Физика низких температур, 1997, т. 23, № 1, с. 79–91

# Принципы теории конечномерных возмущений

И. В. Красовский

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины*
*Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47*
E-mail: ivk@igorvk.kharkov.ua

В. И. Пересада

*Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4*

Статья поступила в редакцию 17 июня 1996 г., после переработки 26 июля 1996 г.

Приведен обзор теории конечномерных возмущений самосопряженных операторов, ориентированной на решение физических задач. Особое внимание уделяется случаю операторов специального вида, допускающему эффективное использование аппарата якобиевых матриц. Получены соотношения для спектральной плотности периодической якобиевой матрицы.

Наведено огляд теорії кінцевовимірних збурень самосопряжених операторів, орієнтованої на розв'язання фізичних задач. Особлива увага приділяється випадку операторів спеціального вигляду, який дозволяє ефективно застосувати апарат якобієвих матриць. Одержано співвідношення для спектральної густини періодичної якобієвої матриці.

PACS: 02.30.Tb,61.72.Bb

## 1. Введение

Как известно, большое число задач теории элементарных возбуждений твердых тел может быть сведено к следующей: в сепарабельном гильбертовом пространстве $G$ даны самосопряженные операторы $H$ и $H_0$, такие, что $H = H_0 + V$, где $V$ — конечномерное (локальное, вырожденное) возмущение. Конечномерность оператора $V$ означает, что можно указать такой ортонормированный базис $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$ пространства $G$, что для некоторого числа $r$ выполняется условие $Ve_i = 0$ для всех $i \geq r$. При этом спектральные характеристики (спектр, собственные векторы, спектральные функции) оператора $H_0$ известны. Задача теории конечномерных возмущений состоит в том, чтобы найти спектральные характеристики оператора $H$, а также величины $\mathrm{Sp}\,\{f(H) - f(H_0)\}$, которые представляют собой изменения термодинамических функций, обусловленные возмущением $V$. Поскольку $V$ не обязательно малое, теория малых возмущений, основанная на разложении по степеням $V$, здесь не применима.

При определенных предположениях о моделях к вышеупомянутым физическим задачам относится нахождение влияния точечного дефекта на спектр, собственные функции и термодинамику кристалла [1–20]*; сюда же относится ряд задач о линейном и плоском дефектах кристалла [3]; менее очевидно, что к этому классу задач относятся такие, как нахождение термодинамических функций твердого раствора [1,21,22], вычисление функции распределения квадратов частот колебаний идеальной решетки [24]. Конечно, приведенный список далеко не исчерпывает возможные приложения теории конечномерных возмущений. Основы этой теории были разработаны И. М. Лифшицем в статьях [25–29], в которых не делалось предположений о каких-либо специальных свойствах операторов $H$ и $H_0$. Как будет видно ниже, дальнейшее развитие теории стало возможным в рамках метода якобиевых матриц [11–13,19,20,24,30–35] при учете специального вида матрицы оператора $H$.

* Работы [1,3,7,8,21,22,25–28] содержатся в [23].

© И. В. Красовский, В. И. Пересада, 1997

Цель настоящей работы — дать обзор теории конечномерных возмущений и познакомить читателя с некоторыми новыми результатами в этой области.

## 2. Теория в общем случае

Содержание этой главы основано на работах И. М. Лифшица [25–29] и М. Г. Крейна [36].

### *2.1. Операторы с дискретным спектром*

Предположим для начала, что действующий в $N$-мерном пространстве ($N$ — конечное число либо $N = \infty$) оператор $H_0$ имеет только дискретный спектр $\{\lambda_i\}_{i=0}^{N-1}$ (соответствующие нормированные собственные векторы $\{\psi_i\}_{i=0}^{N-1}$). Рассмотрим уравнение для собственных векторов оператора $H = H_0 + V$:

$$\left(H_0 + V - zI\right)\phi = 0$$

или

$$\phi = -R(z)V\phi\,, \quad R(z) = \left(H_0 - zI\right)^{-1}. \qquad (1)$$

Поскольку $Ve_i = 0$, $i \geq r$, условие разрешимости системы (1) $\det(I + RV) = 0$ имеет особенно простой вид, когда матрица $I + RV$ и вектор $\phi$ представлены в базисе $\{e_i\}_{i=0}^{N-1}$, а именно:

$$\Delta(z) \equiv \det\left(I + R(z)V\right) = \left|\delta_{lj} + \left(R(z)Ve_j\,,\, e_l\right)\right|_0^{r-1} = 0\,, \qquad (2)$$

$$\left(R(z)Ve_j\,,\, e_l\right) = \sum_i \sum_{k=0}^{r-1} \frac{(e_k\,,\, \psi_i)(\psi_i\,,\, e_l)}{\lambda_i - z} V_{kj}\,, \qquad V_{kj} = \left(Ve_j\,,\, e_k\right). \qquad (3)$$

Решения $z_q$ уравнения (2) — собственные числа оператора $H$. Соответствующие им собственные векторы имеют, как следует из уравнения (1), представленного в базисе $\{e_i\}_{i=0}^{N-1}$, вид

$$\phi_q = -\sum_i \sum_{j=0}^{r-1} a_j \sum_{k=0}^{r-1} \frac{(e_k\,,\, \psi_i)}{\lambda_i - z_q} V_{kj}\psi_i\,, \qquad (4)$$

где $a_j$ — решения системы уравнений

$$\sum_{j=0}^{r-1} \left(I + R(z_q)V\right)_{lj} a_j = 0\,, \quad l = 0, \ldots, r-1.$$

Заметим, что уравнения (2) и (4) можно упростить, если известны ненулевые собственные числа и соответствующие им нормированные собственные векторы $\{\eta_i\}_{i=0}^{r_0-1}$ оператора $V$. Тогда можно положить $e_i = \eta_i$ ($i = 0, \ldots, r_0 - 1$), и в этом случае $V_{kj} = V_{kk}\delta_{kj}$. Кроме того, очевидно, что в таком случае число $r$ минимально (оно равно рангу $r_0$ оператора $V$).

Если все собственные числа $\lambda_i$ простые, то мероморфную функцию $\Delta(z)$ можно разложить на простейшие дроби и уравнение (2) принимает вид

$$1 + \sum_i \frac{c_i}{\lambda_i - z} = 0\,. \qquad (5)$$

Как показано в [26], коэффициенты $c_i$ определяются следующим образом:

$$c_i = V(i) + \sum_{i_0 \neq i} \frac{V(i, i_0)}{\lambda_{i_0} - \lambda_i} + \ldots + \frac{1}{(r-1)!} \sum_{i_0 \neq i, \ldots, i_{r-2} \neq i} \frac{V(i, i_0, \ldots, i_{r-2})}{(\lambda_{i_0} - \lambda_i)\ldots(\lambda_{i_{r-2}} - \lambda_i)}\,,$$

$$V(i_1\,,\, \ldots,\, i_n) = \begin{vmatrix} V_{i_1 i_1} & \cdots & V_{i_1 i_n} \\ \vdots & & \vdots \\ V_{i_n i_1} & \cdots & V_{i_n i_n} \end{vmatrix}, \text{ здесь } V_{ik} = (V\psi_k\,,\, \psi_i)\,.$$

Уравнение (5) можно использовать для качественного анализа сдвигов уровней энергии под действием возмущения [26]. Однако проще использовать теорему Куранта–Фишера. Следующее утверждение есть простое следствие этой теоремы [37,38]:

**Лемма 1.** Пусть а) собственные значения оператора $H_0$ упорядочены таким образом: $\lambda_0 \geq \lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_{N-1}$;

б) ранг матрицы $V$ равен $r_0$, число ее отрицательных и положительных собственных значений $n$ и $p = r_0 - n$ соответственно;

в) $z_0 \geq z_1 \geq \ldots \geq z_{N-1}$ — собственные значения оператора $H$.

Тогда в интервале $(\lambda_{s+1}, \lambda_s)$ имеется не более $r_0$ собственных значений $z_i$; в интервале $(-\infty, \lambda_{N-1})$ — не более $n$; в интервале $(\lambda_0, \infty)$ — не более $p$. Кроме того, $\lambda_{i-p} \geq z_i \geq \lambda_{i+n}$ (здесь формально положено $\lambda_j = \infty$ при $j < 0$, и $\lambda_j = -\infty$ при $j > N-1$). В частности, если некоторый уровень $\lambda_m$ $x$-кратно вырожден и $x > r_0$, то $\lambda_m$ также является собственным числом оператора $H = H_0 + V$ кратности не ниже $x - r_0$.

Принимая во внимание непрерывность зависимости собственных чисел и векторов оператора $H$ от собственных чисел оператора $H_0$ и вводя произвольно малые добавки к числам $\lambda_i$, уравнения (2) и (4) можно использовать и когда собственное число $z$ оператора $H$ совпадает с $\lambda_m$ для некоторого $m$. Однако полезно получить явную формулу для этого случая. Уравнение $(H_0 - zI)\phi = -V\phi$ перепишем в виде

$$\left(H_0 - zI\right)\phi' = -V\phi\,, \qquad (6)$$

где $\phi = \phi' + \eta_m$, а $\eta_m$ есть ортогональная проекция вектора $\phi$ на собственное пространство $G_m$ оператора $H_0$, соответствующее собственному числу $z = \lambda_m$. Уравнение (6) справедливо, так как, по определению, $(H_0 - zI)\eta_m = 0$. Таким образом, $(H_0 - zI)$ в уравнении (6) можно рассматривать на ортогональном дополнении к $G_m$, где резольвента $R(z) = (H_0 - zI)^{-1}$ корректно определена. Делая из (6) вывод, аналогичный выводу формул (2) и (4) из (1), получаем

$$\phi = \eta_m - \sum_{i \neq m} \sum_{j=0}^{r-1} a_j \sum_{k=0}^{r-1} \frac{(e_k, \psi_i)}{\lambda_i - \lambda_m} V_{kj} \psi_i\,, \qquad (7)$$

где $a_j$ — решения системы уравнений

$$a_l + \sum_{j=0}^{r-1} a_j \sum_{i \neq m} \sum_{k=0}^{r-1} \frac{(e_k, \psi_i)(\psi_i, e_l)}{\lambda_i - \lambda_m} V_{kj} = (\eta_m, e_l)\,,$$
$$l = 0, \ldots, r-1\,. \qquad (8)$$

В лемме 1, в частности, утверждается, что если спектр оператора $H$ содержится в некотором интервале, то $H$ может иметь не более $r_0$ собственных значений вне этого интервала. Верхнюю и нижнюю границы для этих собственных значений удобно получить, пользуясь теоремой Гершгорина (см., например, [37]), сформулированной для случая эрмитовой матрицы: каждое из собственных значений $N \times N$ матрицы $H$ лежит по крайней мере в одном из интервалов

$$|H_{ii} - z| \leq \sum_{k(k \neq i)} |H_{ik}|\,, \quad i = 0, \ldots, N-1\,,$$

где $H_{ik}$ — матричные элементы $H$ в произвольном базисе, а суммирование идет по всем элементам $i$-й строки, исключая $H_{ii}$.

### 2.2. *Операторы с дискретным и непрерывным спектром*

*Предельный переход к непрерывному спектру. Функция сдвига.* Во многих физических моделях систем большого числа частиц $M$ часть собственных значений гамильтониана «конденсируется» в один или несколько интервалов непрерывного спектра при $M \to \infty$. (Оставшиеся «изолированные» собственные значения составляют дискретный спектр.) Поэтому важно обобщить вышеприведенные формулы на случай, когда часть собственных значений $\lambda_i$ «сгущается» в непрерывный спектр. Следуя работе Лифшица [27], введем совокупность самосопряженных операторов $H_\alpha$, обладающих только дискретным спектром и зависящих от параметра $\alpha$; пусть $\lambda_p^{(\alpha)}$ — их собственные значения $(\lambda_0^{(\alpha)} \geq \lambda_1^{(\alpha)} \geq \ldots \geq \lambda_{N-1}^{(\alpha)})$, а $\psi_p^{(\alpha)}(x)$ — нормированные собственные функции, зависящие от аргумента $x$. Положим, по определению, что для части спектра оператора $H_\alpha$ (эта часть называется квазинепрерывным спектром) выполняются следующие условия.

1. Существует такая не зависящая от $\alpha$ кусочно-непрерывная функция $\lambda(u)$ с кусочно-непрерывной производной, что

$$\lambda_p^{(\alpha)} \equiv \lambda^{(\alpha)}(u_p) = \lambda(u_p) + O(\alpha)\,, \quad u_p = p\alpha\,,$$

$$\lambda_p^{(\alpha)} - \lambda_{p-1}^{(\alpha)} = \alpha\left[\left.\frac{d\lambda}{du}\right|_{u=u_p} + O(\alpha)\right].$$

2. Существует такое множество функций $\chi_u(x)$, что в некоторой области изменения аргумента $x$

$$\chi_p^{(\alpha)}(x) = \chi_{u_p}(x) + O(\alpha)\,, \quad \chi_p^{(\alpha)} = \psi_p^{(\alpha)} / \sqrt{\alpha}\,,$$

$$\chi_p^{(\alpha)} - \chi_{p-1}^{(\alpha)} = \alpha\left[\left.\frac{\partial \chi_u}{\partial u}\right|_{u=u_p} + O(\alpha)\right].$$

В пределе $\alpha \to 0$ квазинепрерывный спектр переходит в непрерывный. Для систем многих частиц $\alpha \sim 1/M$.

Для того чтобы обобщить теорию в разд. 2.1 на случай операторов с непрерывным спектром, применим ее к оператору $H_\alpha = H_{0\alpha} + V$ и затем перейдем к пределу $\alpha \to 0$.

Поскольку возмущение $V$ конечномерно, из леммы 1 следует, что непрерывный спектр предельного оператора $H = H_0 + V = H_{\alpha\to 0}$ совпадает с непрерывным спектром невозмущенного предельного оператора $H_0 = H_{0,\alpha\to 0}$. При этом от одного интервала непрерывного спектра «под действием» $V$ может «отщепиться» не более $r_0$ дискретных собственных значений.

Теперь можно записать формулы (2)–(4) для $H_\alpha$ и сделать предельный переход $\alpha \to 0$. Этот переход затронет только суммы по $i$. Для формул (7) и (8) предел очевиден: например,

$$\sum_{i\neq m} \frac{(e_k, \psi_i)}{\lambda_i - \lambda_m}\psi_i$$

заменяется на

$$\int \frac{(e_k, \chi_u)}{\lambda(u) - \lambda_m}\chi_u du + \sum_{i\neq m}\frac{(e_k, \psi_i)}{\lambda_i - \lambda_m}\psi_i ,$$

где сумма берется по дискретному спектру оператора $H_{\alpha\to 0}$, а интеграл по непрерывному, причем в смысле главного значения Коши, если $\lambda_m$ принадлежит непрерывному спектру $H_{\alpha\to 0}$. Аналогично, если $z$ принадлежит дискретному спектру предельного оператора $H_{\alpha\to 0}$, обобщаются формулы (3) и (4): суммы по $i$ заменяются интегралами по непрерывному спектру плюс суммы по дискретному. Чтобы сделать предельный переход в (3) и (4), когда $z$ принадлежит непрерывному спектру, введем функцию сдвига $\xi(\lambda)$ на непрерывном спектре оператора $H_{\alpha\to 0}$ по формулам *

$$z_p^{(\alpha)} \equiv z^{(\alpha)}(u_p) = \lambda^{(\alpha)}(u_p) + \alpha \frac{d\lambda}{du}\Big|_{u=u_p} \xi^{(\alpha)}\left(\lambda(u_p)\right),$$
$$\xi^{(\alpha)}\left(\lambda(u_p)\right) = \xi\left(\lambda(u_p)\right) + O(\alpha), \qquad (9)$$

при условии, что $d\lambda/du \neq 0$. Здесь $z_p^{(\alpha)}$ — собственные значения оператора $H_\alpha (z_0^{(\alpha)} \geq z_1^{(\alpha)} \geq \ldots \geq z_{N-1}^{(\alpha)})$.

Как показал Лифшиц, для суммы по квазинепрерывному спектру имеет место соотношение

$$\sum_p \frac{\alpha f(u_p)}{\lambda_p - z_q} = \int' \frac{f(u)du}{\lambda(u) - \lambda(u_q)} - \frac{\pi f(u_q)}{\frac{d\lambda}{du}\Big|_{u=u_q}} \operatorname{ctg}\pi\xi\left(\lambda(u_q)\right) + O(\alpha), \qquad (10)$$

где штрих означает, что интеграл берется в смысле главного значения Коши.

Поскольку в случае простого спектра справедлива формула (5) (для простоты предположим, что $H$ имеет только непрерывный спектр), получаем

$$\operatorname{tg}\pi\xi\left(\lambda(u)\right) = \frac{\pi c(u)}{\frac{d\lambda}{du}\left(1 + \int' \frac{c(v)dv}{\lambda(v) - \lambda(u)}\right)},$$

$$c(u) = V(u) + \int' \frac{V(u, u_0)du_0}{\lambda(u_0) - \lambda(u)} + \ldots + \frac{1}{(r-1)!}\int' \ldots \int' \frac{V(u, u_0, \ldots, u_{r-2})du_0 \ldots du_{r-2}}{(\lambda(u_0) - \lambda(u)) \ldots (\lambda(u_{r-2}) - \lambda(u))},$$

$$V(u_1, \ldots, u_n) = |V_{u_i u_k}|_1^n, \quad V_{u_i u_k} = \left(V\chi_{u_k}, \chi_{u_i}\right).$$

Подставляя (10) в (4), получаем формулы для собственных векторов простого квазинепрерывного спектра, выраженные через функцию сдвига. Некоторые дальнейшие соотношения для собственных векторов приведены в [27,28].

* Ограничимся случаем, когда спектр оператора $H_\alpha$ прост.

Основное значение функции сдвига состоит в том, что через нее выражаются изменения термодинамических функций ($\mathrm{Sp}\,\{f(H_0 + V) - f(H_0)\}$), обусловленные возмущением $V$ [29]. В самом деле,

$$\mathrm{Sp}\left\{f(H_{0\alpha} + V) - f(H_{0\alpha})\right\} = \sum_k \left\{f(z_k^{(\alpha)}) - f(\lambda_k^{(\alpha)})\right\} =$$

$$= \sum_k \left\{f\left(\lambda_k^{(\alpha)} + \xi(\lambda(u_k))(\lambda_k^{(\alpha)} - \lambda_{k-1}^{(\alpha)}) + o(\alpha)\right) - f(\lambda_k^{(\alpha)})\right\} + S =$$

$$= \sum_k \left\{\left.\frac{df}{d\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_k^{(\alpha)}} \xi(\lambda(u_k))\left(\lambda_k^{(\alpha)} - \lambda_{k-1}^{(\alpha)}\right) + o(\alpha)\right\} + S\,,$$

где $S$ — сумма по тем индексам $k$, при которых $z_k^{(\alpha)}$ либо $\lambda_k^{(\alpha)}$ не принадлежат квазинепрерывному спектру.

В пределе $\alpha \to 0$ имеем

$$\mathrm{Sp}\left\{f(H_0 + V) - f(H_0)\right\} = \int \frac{df}{d\lambda}\,\xi(\lambda)d\lambda + \sum_i \left(f(z_i) - f(\lambda_i)\right)\,, \qquad (11)$$

где интеграл берется по непрерывному спектру; $z_i$ — дискретное собственное число оператора $H$, а $\lambda_i$ — дискретное собственное число $H_0$ либо граница непрерывного спектра. Числа $z_i$, $\lambda_i$ определяются из условия, что $z_i^{(\alpha)}$, $\lambda_i^{(\alpha)}$, $i = 0, \ldots, N-1$ упорядочены по убыванию. Впрочем, сумму в (11) таким образом вычислять не обязательно (см. замечание после формулы (19)).

*Вычисление плотности состояний и спектральных функций гамильтониана.* Плотность состояний $\eta(\lambda)$ в непрерывном спектре оператора $H$ может быть определена следующим образом:

$$\eta(\lambda) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} \widetilde{\rho}_{ii}(\lambda)\,,\quad \widetilde{\rho}_{ij}(\lambda) = \frac{(dE_\lambda e_j\, e_i)}{d\lambda}\,, \qquad (12)$$

где $E_\lambda$ — разложение единицы оператора

$$H = \int \lambda dE_\lambda\,;$$

$\widetilde{\rho}_{ij}$ — спектральная функция, соответствующая векторам $e_i$ и $e_j$.

Рассмотрим кристаллическую решетку с достаточно малой концентрацией одинаковых локальных дефектов, так что их можно считать независимыми. Пусть гамильтониан $H_0$ описывает идеальную решетку, а гамильтониан $H = H_0 + V$ — решетку с *единственным* дефектом.

Найдем плотность состояний $\eta(\lambda)$ в решетке с дефектами. Подставив в формулу (11) вместо $f(\lambda)$ функцию

$$\theta_x(\lambda) = \begin{cases} 0, & \lambda > x\,, \\ 1, & \lambda \le x\,. \end{cases}$$

где $x$ — вещественное число из непрерывного спектра, Лифшиц установил [29], что

$$\mathrm{Sp}\left(E_x - E_x^0\right) = -\xi(x)\,, \qquad (13)$$

где $E_x^0$ и $E_x$ — разложения единицы операторов $H_0$ и $H$ соответственно. Предполагая, что $c$ — концентрация дефектов, получаем из (13)

$$\eta(x) = \eta_0(x) - c\xi'(x)\,, \qquad (14)$$

где $\eta(x)$ и $\eta_0(x)$ — плотности состояний в решетке с дефектами и в идеальной решетке соответственно.

Иногда в таких задачах, как например в задаче о нахождении рамановского спектра [39], важно знать спектральные функции $\widetilde{\rho}_{ij}(\lambda)$ оператора $H$. Поскольку

$$\widetilde{R}_{ml}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\widetilde{\rho}_{ml}(\lambda)d\lambda}{\lambda - z}\,,$$

где $\widetilde{R}(z) = (H - zI)^{-1}$, как известно [40], почти всюду на вещественной оси

$$\widetilde{\rho}_{ml}(x) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\lim_{y\downarrow 0} \widetilde{R}_{ml}(x + iy)\,. \qquad (15)$$

Для определения матричных элементов $\widetilde{R}_{ml}(z)$ воспользуемся уравнением Дайсона $\widetilde{R} = R - RV\widetilde{R}$, которое легко проверить, умножив его справа на $H - zI$. Из уравнения Дайсона получим соотношение

$$\widetilde{R} = (I + RV)^{-1}R = R - RV(I + RV)^{-1}R\,, \qquad (16)$$

откуда находятся величины $\widetilde{R}_{ml}(z)$.

*Вычисление функций сдвига.* Как показал Крейн [36], $\xi(\lambda)$ с точностью до значений на множестве меры нуль однозначно определяется по $H_0$ и $V$ формулой (11). При этом спектры операторов $H_0$ и $H$ не обязательно должны быть простыми. Поэтому формулу (11) можно рассматривать как более общее, чем (9), определение функции $\xi(\lambda)$. (Формулы (13), (14), очевидно, остаются справедливыми.) Подставив в (11) функцию $f(\lambda) = 1/(\lambda - z)$ и вычислив $\mathrm{Sp}\,\{\widetilde{R}(z) - R(z)\}$, Крейн установил, что

$$\xi(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{y \downarrow 0} \arg \Delta(x + iy)\,, \qquad (17)$$

где $x$ и $y$ — вещественные числа, а $\Delta(z)$ определяется, как в формуле (2):

$$\Delta(z) = \left| \delta_{lj} + \left( R(z) V e_j\,,\, e_l \right) \right|_0^{r-1}. \qquad (18)$$

Кроме того, если $\tau_i$ $(i = 1, \ldots, r_0)$ — собственные числа оператора $V$, из них $p$ положительных и $n = r_0 - p$ отрицательных, то

$$-n \le \xi(x) \le p\,. \qquad (19)$$

(Заметим, что формулы (17), (19) остаются справедливыми, если расширить область определения функции сдвига на все множество вещественных чисел, положив

$$\mathrm{Sp}\,\{f(H_0 + V) - f(H_0)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{d\lambda}\, \xi(\lambda) d\lambda\,.$$

При этом $\int_{-\infty}^{\infty} |\xi(\lambda)|\, d\lambda \le \sum_{i=1}^{r_0} |\tau_i|$ .)

Ветвь аргумента в (17) легко установить, подставляя $\xi(\lambda)$ в (11), где в качестве $f(\lambda)$ выбрана некоторая пробная функция. Например, для $f(\lambda) = \lambda$

$$\mathrm{Sp}\, V = \int \xi(\lambda) d\lambda + \sum_i (z_i - \lambda_i)\,. \qquad (20)$$

## 3. Теория в случае блочно-трехдиагональных и трехдиагональных матриц

### *3. 1. Метод якобиевых матриц*

Дальнейшее развитие и применение теория конечномерных возмущений получила в рамках метода якобиевых матриц [30] (см. также [11–13,19, 20,24,31–35]). В этом методе рассматриваются матрицы, имеющие специальный вид, что позволяет получить более простые формулы для $\Delta(z)$ и матричных элементов резольвенты $R(z)$, чем приведенные в предыдущем разделе.

Метод состоит в сведении задачи к рассмотрению совокупности трехдиагональных матриц (якобиевых или $J$-матриц) вида

$$J = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & & 0 \\ b_0 & a_1 & b_1 & \\ & b_1 & a_2 & b_2 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \qquad (21)$$

$$b_i \ne 0,\ i = 0, 1, \ldots$$

с вещественными матричными элементами, что позволяет использовать хорошо развитую теорию $J$-матриц и тесно связанную с ней теорию ортогональных многочленов.

Для дальнейшего понадобятся некоторые простейшие сведения из теории якобиевых матриц (см., например, [41]).

Полиномы 1-го и 2-го рода ($p_i^J(z)$ и $q_i^J(z)$ соответственно), связанные с якобиевой матрицей $J$ вида (21), определяются следующим образом:

$$p_{-1}^J = 0;\ p_0^J = 1;$$

$$p_{i+1}^J = -b_i^{-1}\left( (a_i - z) p_i^J + b_{i-1} p_{i-1}^J \right),\ i = 0, 1, \ldots \qquad (22)$$

$$q_0^J = 0;\ q_1^J = b_0^{-1}\,;$$

$$q_{i+1}^J = -b_i^{-1}\left( (a_i - z) q_i^J + b_{i-1} q_{i-1}^J \right),\ i = 1, 2, \ldots$$

Спектр усеченной $n \times n$ якобиевой матрицы $J^{(n)}$ (т.е. $J_{ik}^{(n)} = \delta_{ik} a_i + \delta_{i+1,k} b_i + \delta_{i-1,k} b_k$, $i, k = 0, 1, \ldots, n-1$) совпадает с корнями $\{z_k^{(n)}\}_{k=1}^n$ многочлена $p_n^J(z)$. Вычисление этих корней облегчается тем, что корни многочленов $p_i^J(z)$ простые и корни двух соседних многочленов $p_i^J(z)$ и $p_{i+1}^J(z)$ $(i = 1, 2, \ldots)$ чередуются. Соответствующий собственному числу $z_k^{(n)}$ собственный (ненормированный) вектор x матрицы $J^{(n)}$ имеет компоненты $x_j = p_j(z_k^{(n)})$, $j = 0, \ldots, n-1$.

Если матрица оператора в ортонормированном базисе $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$ имеет вид (21), то справедливо равенство $e_i = p_i^J(J) e_0$, $i = 0, 1, \ldots$ Следовательно,

$$\delta_{ij} = \left( e_i\,,\, e_j \right) = \left( p_i^J(J)\, p_j^J(J) e_0\,,\, e_0 \right) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p_i^J(x)\, p_j^J(x)\, \rho^J(x) dx\,, \qquad (23)$$

где $\rho^J(x) = (dE_x e_0, e_0)/dx$ — спектральная плотность матрицы $J$, а $E_x$ — разложение единицы матрицы $J$.

Равенство (23) означает, что полиномы $\{p_i^J(x)\}_{i=0}^{\infty}$ образуют ортонормированную систему относительно весовой функции (или веса) $\rho^J(x)$. (Заметим, что для некоторых весовых функций свойства соответствующих полиномов хорошо изучены. Сюда относятся многочлены Лагерра, Якоби, Эрмита и др. (см., например, [42].)

Область применений метода якобиевых матриц можно разделить на *два класса* в зависимости от возможности точного и приближенного решения задач.

1. Метод дает точное решение ряда задач для линейной цепочки (1$D$ система) с взаимодействием ближайших соседей. Здесь имеются в виду задачи теории конечномерных возмущений, в которых матрица гамильтониана $H$ имеет известный трехдиагональный вид $H = L + V$, где $L$ — $J$-матрица, соответствующая полиномам с известным весом, а $V$ — конечномерная матрица.

В случае однородной цепочки строки матрицы $L$ одинаковы (т.е. $a_i = a$, $b_i = b$, $i = 0, 1, \ldots$) и, следовательно, справедливо представление $L = pJ_{\mathrm{Ch}} + qI$, $p = 4b$, $q = a - 2b$, где $J_{\mathrm{Ch}ii} = 1/2$, $J_{\mathrm{Ch}ii+1} = 1/4$, $i = 0, 1, \ldots$ Полиномы $p_i^{J_{\mathrm{Ch}}}(x)$ — полиномы Чебышева 2-го рода, ортогональные на интервале [0, 1]. Их весовая функция хорошо известна: $\rho_{\mathrm{Ch}}(\lambda) = (8/\pi)\sqrt{\lambda(1-\lambda)}$, если $\lambda \in [0, 1]$, и $\rho_{\mathrm{Ch}}(\lambda) = 0$ в противном случае. Следовательно, спектральная плотность матрицы $L$

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{|p|}\rho_{\mathrm{Ch}}\left(\frac{\lambda - q}{p}\right). \qquad (24)$$

2. Метод дает приближенное решение гораздо более широкого класса задач для 1$D$, 2$D$ и 3$D$ систем, потому что матрицу любого гамильтониана можно свести к совокупности трехдиагональных матриц, используя алгоритм Ланцоша (см., например, [34,43]). Теоретическая основа этого алгоритма следующая.

Выберем некоторый вектор $\varphi$ (который в дальнейшем называется порождающим) и рассмотрим инвариантное относительно оператора $H$ подпространство $K_\varphi$, натянутое на векторы $\varphi$, $H\varphi$, $H^2\varphi$, ... Проводя ортогонализацию последовательности этих векторов, получаем базис, в котором матрица $H$ трехдиагональна.

Алгоритм Ланцоша состоит в построении этого базиса и матрицы оператора $H$ в нем одновременно. А именно, положим

$$\varphi_0 = \varphi / \sqrt{(\varphi, \varphi)}\ ;$$

$$a_0 = (H\varphi_0, \varphi_0)\ ;\quad \varphi_1' = H\varphi_0 - a_0\varphi_0\ ;$$

$$b_0 = \sqrt{(\varphi_1', \varphi_1')}\ ;\quad \varphi_1 = \varphi_1'/b_0\ ;$$

$$a_1 = (H\varphi_1, \varphi_1);\quad \varphi_2' = H\varphi_1 - a_1\varphi_1 - b_0\varphi_0\ ;$$

$$b_1 = \sqrt{(\varphi_2', \varphi_2')}\ ;\quad \varphi_2 = \varphi_2'/b_1 \quad \text{и т. д.}$$

На $i$-м шаге

$$a_i = (H\varphi_i, \varphi_i);\quad \varphi_{i+1}' = H\varphi_i - a_i\varphi_i - b_{i-1}\varphi_{i-1}\ ;$$

$$b_i = \sqrt{(\varphi_{i+1}', \varphi_{i+1}')}\ ;\quad \varphi_{i+1} = \varphi_{i+1}'/b_i\ .$$

Таким образом, получается матрица (21) в базисе $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ пространства $K_\varphi$.

На практике рассчитывается только конечное число элементов $J$-матрицы. Уже на этом этапе, используя различные свойства якобиевых матриц, можно получить приближенные выражения для дискретных уровней энергии и величин $(f(H)\varphi, \varphi)$, где $f(x)$ — некоторая функция (мы не будем далее останавливаться на этом вопросе, см. [30,34,41]). Однако если асимптотическое поведение элементов матрицы $H$ ($H_{ik}$ при $i, k \to \infty$) может быть найдено, то возможно применение теории конечномерных возмущений для операторов с непрерывным спектром. Эта теория совпадает с той, которая применяется в классе задач 1. Действительно, если асимптотическое поведение матричных элементов $H_{ik}$ при $i, k \to \infty$ совпадает с поведением матричных элементов $J$-матрицы $L$, которая соответствует известной системе ортогональных полиномов, то мы имеем представление $H \approx L + V$, где $V$ — конечномерная трехдиагональная матрица. (Заметим, что можно расширить область приложений метода, рассматривая $J$-матрицы в гильбертовом пространстве операторов и используя уравнение Лиувилля [44–47].) Важно подчеркнуть, что спектр $J$-матрицы *прост*. Это означает, что если исходная система имеет вырожденный спектр, то для полного описания ее свойств необходимо определенным образом выбрать несколько (не меньше чем кратность вырождения спектра) порождающих векторов и рассмотреть совокупность $J$-матриц.

*3.2. Обобщение метода якобиевых матриц*

Метод якобиевых матриц можно обобщить [19,20] на случай определенного класса эрмитовых матриц вида

$$H = \begin{pmatrix} A_0 & B_0 & & 0 \\ B_0^* & A_1 & B_1 & \\ & B_1^* & A_2 & B_2 \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad (25)$$

где для $i = 0, 1, \ldots$ $A_i$, $B_i$ — $(n \times n)$-матрицы с вещественными матричными элементами, причем обратные матрицы $B_i^{-1}$ существуют.

Такой обобщенный метод позволяет решить следующие задачи.

1. Найти точное решение аналогичных классу 1 метода якобиевых матриц задач для линейной цепочки, в которой атомы взаимодействуют с *несколькими* (а именно, с $n$) «сферами» своих ближайших соседей. Здесь имеются в виду задачи, в которых матрица гамильтониана $H$ $(2n + 1)$-диагональна ($H = (H_{jk})$, где $H_{jk} = 0$, если $|j - k| > n$), и может быть представлена в виде $H = T_n(L) + V$, где $T_n(x)$ — полином степени $n$; $L$ — $J$-матрица, соответствующая полиномам с известным весом, а матрица $V$ конечномерна. В частности, в физически интересном случае однородной цепочки с точечным дефектом строки матрицы $H$ одинаковы (т.е. $H_{jj} = a_0$; $H_{j,j+1} = H_{j,j-1} = a_1$; $H_{j,j+n} = H_{j,j-n} = a_n$, где числа $\{a_i\}_{i=0}^{n}$ не зависят от индекса $j$) начиная с $r$-й строки. Как легко заметить, такой гамильтониан может быть представлен в виде $H = T_n(J_{\mathrm{Ch}}) + V$.

Очевидно, что $(2n + 1)$-диагональная матрица имеет блочно-трехдиагональную структуру (25) с блоками размерностью $n$ *.

2. Можно также найти приближенное решение гораздо более широкого класса задач для $1D$, $2D$ и $3D$ систем, так как для $n > 1$ мы можем применить алгоритм, подобный алгоритму Ланцоша, который вовлекает $n$ порождающих ортонормированных векторов, и свести матрицу к $(2n + 1)$-диагональному виду. Это может быть полезно, когда исходная система имеет вырожденный спектр (так как блочно-трехдиагональная матрица с блоками размерностью $n$ *может* иметь $n$-кратно вырожденный спектр). Дальнейшая аналогия между случаями $n = 1$ и $n > 1$ ясна, но ее техническое осуществление нетривиально: главной проблемой является оценка асимптотического поведения матричных элементов. Согласно имеющимся у авторов сведениям, работ на эту тему пока нет.

*3.3. Расчет спектра, спектральных функций гамильтониана и функций сдвига*

В соответствии с вышесказанным, приведем формулы для расчета спектра, спектральных функций оператора $H = H_0 + V$ и функций сдвига в случае, когда $H$ и $H_0$ — блочно-трехдиагональные матрицы ($H = T_n(L) + V$). Формулы для трехдиагональных матриц получатся тогда как частный случай.

Пусть $L$ — якобиева матрица со спектральной плотностью $\rho(\mu)$; $H = T_n(L) + V$ ($H_{ij} = 0$, если $|i - j| > n$) — матрица самосопряженного оператора в ортонормированном базисе $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$ гильбертова пространства; $T_n(x)$ — полином степени $n$, а $V$ — $(2n + 1)$-диагональный оператор, такой, что $Ve_i = 0$, если $i \geq r$. Предположим, что матричные элементы $H_{ij}$ и коэффициенты полинома $T_n(x)$ вещественные.

Для дальнейшего понадобятся матричные полиномы 1-го и 2-го рода — $P_s^M(z)$ и $Q_s^M(z)$ соответственно, связанные с блочно-трехдиагональной матрицей $M$ вида (25), которые, как известно (см., например, [49]), определены формулами

$$P_0^M = I, \quad P_1^M = B_0^{-1}\left(zI - A_0\right),$$

* Метод несложно далее распространить на случай, когда полином $T_n(x)$ заменяется интегрируемой функцией нескольких переменных $g(x_1, \ldots, x_d)$ [20]. Это, в частности, позволяет *точно* рассматривать некоторые $2D$ и $3D$ задачи в рамках метода. К ним относятся те задачи, в которых соответствующие гамильтонианы могут быть представлены в виде $H = H_0 + V$, где $V$ — конечномерное возмущение, а $H_0$ — функция от нескольких $J$-матриц с известными спектральными плотностями. Например, пространство одномагнонных возбуждений простой кубической решетки спинов с взаимодействием между ближайшими соседями, в которой имеется точечный спиновый дефект, раскладывается в ортогональную сумму подпространств, в которых матрицы гамильтониана Гейзенберга имеют вид $H = L_1 \otimes I \otimes I + I \otimes L_2 \otimes I + I \otimes I \otimes L_3 + V$, где $L_i$ — $J$-матрицы с известными спектральными плотностями, а $I$ — единичная матрица. Соответствующие функции $g(x_1, x_2, x_3)$ в этом случае являются полиномами по своим переменным. С другой стороны, как показано в [20], функция $g(x) = e^x$, например, связана с моделью линейной цепочки с бесконечным радиусом взаимодействий. Когда $g(x_1, \ldots, x_d)$ — полином, мы используем то, что матрица гамильтониана может рассматриваться как блочно-трехдиагональная, но в отличие от одномерного случая с бесконечной размерностью блока (т.е. $n = \infty$).

$$P_{i+1}^M = -B_i^{-1}\left((A_i - zI)P_i^M + B_{i-1}^* P_{i-1}^M\right),$$
$$i = 1, 2, \ldots,$$

$$Q_0^M = 0,\ Q_1^M = B_0^{-1},$$

$$Q_{i+1}^M = -B_i^{-1}\left((A_i - zI)Q_i^M + B_{i-1}^* Q_{i-1}^M\right),$$
$$i = 1, 2, \ldots,$$

где $I$ — единичная $n\times n$ матрица. В частности, при $n = 1$ получим формулы (22).

Введем также матрицы-векторы

$$P^M(z) = \begin{pmatrix} P_0^M(z) \\ P_1^M(z) \\ \vdots \end{pmatrix},\ Q^M(z) = \begin{pmatrix} Q_0^M(z) \\ Q_1^M(z) \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Как показано в [19], определитель (18) для рассматриваемого частного случая блочно-трехдиагональной матрицы $H = H_0 + V$, $H_0 = T_n(L)$ равен

$$\Delta(z) = c\widetilde{\Delta}(z),\ \widetilde{\Delta}(z) = |F_{ij}(z)|_0^{n-1},$$

$$F_{ij}(z) = \delta_{ij} + \sum_{s=0}^{[r/n]}\sum_{k=0}^{n-1}\left(VP^H(z)\right)_{sn+k,j}\times$$

$$\times\left\{\sum_{m=0}^{n-1} P_{s,km}^{T_n(L)}(z)R_{im}(z) + Q_{s,ki}^{T_n(L)}(z)\right\},$$

$$R_{im}(z) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{p_m^L(\mu)p_i^L(\mu)}{T_n(\mu) - z}\,\rho(\mu)d\mu. \qquad (26)$$

($V$ умножается на вектор, составленный из матричных полиномов $P_i^H(z)$, по обычным правилам вычисления произведения матриц), где множитель $c$ — вещественное число, зависящее от $H_0$ и $V$.

Заметим, что для нахождения матричных элементов $R_{im}(z)$ в (26) требуется знать спектральную плотность $\rho(\mu)$, тогда как в формулах (3), (18) используется больший набор спектральных характеристик — спектр и собственные функции невозмущенного гамильтониана. Кроме того, размерность определителя в (26) не зависит (в отличие от (18)), от размерности $r\times r$ матрицы возмущения. В частности, в случае, когда $H$ и $H_0 = L$ — якобиевы матрицы, имеем

$$\widetilde{\Delta}(z) = 1 + \sum_{s=0}^{r-1}\left(Vp^H(z)\right)_s\left\{p_s^L(z)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(\mu)d\mu}{\mu - z} + q_s^L(z)\right\}. \qquad (27)$$

Из формул (2), (17) следует, что дискретный спектр оператора $H = T_n(L) + V$ определяется из условия $\widetilde{\Delta}(z) = 0$, а функция сдвига по формуле

$$\xi(x) = \frac{1}{\pi}\lim_{y\downarrow 0}\arg\widetilde{\Delta}(x + iy) + \delta, \qquad (28)$$

$\delta$ — целое число, которое легко определяется одновременно с ветвью arg $(z)$ по формулам (19), (20).

В частности, в случае, когда $H$ и $H_0 = L$ — якобиевы матрицы, используя (27), получаем

$$\xi(x) = \frac{1}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{\pi\sum_k\left(Vp^H(x)\right)_k p_k^L(x)\rho(x)}{1 + \sum_k\left(Vp^H(x)\right)_k\left(p_k^L(x)\int_{-\infty}^{\infty}{}'\rho(\mu)(\mu - x)^{-1}d\mu + q_k^L(x)\right)}. \qquad (29)$$

Соответствующий точке $z_k$ дискретного спектра собственный вектор оператора $H$ равен $\mathrm{x} = P^H(z_k)\mathrm{c}$. Здесь $n$-компонентный вектор c определяется из уравнения $F(z_k)\mathrm{c} = 0$.

Для спектральных функций оператора $H$ можно получить следующее выражение:

$$\widetilde{\rho}_{ns+i,nt+j}(x) = \sum_{m,l=0}^{n-1} P_{s,im}^H(x)\,P_{t,jl}^H(x)\,\widetilde{\rho}_{ml}(x), \qquad (30)$$

где

$$\widetilde{\rho}_{ml}(x) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \lim_{y \downarrow 0} \widetilde{R}_{ml}(x + iy), \quad 0 \le m, l \le n - 1$$

и матричные элементы резольвенты $\widetilde{R}(z) = (H - zI)^{-1}$ определяются следующим образом:

$$\widetilde{R}_{ml}(z) = \frac{1}{\widetilde{\Delta}(z)} \sum_j \widetilde{\Delta}_{jm}(z) \left[ R_{jl}(z) - \sum_{s,i} \left( VQ^H(z) \right)_{ns+i,l} \left\{ \sum_k P^{T_n(L)}_{s,ik}(z)\, R_{jk}(z) + Q^{T_n(L)}_{s,ij}(z) \right\} \right], \quad (31)$$

где $\widetilde{\Delta}_{jm}(z)$ — алгебраическое дополнение элемента $F_{jm}(z)$. Суммирование по $i, j, k$ идет от 0 до $n - 1$.

В случае, когда $H$ и $H_0 = L$ — якобиевы матрицы, для спектральной плотности $\widetilde{\rho}_{00}(x) \equiv \widetilde{\rho}(x)$ можно получить из (30) следующее соотношение:

$$\widetilde{\rho}(x) = \frac{\rho(x)}{G(x)}, \quad G(x) = \left\{ 1 + \sum_k \left(Vp^H\right)_k \left( p^L_k S + q^L_k \right) \right\}^2 + \left\{ \sum_k \left(Vp^H\right)_k p^L_k \right\}^2 \rho^2 \pi^2 = \left| \lim_{y \downarrow 0} \widetilde{\Delta}(x + iy) \right|^2, \quad (32)$$

где

$$S(x) = \int_{-\infty}^{\infty}{}' \frac{\rho(\mu)}{\mu - x}\, d\mu .$$

Если, более того, $H_0 = J_{\mathrm{Ch}}$, то справедлива формула

$$\widetilde{\rho}(x) = \frac{\rho_{\mathrm{Ch}}(x)}{\sum_{k=0}^{2r-1} c_k p^H_k(x)}, \quad c_k = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\mathrm{Ch}}(x)\, p^H_k(x) dx . \quad (33)$$

Эта формула первоначально использовалась в [24] для расчета приближенного выражения для функции распределения квадратов частот колебаний идеальной кристаллической решетки. Заметим, что не обязательно вычислять интегралы в (33): дело в том, что, как следует из соотношений ортогональности (23) для полиномов $p^{J_{\mathrm{Ch}}}_i(x)$, $c_k = d_0$ в разложении

$$p^H_k(x) = \sum_{i=0}^{k} d_i\, p^{J_{\mathrm{Ch}}}_i(x) ,$$

которое строится путем сравнения коэффициентов при степенях переменной $x$ по обе стороны равенства.

### *3.4. Вычисление спектральной плотности периодической якобиевой матрицы*

Выше неоднократно отмечалось большое значение для физических задач матриц $L$ с одинаковыми строками, связанных с многочленами Чебышева. Эти матрицы в определенном смысле соответствуют системам одинаковых частиц с одинаковыми взаимодействиями между ними. Поэтому некоторые сложные кристаллические решетки соответствуют так называемым периодическим якобиевым матрицам. (Якобиевая матрица $L_t$ вида (21) называется периодической с периодом $t$, если $a_i = a_{i+tm}$, $b_i = b_{i+tm}$, $i, m = 0, 1, \ldots$) Простейший пример — линейная цепочка двух различных чередующихся спинов $s$ и $\sigma$, описываемая гамильтонианом Гейзенберга с взаимодействием ближайших соседей, при наличии в ней точечного спинового дефекта $\chi$. Пусть спин дефекта находится в узле с индексом 0, спины $s$ — в нечетных, а спины $\sigma$ — в четных узлах цепочки. Обозначим символом $|0\rangle$ нормированное состояние полного спинового упорядочения, определяемое формулами $\chi^z_0|0\rangle = \chi|0\rangle$, $s^z_i|0\rangle = s|0\rangle$ и $\sigma^z_{i+1}|0\rangle = \sigma|0\rangle$, $i = \pm 1, \pm 3, \ldots$ В базисе $e_0 = \chi^-_0|0\rangle/\sqrt{2\chi}$, $e_i = (s^-_i|0\rangle + s^-_{-i}|0\rangle)/2\sqrt{s}$, $e_{i+1} = (\sigma^-_{i+1}|0\rangle + \sigma^-_{-i-1}|0\rangle)/2\sqrt{\sigma}$, $i = 1, 3, \ldots$ матрица гамильтониана имеет вид $H = L_2 + V$, где $V$ — $2\times 2$-матрица, а $L_2$ — периодическая якобиевая матрица с периодом 2. Аналогичное представление оператора $H$ получается и в базисе $g_i = (s^-_i|0\rangle - s^-_{-i}|0\rangle)/2\sqrt{s}$, $g_{i+1} = (\sigma^-_{i+1}|0\rangle - \sigma^-_{-i-1}|0\rangle)/2\sqrt{\sigma}$, $i = 1, 3, \ldots$, дополняющем $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$ до базиса одномагнонного пространства. Таким образом, чтобы вычислить функцию сдвига и спектр гамильтониана по формулам в разд. 3.3, остается найти спектральную плотность матрицы $L_2$.

К структуре периодической трехдиагональной матрицы приводит и задача о блоховском электроне во внешнем магнитном поле (см., например, [50–55]).

Определим спектральную плотность $\rho(x)$ $t$-периодической якобиевой матрицы $L_t$, после чего для матрицы $L = L_t$ можно будет использовать всю теорию разд. 3.

С этой целью введем блочно-трехдиагональную матрицу $E_t$ вида (25) со следующими блоками размерностью $t \times t$: $A_i = 0$, $B_i = I$, $i = 0, 1, \ldots$

Имеет место равенство

$$S_t(L_t) = E_t + V, \qquad (34)$$

где $S_t(x) = p_t^{L_t}(x) - b_{t-1}\, q_{t-1}^{L_t}(x)$ и $V_{ik} = 0$ при $i, k \geq t-1$ (индексы матричных элементов $i, k = 0, 1, \ldots$).

Равенство (34) можно вывести из результатов работ [56,57], но гораздо удобнее провести его прямое доказательство.

Пусть $L$ — бесконечная в обоих направлениях $t$-периодическая трехдиагональная матрица симметрического оператора в базисе $\{e_i\}_{i=-\infty}^{\infty}$ некоторого пространства с матричными элементами

$$\left(Le_i, e_{i+k}\right) = \delta_{-1k}\, b_{i-1} + \delta_{0k}\, a_i + \delta_{1k}\, b_i,$$

$$a_i = a_{i+tm}, \quad b_i = b_{i+tm}, \quad i = 0, 1, \ldots, t-1,$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Свяжем с матрицей $L$ две системы полиномов $p_i(x)$, $q_i(x)$, определенные начальными условиями $p_{-1} = 0$, $p_0 = 1$, $q_{-1} = 1$, $q_0 = 0$ и одинаковым рекуррентным соотношением $y_{i+1} = \{(x - a_i)y_i - b_{i-1}y_{i-1}\}/b_i$, $i = 0, 1, \ldots$ (здесь $y_i = p_i$, $i = 0, 1, \ldots$ либо $y_i = q_i$, $i = 0, 1, \ldots$).

Определим матрицу $E$ соотношениями $E_{i,i+j} = E_{i,i-j} = \delta_{jt}$, $i, j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

**Лемма 2.**

$$p_t(L) + q_{t-1}(L) = E. \qquad (35)$$

*Доказательство леммы.* Используя рекуррентные соотношения для полиномов $p_i(x)$, $q_i(x)$, а также очевидное равенство $Le_i = b_{i-1}e_{i-1} + a_i e_i + b_i e_{i+1}$, получаем по индукции, что

$$p_k(L)e_0 = e_k - q_k(L)e_{-1}, \quad k = 0, 1, \ldots \qquad (36)$$

Поэтому

$$p_t(L)e_0 + q_{t-1}(L)e_0 = e_t + \varphi, \qquad (37)$$

$$\varphi = -q_t(L)e_{-1} + q_{t-1}(L)e_0. \qquad (38)$$

Подставляя в (38) вместо $q_t(L)$ его выражение через $L$, $q_{t-1}(L)$, $q_{t-2}(L)$ из рекуррентного соотношения и затем действуя оператором $L$ на вектор $e_{-1}$, получаем

$$\varphi = \frac{b_{t-2}}{b_{t-1}}\left(-q_{t-1}(L)e_{-2} + q_{t-2}(L)e_{-1}\right). \qquad (39)$$

Это первый шаг преобразования формулы для $\varphi$. Второй шаг состоит в проведении аналогичной операции по отношению к $q_{t-1}(L)$ в (39). Продолжая процесс, на $(t-1)$-м шаге получаем

$$\varphi = \frac{b_0}{b_{t-1}}\left(-q_1(L)e_{-t} + q_0(L)e_{-t+1}\right) = e_{-t}, \qquad (40)$$

т.е.

$$p_t(L)e_0 + q_{t-1}(L)e_0 = e_t + e_{-t}. \qquad (41)$$

Теперь, используя (36), (41) и равенство $p_t(L)e_{-1} - p_{t-1}(L)e_0 = e_{-t-1}$, которое доказывается аналогично выводу формулы (40), получаем (для краткости опускается аргумент $L$ у полиномов)

$$(p_t + q_{t-1})e_k = (p_t + q_{t-1})(p_k e_0 + q_k e_{-1}) =$$

$$= p_k(e_t + e_{-t}) + q_k(p_t e_{-1} + e_{t-1} - p_{t-1}e_0) =$$

$$= p_k e_t + q_k e_{t-1} + p_k e_{-t} + q_k(p_t e_{-1} - p_{t-1}e_0) =$$

$$= e_{t+k} + p_k e_{-t} + q_k e_{-t-1} = e_{k+t} + e_{k-t},$$

что завершает доказательство леммы.

Равенство (34) непосредственно получается из леммы 2 путем умножения соотношения (35) с обеих сторон на оператор $W$ ортопроекции на подпространство, натянутое на векторы $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$, и того, что для любого натурального $k$ справедливо равенство $WL^kW = (WLW)^k + V_k$, где $V_k e_i = 0$ при $i \geq k-1$.

Поскольку матрица $E$ имеет $2t$-кратно вырожденный спектр, заполняющий интервал $[-2, 2]$, а спектр матрицы $L$ не более чем двукратно вырожден, из (35) следует известный факт, что спектр матрицы $L$ состоит из совокупности $t$ интервалов — прообраза отрезка $[-2, 2]$ при отображении $S_t(\lambda) = \nu$. Следовательно, непрерывный спектр матрицы $L_t = WLW$ состоит из совокупности этих же интервалов.

Из формулы (34) вытекает, что, кроме непрерывного спектра, заполняющего интервал $[-2, 2]$, у оператора $S_t(L_t)$ может быть до $t-1$ дискретных

собственных значений (каждое из них считается столько раз, какова его кратность), которые можно искать по методу, описанному в разд. 3.3. Если $\lambda_0$ — одно из таких собственных значений кратностью $m$, то существует такой базис $\{\psi_i\}_{i=1}^{m}$ соответствующего собственного подпространства, что $L_t\psi_i = \varepsilon_i\psi_i$, где $\varepsilon_i$ удовлетворяют уравнению $S_t(\varepsilon_i) = \lambda_0$. Таким образом, у матрицы $L_t$ может быть до $t-1$ дискретных собственных чисел. (Напомним, что спектр $J$-матрицы прост.)

Соответствующие блоку $A_0$ спектральные функции оператора $E_t$ определяются формулой

$$\rho_{(0)jk}(x) = \delta_{jk}\frac{1}{4}\rho_{\mathrm{Ch}}\left(\frac{x+2}{4}\right),\ j,k = 0, 1, ..., t-1, \tag{42}$$

поэтому

$$\lim_{y\downarrow 0} R_{jk}(x+iy) = \lim_{y\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho_{(0)jk}(\lambda)d\lambda}{\lambda-(x+iy)} =$$

$$= \delta_{jk}\left\{-\frac{x}{2} + i\pi\rho_{(0)jj}(x)\right\} \tag{43}$$

и спектральные функциии $\widetilde{\rho}_{ij}(x)$ оператора $E_t + V$ вычисляются по формулам (30), (31), в которых размерность блока $n = t$.

Чтобы определить спектральную плотность матрицы $L_t$, перепишем уравнение (34) в виде

$$\int_{-\infty}^{\infty}\lambda\left\{\sum_{i=0}^{t-1}\frac{dE_{\varepsilon_i}}{d\varepsilon_i}\left|\frac{d\varepsilon_i}{d\lambda}\right|\right\}d\lambda = \int_{-\infty}^{\infty}\lambda\frac{d\widetilde{E}_\lambda}{d\lambda}d\lambda\,, \tag{44}$$

где $\lambda = S_t(\varepsilon_i)$, $i = 0, 1, ..., t-1$, а $E_x$, $\widetilde{E}_x$ — разложения единицы операторов $L_t$ и $E_t + V$ соответственно.

Из равенства (44) следует

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty}\lambda\left\{\sum_{i=0}^{t-1}\frac{dE_{\varepsilon_i}}{d\varepsilon_i}\left|\frac{d\varepsilon_i}{d\lambda}\right|\right\}d\lambda e_0\,,\ e_j\right) =$$

$$= \left(\int_{-\infty}^{\infty}\lambda\frac{d\widetilde{E}_\lambda}{d\lambda}d\lambda e_0\,,\ e_j\right),\quad j = 0, 1, ..., t-1\,. \tag{45}$$

Вводя обозначение

$$\rho'(\varepsilon_i) = \rho(\varepsilon_i)\left|\frac{d\varepsilon}{d\lambda}\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_i}\right|,$$

где $\rho(\varepsilon)$ — спектральная плотность матрицы $L_t$, из системы (45) получаем

$$\sum_{i=0}^{t-1} p_j^{L_t}(\varepsilon_i)\rho'(\varepsilon_i) = \widetilde{\rho}_{0j}(\lambda),\ j = 0, 1, ..., t-1. \tag{46}$$

Отсюда $\rho'(\varepsilon_i) = D_i/D$, где $D = |p_m^{L_t}(\varepsilon_n)|_0^{t-1}$, а $D_i$ — определитель $t\times t$, который получается из $D$ заменой $i$-го столбца на столбец, составленный из величин $\widetilde{\rho}_{0j}(\lambda)$. Выражение для $D$ можно упростить, раскладывая полиномы $p_m^{L_t}(\varepsilon_n)$ по рекуррентным формулам последовательно в каждой строке определителя, начиная с последней. Повторив эту операцию $t-1$ раз, получим

$$D = \frac{|\varepsilon_n^m|_0^{t-1}}{b_{t-2}\,b_{t-3}^2\cdots b_0^{t-1}} = \prod_{n=1}^{t-1}\prod_{k=0}^{n-1}\frac{\varepsilon_n-\varepsilon_k}{b_k}.$$

Таким образом, спектральная плотность матрицы $L_t$ в $i$-м интервале непрерывного спектра имеет вид

$$\rho(\varepsilon_i) = \frac{D_i}{D}\left|\frac{dS_t(\varepsilon)}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_i}\right|,\ S_t(\varepsilon_i)\in[-2, 2],$$

$$i = 0, 1, ..., t-1\,, \tag{47}$$

а добавка в спектральную плотность от каждой точки $\varepsilon_k$ дискретного спектра имеет вид

$$\rho_k(\varepsilon) = \delta(\varepsilon-\varepsilon_k)\left|(\psi_k\,,\ e_0)\right|^2, \tag{48}$$

где собственный вектор $\psi_k$ предполагается нормированным.

Соотношениями (47) и (48) завершается решение поставленной выше задачи. Заметим, что коэффициенты полинома $S_t(x)$ и матричные элементы оператора $V$ проще определять непосредственно по формуле (34), исходя из равенства матричных элементов в правой и левой частях равенства (аналогично вычислению $T_n(x)$ и $V$ по формуле $H = T_n(L) + V$).

Из изложенного выше следует, что практические расчеты спектральных и термодинамических характеристик в задачах теории конечномерных возмущений сводятся к определению матричных элементов резольвенты $R(z)$ невозмущенного оператора и нахождению определителя $\Delta(z) = |I + R(z)V|_0^{r-1}$. Специальные свойства операторов $H$ и $H_0$ приводят к следующим упрощениям при расчете.

— Если операторы $H$ и $H_0$ имеют блочно-трехдиагональную структуру с блоками размерностью $n$, то при произвольном ранге оператора возмущения определитель $\Delta(z)$ с точностью до несущест-

венного множителя совпадает с определителем $\widetilde{\Delta}(z)$ размерностью $n$.

— Если имеет место представление $H_0 = f(L)$, где $f(x)$ — некоторая функция, а $L$ — якобиева матрица, то для нахождения матричных элементов резольвенты $R_{ml}(z)$ требуется знание спектральной плотности якобиевой матрицы $L$, тогда как в общем случае при вычислении величин $R_{ml}(z)$ используется больший набор спектральных характеристик — спектр и собственные функции невозмущенного гамильтониана.

Как было указано в этом разделе, существует довольно широкий класс физических задач, в которых гамильтонианы удовлетворяют двум приведенным выше условиям.


1. I. M. Lifshitz, *Nuovo Cimento Suppl.* **3**, 716 (1956).
2. Yu. A. Izyumov, *Advan. Phys.* **14**, 569 (1965).
3. I. M. Lifshitz and A. M. Kosevich, *Rep. Prog. Phys.* **29**, 217 (1966).
4. *Point Defects in Metals. Springer Tracts in Modern Physics.* 81, Berlin (1978).
5. R. F. Wood and T. M. Wilson, *Proc. Int. Conf. Defects in Insulating Crystals.* Riga (1981), p. 186.
6. A. A. Maradudin, *Proc. Int. Conf. Defects in Insulating Crystals*, Riga (1981), p. 207.
7. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **18**, 293 (1948).
8. И. М. Лифшиц, В. И. Пересада, *Учен. зап. Харьк. ун-т.* **64**. *Тр. физ. отд-ния физ. -мат. фак.* **6**, 37 (1955).
9. G. F. Koster and J. G. Slater, *Phys. Rev* **96**, 1208 (1954).
10. В. И. Пересада, *ЖЭТФ* **38**, 1140 (1970).
11. В. И. Пересада, В. П. Толстолужский, *ФНТ* **3**, 788 (1977).
12. В. И. Пересада, Е. С. Сыркин, *ФТТ* **18**, 336 (1976).
13. И. А. Господарев, Е. С. Сыркин, В. И. Пересада, *Поверхность* **7**, 95 (1986).
14. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями*, Наука, Москва (1970).
15. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *ЖЭТФ* **48**, 574 (1965).
16. T. Wolfram and J. Callaway, *Phys. Rev.* **130**, 2207 (1963).
17. T. Oguchi and I. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.* **26**, 32 (1969).
18. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **20**, 586 (1994).
19. I. V. Krasovsky and V. I. Peresada, *J. Phys.* **A28**, 1493 (1995).
20. I. V. Krasovsky and V. I. Peresada, *J. Phys.* **A29**, 133 (1996).
21. И. М. Лифшиц, Г. И. Степанова, *ЖЭТФ* **31**, 156 (1956).
22. И. М. Лифшиц, Г. И. Степанова, *ЖЭТФ* **30**, 938 (1956).
23. И. М. Лифшиц, *Избр. тр. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
24. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, *ЖЭТФ* **58**, 135 (1970).
25. И. М. Лифшиц, *ДАН СССР* **48**, N 2, 83 (1945).
26. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **17**, 1017 (1947).
27. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **17**, 1076 (1947).
28. И. М. Лифшиц, *Учен. зап. Харьк. ун-т. 28. Зап. НИИ математики и механики ХГУ и Харьк. мат. о-ва* **20**, 77 (1950).
29. И. М. Лифшиц, *УМН* **7**, вып.1 171 (1952).
30. В. И. Пересада, *Физика конденсированного состояния*, вып.2 172 (1968).
31. В. И. Пересада, *ЖЭТФ* **53**, 605 (1967).
32. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
33. R. Haydock, V. Heine, and M. J. Kelly, *J. Phys.* **C5**, 2845 (1972).
34. *Solid State Physics: Advances in Research and Applications* **35**, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (eds.) New York, Academic (1980).
35. *The Recursion Method and Its Applications*, D. G. Pettifor and D. L. Weaire (eds.), Berlin, Springer (1985).
36. М. Г. Крейн, *Математический сборник* **33**, 597 (1953).
37. П. Ланкастер, *Теория матриц*, Наука, Москва (1978).
38. I. V. Krasovsky and V. I. Peresada, *ФНТ* **20**, 433 (1994).
39. P. D. Loly, *Can. J. Phys.* **65**, 1272 (1987).
40. И. И. Привалов, *Граничные свойства аналитических функций*, Гостехтеоретиздат Москва (1950).
41. Н. И. Ахиезер, *Классическая проблема моментов*, Физматгиз, Москва (1961), гл. 1,4.
42. Г. Сеге, *Ортогональные многочлены*, *Физматгиз*, Москва (1962).
43. Дж. Уилкинсон, *Алгебраическая проблема собственных значений*, Наука, Москва (1970).
44. M. H. Lee, *Phys. Rev.* **B26**, 2547 (1982).
45. M. H. Lee, *J. Math. Phys.* **24**, 2512 (1983).
46. J. Florencio, Jr. and M. H. Lee, *Phys. Rev.* **B35**, 1835 (1987).
47. J. F. Annet, W. Matthew, C. Foulkes, and R. Haydock, *J. Phys: Condensed Matter* **6**, 6455 (1994).
48. Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман, *Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве*, Вища школа, Харьков (1978), гл. 6.
49. Ф. Аткинсон, *Дискретные и непрерывные граничные задачи*, Мир, Москва (1968).
50. М. Я. Азбель, *ЖЭТФ* **46**, 929 (1964).
51. D. Hofstadter, *Phys. Rev.* **B14**, 2239 (1976).
52. G. H. Wannier, G. M. Obermair, and R. Ray, *Phys. Status Solidi* **B93**, 337 (1979).
53. P. B. Wiegmann and A. V. Zabrodin, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1890 (1994).
54. V. M. Gvozdikov, *J. Phys.: Condens. Matter.* **6**, 6245 (1994).
55. M. Y. Choi and J. Yi, *Phys. Rev.* **B52**, 13769 (1995).
56. Я. Л. Геронимус, *Изв. АН СССР, сер. матем.* **5**, 203 (1941).
57. П. Б. Найман, *ДАН СССР* **143**, N 2, 277 (1962).


## Principles of the finite-dimensional perturbation theory

I. V. Krasovsky and V. I. Peresada

A review of the finite-dimensional perturbation theory of self-adjoint operators is given and aimed at solution of physical problems. Particular attention is devoted to the case of a special kind of operators that allows efficient application of the $J$-matrix technique. The spectral density of a periodic $J$-matrix is calculated.