УДК 517.9

К ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ*

© 2002 Н. Б. Ускова

Воронежский государственный технический университет

Методом подобных операторов доказана теорема об оценках собственного значения и собственного вектора в случае, если невозмущенный оператора иммет простое изолированное собственное значение. Это позволило выписать условия применимости и указать погрешность формул, используемых в теории возмущений в квантовой механике и являющихся частным случаем доказанной теоремы.

В квантовой механике при отыскании уровней энергии (собственных значений) и соответствующих этим уровням волновых функций (собственных векторов) часто используется теория возмущений (см., например, [1, гл. 6, с. 171]). При этом гамильтониан H данной физической системы раскладывается в сумму $H = H_0 + V$, где оператор V играет роль малой поправки (возмущения) к невозмущенному гамильтониану H_0. Оператор H_0 выбирается таким образом, чтобы его собственные значения и собственные векторы были известны. Далее находят приближения к собственным значениям и собственным векторам возмущенного оператора H, используя разложения возмущенных собственных векторов в ряд по степеням малости возмущения. В [1, с. 172—175] приведены поправки первого и второго приближений к собственным векторам и первого–третьего приближений к собственным значениям в случае, когда спектр оператора H_0 дискретен, все собственные значения его различны и оператор V самосопряжен.

Аналогичные формулы для собственных значений и собственных векторов широко используются в функциональном анализе (см. [2, гл. 4]). Однако в [1, 2] нет конкретных условий на возмущение, при которых возможно применение приближенных формул и не указана погрешность приближения.

В данной заметке формулы из [1, 2] получены как частный случай теоремы об оценках собственного значения и собственного вектора, если невозмущенный оператор имеет простое изолированное собственное значение, что позволяет получить конкретное условие применимости этих формул, указать погрешность приближения, а, при необходимости, выписать приближения более высокого порядка.

Пусть $A : D(A) \subset H \to H$ — линейный замкнутый оператор, действующий в комплексном гильбертовом пространстве H и имеющий область определения $D(A)$. Пусть λ_1 — простое изолированное собственное значение оператора A, $Ae_1 = \lambda_1 e_1$, $A^* f_1 = \overline{\lambda_1} f_1$ и P_1 — проектор Рисса, построенный по спектральному множеству $\sigma_1 = \{\lambda_1\}$, $P_2 = I - P_1$, $P_1 x = (x, f_1)e_1$, $H_i = Ran\ P_i$, $i = 1, 2$.

Введем в рассмотрение операторные пространства: $End\ H$ — пространство линейных ограниченных операторов, действующих в H и $L_A(H)$ — пространство операторов, подчиненных оператору A, т.е. $B \in L_A(H)$, если существует такая константа $c > 0$, что $\|Bx\| \le c(\|x\| + \|Ax\|)$, $\forall x \in D(A)$ и $\|B\|_A = inf\ c$. Заметим, что $EndH \subset L_A(H)$. Далее оператор A считается невозмущенным оператором, а рассматриваемые возмущения этого оператора принадлежат так называемому пространству допустимых возмущений M, $M \in L_A(H)$, где M — банахово пространство со своей нормой, непрерывно вложенное в $L_A(H)$ и операторы $P_i X P_j$ принадлежат M для любого X из M, причем оператор $P_1 X P_1$ допускает расширение до ограниченного оператора и операторы $X \mapsto P_i X P_j : M \to M$ являются ограниченными операторами. Обозначим $M_{ij} = \{X \in M : P_i X P_j = X\}$.

Рассмотрим два трансформатора — оператор $J : M \to M$, определяемый формулой $JX = P_1 X P_1 + P_2 X P_2$, $X \in M$ и оператор $S \in End\ H$, однозначно определяемый равенствами $(A - \lambda_1 I)S = S(A - \lambda_1 I) = P_2$, $SP_1 = P_1 S = 0$. От-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 01-01-00408

метим, что если A — самосопряженный оператор, то оператор S также самосопряжен и $\|S\| = (dist(\{\lambda_1\}, \sigma(A) \setminus \{\lambda_1\}))^{-1}$.

Пусть оператор A возмущается оператором $B \in M$. Введем следующие обозначения: $B_{ij} = P_i B P_j$, $b_{ij} = \|P_i B P_j\|$, $s = \|S\|$, $b_1 = \|B_{21} e_1\|$. Норма оператора, если нет специальных оговорок, понимается в пространстве M. Символом $\tilde{b}_{22}$ обозначим норму оператора $X \mapsto B_{22} S X : M_{21} \to M_{21}$, а символом $\tilde{b}_{12}$ − норму оператора $X \mapsto B_{12} S X : M_{21} \to M_{11}$.

Теорема 1. Пусть возмущение B такое, что выполняется условие

$$\tilde{b}_{22} + b_{11} s + 2\sqrt{b_1 s \tilde{b}_{12}} < 1, \tag{1}$$

или , более грубое условие

$$s\left(b_{22} + b_{11} + 2\sqrt{b_1 b_{12}}\right) < 1. \tag{2}$$

Тогда соответствующие приближения к собственному вектору $\tilde{e}_1$ и собственному значению $\tilde{\lambda}_1$ оператора $A - B$ есть

$$\tilde{e}_1^{(1)} = e_1 + S B_{21} e_1, \tag{3}$$

$$\tilde{\lambda}_1^{(1)} = \lambda_1 - \left(Be_1, f_1\right) - \left(B_{12} S B_{21} e_1, f_1\right), \tag{4}$$

$$\tilde{e}_1^{(2)} = e_1 + S\left(B_{22} S B_{21} e_1\right) - B_{11} S\left(S B_{21} e_1\right) + S B_{21} e_1, \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1^{(2)} = \lambda_1 - \left(Be_1, f_1\right) - \left(B_{12} S B_{22} S B_{21} e_1, f_1\right) + \\ + B_{11}\left(B_{12} S\left(S B_{21} e_1, f_1\right) + \left(B_{12} S B_{21} e_1, f_1\right)\right) \end{aligned} \tag{6}$$

причем справедливы оценки

$$\left\|\tilde{e}_1^{(2)} - e_1\right\| \le \frac{2 s b_1}{1 - \tilde{b}_{22} - b_1 s}, \tag{7}$$

$$\left|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1 + \left(Be_1, f_1\right)\right| \le \tilde{b}_{12} \frac{2 b_1}{1 - \tilde{b}_{22} - b_1 s_{12}}, \tag{8}$$

$$\left\|\tilde{e}_1 - e_1 - S B_{21} e_1\right\| \le s \frac{2\left(\tilde{b}_{22} b_1 + b_{11} s b_1 + \tilde{b}_{12} b_1^2 s\right)}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11} s - 2\tilde{b}_{12} b_1 s}, \tag{9}$$

$$\begin{aligned} &\left|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1 + (Be_1, f_1) + (B_{12} S B_{21} e_1, f_1)\right| \le \\ &\le \tilde{b}_{12} \frac{2\left(\tilde{b}_{22} b_1 + b_{11} s b_1 + \tilde{b}_{12} b_1^2 s\right)}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11} s - 2\tilde{b}_{12} b_1 s}, \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} &\left\|\tilde{e}_1 - e_1 - S(B_{22} S B_{21} e_1) + B_{11} S(S B_{21} e_1) - S B_{21} e_1\right\| \le \\ &\le s \frac{2\left(\tilde{b}_{22}^2 b_{21} + 2\tilde{b}_{22} s b_1 b_{21} + b_{11}^2 s^2 b_{21}\right)}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11} s - 2 b_1 s \tilde{b}_{22}}, \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} &\left|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1 + \left(Be_1, f_1\right) + \left(B_{12} S B_{22} S B_{21} e_1, f_1\right) - \right. \\ &\left. - B_{11}\left(B_{12} S\left(S B_{21} e_1\right), f_1\right) - \left(B_{12} s B_{21} e_1, f_1\right)\right| \le \\ &\le \widetilde{b_{12}} \frac{2\left(\tilde{b}_{22}^2 b_{21} + 2\tilde{b}_{22} s b_1 b_{21} + b_{11}^2 s^2 b_{21}\right)}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11} s - 2 b_1 s \tilde{b}_{12}}. \end{aligned} \tag{12}$$

Доказательство. Легко показать [3], что вектор

$$\tilde{e}_1 = e_1 + S X_{21} e_1, \tag{13}$$

где вектор $X_{21} e_1$ есть решение нелинейного векторного уравнения

$$\begin{aligned} X_{21} e_1 = B_{22} S X_{21} e_1 - B_{11} S X_{21} e_1 - \\ - \left(B_{12} S X_{21} e_1, f_1\right) S X_{21} e_1 + B_{21} e_1, \end{aligned} \tag{14}$$

является собственным вектором возмущенного оператора $A - B$, отвечающим возмущенному собственному значению

$$\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1 - \left(Be_1, f_1\right) - \left(B_{12} S X_{21} e_1, f_1\right), \tag{15}$$

причем $(\tilde{e}_1, f_1) = 1$. Следовательно, имеют место оценки:

$$\left\|\tilde{e}_1 - e_1 - S(X_{21} e_1)^{(m)}\right\| \le s\left\|X_{21} e_1 - (X_{21} e_1)^{(m)}\right\|, \tag{16}$$

$$\begin{aligned} &\left|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1 + (Be_1, f_1) + (B_{12} S (X_{21} e_1)^{(m)}, f_1)\right| \le \\ &\le \tilde{b}_{12}\left\|X_{21} e_1 - (X_{21} e_1)^{(m)}\right\|, \end{aligned} \tag{17}$$

где $m = 0, 1, 2, \ldots, (X_{21} e_1)^{(m)}$ — m-ное приближение к решению уравнения (14) и $(X_{21} e_1)^0 = 0$.

В частности, при $m = 0$:

$$\left\|\tilde{e}_1 - e_1\right\| \le \left\|S X_{21} e_1\right\|,$$

$$\left|\tilde{l}_1 - \lambda_1 + (Be_1, f_1)\right| \le \left\|B_{12} S\right\| \left\|X_{21} e_1\right\|.$$

Таким образом, необходимо найти условие разрешимости векторного уравнения (14) и оценки на норму разности точного решения и m-ного приближения к нему. Для определения корней уравнения (14) применим принцип мажорантных уравнений [6]. Очевидно, что мажорантным для данного уравнения будет уравнение

$$\tilde{b}_{12} s t^2 + (\tilde{b}_{22} + b_{11} s - 1) t + b_1 = 0. \tag{18}$$

Следовательно, условие разрешимости уравнения (18) и, соответственно, уравнения (14) имеет вид

$$\tilde{b}_{22} + b_{11} s + 2\sqrt{b_1 s \tilde{b}_{22}} < 1. \tag{19}$$

Если учесть, что $\tilde{b}_{22} \le b_{22}s, \tilde{b}_{12} \le b_{12}s,$ то более грубое условие разрешимости

$$s(b_{22} + b_{11} + 2\sqrt{b_1 b_{12}}) < 1,$$

или, еще грубее,

$$\max_{i,j=1,2} sb_{y} < 0.25. \tag{20}$$

Заметим, что ухудшенный вариант условия типа (20) используется в работе М. Т. Найера [5] для оценки собственных значений и собственных векторов возмущенного оператора в случае ограниченного возмущения.

Из принципа мажорантных уравнений получаем

$$\|X_{21}e_1\| \le \frac{2b_1}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11}s + g} \le \frac{2b_1}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11}s} = \alpha,$$

где $g = \sqrt{(\tilde{b}_{22} - b_{11}s)^2 - 4sb_1\tilde{b}_{12}}$ и величина α имеет порядок малости b_{ij}. Таким образом, получаем оценки (7), (8).

Очевидно, что первым приближением к решению векторного уравнения (14) будет вектор $B_{21}e_1$ и следовательно, первым приближением к собственному вектору возмущенного оператора — вектор

$$\tilde{e}_1^{(1)} = e_1 + SB_{21}e_1,$$

соответствующим приближением к собственному значению — число

$$\tilde{\lambda}_1^{(1)} = \lambda_1 - (Be_1, f_1) - (B_{12}SB_{21}e_1, f_1).$$

Пусть $Z = X_{21}e_1 - B_{21}e_1$. Сделав замену переменной в уравнении (14), получим следующее уравнение для вектора Z, аналогичное уравнению (14):

$$\begin{gathered} Z = B_{22}SZ - B_{11}SZ - (B_{12}SZ, f_1)SZ - \\ -(B_{12}SZ, f_1)SB_{21}e_1 - (B_{12}SB_{21}e_1, f_1)SZ + \\ +B_{22}SB_{21}e_1 - B_{11}SB_{21}e_1 - (B_{12}SB_{21}e_1, f_1)SB_{21}e_1. \end{gathered}$$

Повторяя предыдущие рассуждения, имеем оценку

$$\|Z\| = \|X_{21}e_1 - B_{21}e_1\| \le \frac{2(\tilde{b}_{22}b_1 + b_{11}sb_1 + \tilde{b}_{12}b_1^2 s)}{1 - \tilde{b}_{22} - b_{11}s - 2\tilde{b}_{12}b_1 s} = \beta.$$

Отметим, что величина β имеет порядок малости $b_{ij}^2 s$, в отличии от величины α, и справедливость оценок (9), (10) очевидна.

Вторым приближением к решению уравнения (14) будет вектор

$$\begin{gathered} (X_{21}e_1)^{(2)} = B_{22}SB_{21}e_1 - B_{11}SB_{21}e_1 - \\ -(B_{12}SB_{21}e_1, f_1)SB_{21}e_1 + B_{21}e_1, \end{gathered} \tag{21}$$

соответствующим приближением к собственному вектору − вектор

$$\begin{gathered} \tilde{e}_1^{(2)} = e_1 + S(B_{22}SB_{21}e_1) - B_{11}S(SB_{21}e_1) - \\ -(B_{12}SB_{21}e_1, f_1)S(SB_{21}e_1) + SB_{21}e_1, \end{gathered} \tag{22}$$

к собственному значению − число

$$\begin{gathered} \tilde{\lambda}_1^{(2)} = \lambda_1 - (Be_1, f) - (B_{12}SB_{22}SB_{21}e_1, f_1) + \\ +B_{11}(B_{12}S(SB_{21}e_1, f_1)) + (B_{12}SB_{21}e_1, f) \times \\ \times(B_{12}S(SB_{21}e_1), f_1) + (B_{12}SB_{21}e_1, f_1). \end{gathered} \tag{23}$$

Заметим, что в формуле (23) пятое слагаемое имеет более высокий порядок малости, а в формуле (22) — четвертое, поэтому их можно опустить и

$$\tilde{e}_1^{(2)} = e_1 + S(B_{22}SB_{21}e_1) - B_{11}S(SB_{21}e_1) + SB_{21}e_1,$$

$$\begin{gathered} \tilde{\lambda}_1^{(2)} = \lambda_1 - (Be_1, f) - (B_{12}SB_{22}SB_{21}e_1, f_1) + \\ +B_{11}(B_{12}S(SB_{21}e_1, f_1)) + (B_{12}SB_{21}e_1, f_1). \end{gathered}$$

Введя замену переменной $Y = X_{21}e_1 - (X_{21}e_1)^{(2)}$, применяя к уравнению относительно Y принцип мажорантных уравнений и опуская слагаемые более высокого порядка малости, получаем

$$\begin{gathered} \left\|X_{21}e_1 - (X_{21}e_1)^{(2)}\right\| \le 2\left(\tilde{b}_{22}^{(2)}b_{21} + 2\tilde{b}_{22}b_1 sb_{21} + b_{11}^2 s^2 b_{21}\right)1 - \\ -\tilde{b}_{22}s - b_{11}s - 2\tilde{b}_{12}sb_1 = \gamma, \end{gathered}$$

где величина γ имеет порядок малости $s^2 b_{ij}^3$. Тогда

$$\|\tilde{e}_1 - e_1 - S(B_{22}SB_{21}e_1) + B_{11}S(SB_{21}e_1) - SB_{21}e_1\| \le s\gamma,$$

$$\begin{gathered} \Big|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1 + (Be_1, f_1) + (B_{12}SB_{22}SB_{21}e_1, f_1) - \\ -B_{11}(B_{12}S(SB_{21}e_1), f_1) - (B_{12}SB_{21}e_1, f_1)\Big| \le \tilde{b}_{12}\gamma. \end{gathered}$$

Теорема доказана.

Следствие 1. Пусть выполнены условия теоремы 1. Тогда третьим приближением к собственному вектору $\tilde{e}_1$ возмущенного оператора $A - B$ и к собственному значению $\tilde{\lambda}_1$ есть $\tilde{e}_1^{(3)} = e_1 + SW, \tilde{l}_1^{(3)} = \lambda_1 - (Be_1, f_1) - (B_{12}SW, f_1)$, где W с точностью до величин более высокого порядка малости определяется формулой

$$\begin{gathered} W = B_{22}S(B_{22}SB_{21}e_1) - B_{22}S(B_{11}SB_{21}e_1) + \\ +B_{22}SB_{21}e_1 + B_{11}^2 S(SB_{21}e_1) - B_{11}SB_{22}SB_{21}e_1 - \\ -B_{11}SB_{21}e_1 - ((B_{12}SB_{21}e_1, f_1)SB_{21}e_1) + B_{21}e_1 \end{gathered}$$

причем

$$\left\|\tilde{e}_1 - \tilde{e}_1^{(3)}\right\| \le O(s^3 b_{ij}^3), \left|\tilde{\lambda}_1 - \tilde{\lambda}_1^{(3)}\right| \le O(s^3 b_{ij}^4).$$

Замечание. Оценки типа (9), (10) получаются и в этом случае аналогично предыдущим, но их мы не приводим ввиду их громоздкости, оставляя только порядок малости.

Следствие 2. Пусть ограниченное возмущение B такое, что выполнено условие

$$(b_{22} + b_{11})s + 2\sqrt{s b_{12} \bar{b}_1} < 1,$$

где $\bar{b}_1 = \|SB_{21}e_1\|$, тогда справедливы оценки

$$\|\tilde{e}_1 - e_1\| \le \frac{2\bar{b}_1}{1 - s(b_{22} + b_{11})},$$

$$|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1| \le b_{12}\frac{2\bar{b}_1}{1 - s(b_{22} + b_{11})},$$

$$\left\|\tilde{e}_1 - \tilde{e}_1^{(1)}\right\| \le \frac{2\left(b_{22}s\bar{b}_1 + b_{11}s\bar{b}_1 + b_{12}\bar{b}_1^2\right)}{1 - sb_{22} - sb_{11} - 2b_{12}\bar{b}_1 s},$$

$$\left|\tilde{\lambda}_1 - \tilde{\lambda}_1^{(1)}\right| \le b_{12}\frac{2(b_{22}s\bar{b}_1 + b_{11}s\bar{b}_1 + b_{12}\bar{b}_1^2)}{1 - sb_{22} - sb_{11} - 2b_{12}\bar{b}_1 s},$$

$$\left\|\tilde{e}_1 - \tilde{e}_1^{(2)}\right\| \le 2\frac{(b_{22}s^2\bar{b}_1 + b_{11}s^2\bar{b}_1 b_{22} + s^2 b_{11}^2\bar{b}_1^2)}{1 - sb_{22} - sb_{11} - 2b_{12}\bar{b}s},$$

$$\left|\tilde{\lambda}_1 - \tilde{\lambda}_1^{(2)}\right| \le b_{12}\frac{2(b_{22}s^2\bar{b}_1 + b_{11}s^2\bar{b}_1 b_{22} + s^2 b_{11}^2\bar{b}_1^2)}{1 - sb_{22} - sb_{11} - 2b_{12}\bar{b}_1 s}.$$

Доказательство. Применим к обеим частям уравнения (14) оператор S и получим нелинейное уравнение относительно вектора $SX_{21}e_1$:

$$\begin{aligned} SX_{21}e_1 &= S(B_{22}SX_{21}e_1) - B_{11}S(SX_{21}e_1) - \\ &-(B_{12}SX_{21}e_1, f_1)S(SX_{21}e_1) + SB_{21}e_1, \end{aligned} \tag{24}$$

теперь в точности повторяем все рассуждения теоремы 1, но вместо уравнения (14) рассматриваем уравнение (24).

Замечание. В зависимости от характера возмущения B иногда предпочтительнее применение теоремы 1, а иногда — следствия 2.

Следствие 3. Собственный вектор $\tilde{e}_1$ и собственное значение $\tilde{\lambda}_1$ могут быть получены как предел итерационного процесса:

$$\tilde{e}_1 = \lim_{n\to\infty}\tilde{e}_1^{(n)},\ \tilde{\lambda}_1 = \lim_{n\to\infty}\tilde{\lambda}_1^{(n)},$$

$$y^{(n)} = B_{22}Sy^{(n-1)} - B_{11}Sy^{(n-1)} -$$

$$-(B_{12}Sy^{(n-1)}, f_1)Sy^{(n-1)} + B_{21}e_1, n = 1, 2, \ldots$$

$$y^{(0)} = 0,$$

$$\tilde{e}_1^{(n)} = e_1 + Sy^{(n)},$$

$$\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1 - (Be_1, f_1) - (B_{12}Sy^{(n)}, f_1),$$

$$Sy^{(n-1)} = (A - \lambda_1 I)\big|_{H_2}^{-1} \cdot y^{(n-1)}.$$

Замечание. Подобная итерационная последовательность предложена в работе М. Т. Найера [5].

Следствие 4. Пусть A — оператор с дискретным спектром, собственные значения которого различны, а соответствующие собственные векторы образуют базис в пространстве H. Тогда при выполнении условия (19)

$$\tilde{e}_1 = e_1 + \sum_{k\ne 1}\frac{b_{k1}}{\lambda_k - \lambda_1}e_k, \tag{25}$$

$$\tilde{\lambda}_1^{(1)} = \lambda_1 - b_{11} - \sum_{k\ne 1}\frac{b_{1k}b_{k1}}{\lambda_k - \lambda_1}, \tag{26}$$

$$\begin{aligned} \tilde{e}_1^{(2)} &= e_1 + \sum_{l\ne 1}\sum_{k\ne 1}\frac{b_{lk}b_{k1}}{(\lambda_l - \lambda_1)(\lambda_k - \lambda_1)}e_1 - \\ &-b_{11}\sum_{l\ne 1}\frac{b_{l1}}{(\lambda_l - \lambda_1)^2}e_1 + \sum_{l\ne 1}\sum_{k\ne 1}\frac{b_{1k}b_{k1}b_{l1}}{(\lambda_l - \lambda_1)^2(\lambda_k - \lambda_1)^2}e_1 + \\ &+\sum_{l\ne 1}\frac{b_{l1}}{\lambda_l - \lambda_1}e_1, \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1^{(2)} &= \lambda_1 - b_{11} - \sum_{l\ne 1}\sum_{k\ne 1}\frac{b_{1l}b_{lk}b_{k1}}{(\lambda_l - \lambda_1)(\lambda_k - \lambda_1)} + \\ &+b_{11}\sum_{l\ne 1}\frac{b_{l1}b_{1l}}{(\lambda_l - \lambda_1)^2} - \sum_{l\ne 1}\frac{b_{1l}b_{l1}}{(\lambda_l - \lambda_1)} + \\ &+\sum_{l\ne 1}\sum_{k\ne 1}\frac{b_{lk}b_{k1}b_{l1}b_{1l}}{(\lambda_k - \lambda_1)(\lambda_l - \lambda_1)^2}, \end{aligned} \tag{28}$$

Доказательство. Легко проверить, что вектор $SX_{21}e_1$ в базисе из собственных векторов оператора A имеет координаты $SX_{21}e_1 = \left(0, \frac{x_{i1}}{\lambda_i - \lambda_1}\right)^T$, $i = 2, 3, \ldots$. Осталось расписать формулы для приближений $\tilde{e}_1^{(i)}, \tilde{\lambda}_1^{(i)}, i = 1, 2$ в координатной форме.

Замечание. Формулы (25)—(28) приведены в [1,2] причем условие применимости в [1] имеет вид $|b_{ij}| \ll |\lambda_i - \lambda_j|$. Очевидно, что условие (7) дает более качественную информацию о возмущении, чем приведенная выше оценка.

Пример. Рассмотрим линейный осциллятор, т. е. частицу, совершающую одномерные малые колебания. Гамильтонианом осцилятора является [1, С. 90] оператор $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, где $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ — потенциальная энергия частицы, p — оператор импульса, ω — собственная частота колебаний. Область определения оператора H_0 состоит из однозначных, непрерывных на R функций, равных нулю при $x \to \pm\infty$ и имеющих непрерывные производные. Собственными значениями (энергетическим спектром) оператора H_0 будут числа $\lambda_n = (n + 0.5)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, \ldots$, где $\hbar$ — постоянная Планка, собственными векторами (волновыми функциями) — функции $\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{14} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$, $\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{14} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \times H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right), n = 1, 2, \ldots$, где $H_n(\xi)$ — полиномы Эрмита, определяемые формулой $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{\xi^2}}{d\xi^n}$. Рассмотрим возмущенный Гамильтониан $H = H_0 - B$ (ангармонический линейный осциллятор). При выполнении условия (19) или (20) на возмущение B для собственных векторов и собственных значений оператора H справедливы приближения (24)—(27), причем имеют место оценки (7)—(12), где $s = \frac{1}{\hbar\omega}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2001. 804 с.

2. Функциональный анализ. Под общей ред. С.Г. Крейна. М.: Наука, 1972. 544 с.

3. *Баскаков А.Г* // Изв. АН СССР. Сер. матем. 1986. Т. 50, № 3. С. 435—458.

4. *Баскаков А.Г* // Изв. РАН. Сер. матем. 1994. Т. 24, № 4. С. 3—32.

5. *Nair M.T.* // Proc. Amer. Mathem. Soc. 1995. № 123. P. 1845—1851.

6. *Канторович Л.В., Акилов Г.П.* Функциональный анализ. М.: Наука, 1977.