = \|[H(\beta)-E_0-E_1\beta]\psi(\beta)\|^{1/2}\beta^{1/2}.$$

Тогда $\beta^{-1}f(\beta)\to 0$ при $\beta\to 0$. Мы покажем, что $P^\beta(I_\beta)$ сильно сходится к $P^0(\{E_0\})$:

$$\beta^{-2}f(\beta)^4=\|[H(\beta)-E_0-E_1\beta]\psi(\beta)\|^2=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}(\lambda-E_0-E_1\beta)^2\,d(\psi(\beta),\ P^\beta(\lambda)\psi(\beta))\geqslant$$

$$\geqslant f(\beta)^2\int_{\notin I_\beta}d(\psi(\beta),P^\beta(\lambda)\psi(\beta))=f(\beta)^2\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi(\beta)\|^2.$$

Следовательно, $\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi(\beta)\|\leqslant\beta^{-1}f(\beta)\to 0$. Так как

$$\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi_0\|\leqslant\|(I-P^\beta(I_\beta))\psi(\beta)\|+\|\psi(\beta)-\psi_0\|,$$

то $(I-P^\beta(I_\beta))P^0(\{E_0\})\to 0$ по норме. Таким образом,

$$P^\beta(I\diagdown I_\beta)P^0(\{E_0\})=P^\beta(I\diagdown I_\beta)(1-P^\beta(I_\beta))P^0(\{E_0\})\to 0.$$

Кроме того, из сильной резольвентной сходимости вытекает, что $P^\beta(I)\to P^0(\{E_0\})$ и, следовательно,

$$P^\beta(I\diagdown I_\beta)(1-P^0(\{E_0\}))\xrightarrow{s}0.$$

Отсюда заключаем, что $P^\beta(I\diagdown I_\beta)\xrightarrow{s}0$. ∎

Теорема XII.23. Допустим, что самосопряженные операторы $H(\beta)$ заданы для каждого β из некоторой окрестности N нуля в $\mathbb{R}$. Пусть $H_0\equiv H(0)$ и существует такой симметрический оператор V, что

(i) H_0 самосопряжен в существенном на $D(H_0)\cap D(V)$;

(ii) если $\varphi\in D(H_0)\cap D(V)$, то при любом $\beta\in N$ имеем $\varphi\in D(H(\beta))$ и $H(\beta)\varphi=H_0\varphi+\beta V\varphi$;

(iii) E_0 — изолированное собственное значение H_0 с кратностью 1, и соответствующий собственный вектор ψ_0 принадлежит $D(V)$.

Пусть I — такой открытый интервал, что $\sigma(H_0)\cap\bar{I}=\{E_0\}$, и пусть $E_1=(\psi_0,V\psi_0)$ — коэффициент Релея — Шредингера первого порядка для возмущения собственного значения E_0.

Тогда существует такая функция $f(\beta)$ с $\beta^{-1}f(\beta)\to 0$, что часть спектра $H_0+\beta V$, лежащая в I, асимптотически попадает в $(E_0+E_1\beta-f(\beta),\ E_0+E_1\beta+f(\beta))$.

Доказательство. Простые рассуждения, использующие (i), (ii) и первое резольвентное уравнение, показывают, что $H(\beta)\to H_0$ в сильном резольвентном смысле, когда $\beta\to 0$ (задача 32). По теореме XII.22, достаточно построить псевдособственный вектор первого порядка $\psi(\beta)$ с псевдособственным значением $E_0+E_1\beta$. Пусть $\{P^\beta(\Omega)\}$ — спектральные проекторы оператора $H(\beta)$. Выберем $\psi(\beta)=P^{\beta}(I)\psi_0$. По теореме VIII.24, s-lim $P^{\beta}(I)=P^{0}(I)$, так что $\psi(\beta)\to\psi_0$, когда $\beta\to 0$. Так как $\psi_0\in D(H(\beta))$ для любого $\beta\in N$, то $P^{\beta}(I)H(\beta)\psi_0=H(\beta)P^{\beta}(I)\psi_0$. Следовательно,

$$\begin{aligned}\|\beta^{-1}(H(\beta)-E_0-\beta E_1)\psi(\beta)\|&=\|\beta^{-1}P^{\beta}(I)(H_0+\beta V-E_0-E_1\beta)\psi_0\| = \\ &=\|P^{\beta}(I)(V-E_1)\psi_0\|\leqslant \\ &\leqslant\|[P^{\beta}(I)-P^{(0)}(I)](V-E_1)\psi_0\|+\|P^{(0)}(I)(V-E_1)\psi_0\|.\end{aligned}$$

Так как s-lim $P^{\beta}(I)=P^{(0)}(I)$, первый член в правой части неравенства сходится к нулю. Так как E_0 невырожденно, то $P^{(0)}(I)\varphi=(\psi_0,\varphi)\psi_0$ и, следовательно,

$$P^{(0)}(I)(V\psi_0)=E_1\psi_0.$$

Значит, и второй член равен нулю. Тем самым доказано, что $\psi(\beta)$ есть псевдособственный вектор первого порядка. ∎

Пример 2 (эффект Штарка для атома водорода). Пусть $H_0=-\Delta-1/r$ и $V=E_0\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}$. Тогда $E_0=-1/4$ есть энергия основного состояния для H_0. По теореме X.38, $H_0+\beta V$ самосопряжен в существенном на $D(H_0)\cap D(V)$. Функция ψ_0 известна явно, причем $|\psi_0(x)|\leqslant C\exp(-|x|/2)$ с соответствующим C. Кроме того, $\psi_0\in D(V)$. Стало быть, выполнены условия теоремы XII.23. Поскольку $E_1\equiv(\psi_0, V\psi_0)=0$, мы заключаем, что, когда $\beta\to 0$, часть спектра $H_0+\beta V$, находящаяся вблизи от E_0, концентрируется в $(E_0-\lambda\beta,\ E_0+\lambda\beta)$ при любом $\lambda>0$. Вдобавок можно доказать, что все коэффициенты ряда Релея — Шредингера конечны. Более того, для любого n можно найти $f^{(n)}(\beta)$, удовлетворяющую условию $|\beta|^{-n}f^{(n)}(\beta)\to 0$, так чтобы часть спектра $H_0+\beta V$, лежащая вблизи E_0, концентрировалась в $\left(\sum_{m=0}^{n}E_m\beta^m-f^{(n)}(\beta),\ \sum_{m=0}^{n}E_m\beta^m+f^{(n)}(\beta)\right)$, когда $|\beta|\to 0$.

Кроме обобщения на порядок n, упомянутого в этом примере, теорема XII.23 имеет другое важное обобщение — она может применяться к уровням конечной кратности вырождения. Например, в рассмотренном примере эффекта Штарка первое собственное значение выше основного состояния четырехкратно вырождено и расщепляется в первом порядке на одно двукратное псевдособственное значение и два однократных псевдособственных значения. Можно явно найти четыре линейно независимых псевдособственных вектора, сходящихся к векторам ψ_i, удовлетворяющим уравнению $H_0\psi_i=-{}^1/_{16}\psi_i$, с псевдособственными значениями два раза $-{}^1/_{16}$ и $-{}^1/_{16}\pm a\beta$, где a можно сосчитать, пользуясь «теорией возмущений при условии вырождения».