(13) Spektrum von gestörten Operatoren

Sei A ein s.a. Operator mit bekannten Spektrum.
Sei C kleiner als A (im geeigneten Sinne).
Zu bestimmen ist das Spektrum von $B = A + C$.
Sei das Spektrum von A das reine einfache Punktspektrum,

$$A_n \psi_n = \lambda_n \psi_n \,, \quad n \in N$$

Setze

$$A_\varepsilon = A + \varepsilon C \qquad (A_0 = A,\ A_1 = B).$$

Wir betrachten, was mit einem bestimmten EW und mit dem entsp. EV unter der Störung passiert:

$$A \psi^{(0)} = \lambda^{(0)} \psi^{(0)},$$

$$A_\varepsilon \psi_\varepsilon = \lambda_\varepsilon \psi_\varepsilon \,,$$

unter der Annahme (kann in vielen Fällen bewiesen werden), daß λ_ε und ψ_ε analytisch von ε abhängen:

$$\lambda_\varepsilon = \lambda^{(0)} + \varepsilon \lambda^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda^{(2)} + \ldots$$

$$\psi_\varepsilon = \psi^{(0)} + \varepsilon \psi^{(1)} + \varepsilon^2 \psi^{(2)} + \ldots$$

Einsetzen:

$$A \psi^{(0)} = \lambda^{(0)} \psi^{(0)}$$

$$A \psi^{(1)} + C \psi^{(0)} = \lambda^{(0)} \psi^{(1)} + \lambda^{(1)} \psi^{(0)}$$

$$\vdots$$

$$A \psi^{(k)} + C \psi^{(k-1)} = \lambda^{(0)} \psi^{(k)} + \lambda^{(1)} \psi^{(k-1)} + \ldots + \lambda^{(k)} \psi^{(0)}$$

oder

$$A\psi^{(0)} = \lambda^{(0)}\psi^{(0)} \qquad (0)$$

$$(A-\lambda^{(0)}I)\psi^{(1)} = (\lambda^{(1)}_{I} - C)\psi^{(0)} \qquad (1)$$

$$(A-\lambda^{(0)}I)\psi^{(2)} = (\lambda^{(1)}_{I} - C)\psi^{(1)} + \lambda^{(2)}\psi^{(0)} \qquad (2)$$

$$(A-\lambda^{(0)}I)\psi^{(k)} = (\lambda^{(1)}_{I} - C)\psi^{(k-1)} + \lambda^{(2)}\psi^{(k-2)} + \dots + \lambda^{(k)}\psi^{(0)} \qquad (k)$$

Also ist $\lambda^{(0)}$ ein der EW mit dem dazugehörigen EV $\psi^{(0)}$.

Die Gl. (1) hat eine Lösung, wenn

$$(\lambda^{(1)}I - C)\psi^{(0)} \perp \psi^{(0)}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \boxed{\lambda^{(1)} = \frac{(C\psi^{(0)}, \psi^{(0)})}{(\psi^{(0)}, \psi^{(0)})} = (C\psi^{(0)}, \psi^{(0)})}$$

bei der Standardnormierung $\|\psi^{(0)}\|^2 = 1$. Um jetzt einen Ausdruck für $\psi^{(1)}$ zu finden, merke:

$$A = \sum_m \lambda_m P_m \quad , \quad P_m = \text{Projektor auf } \mathbb{R}\psi_m,$$

also

$$A - \lambda^{(0)}I = \sum_{\lambda_m \neq \lambda^{(0)}} (\lambda_m - \lambda^{(0)}) P_m$$

$$(A-\lambda^{(0)}I)\psi^{(1)} = \sum_{\lambda_m \neq \lambda^{(0)}} (\lambda_m - \lambda^{(0)}) P_m \psi^{(1)}$$

$$= (\lambda^{(1)}I - C)\psi^{(0)} = \sum \left((\lambda^{(1)} - C)\psi^{(0)}, \psi_m\right)\psi_m$$

$$= \sum_{\lambda_m \neq \lambda^{(0)}} -(C\psi^{(0)}, \psi_m)\psi_m \Rightarrow$$

$$\Rightarrow P_m\psi^{(1)} = -\frac{(C\psi^{(0)}, \psi_m)}{\lambda_m - \lambda^{(0)}}\psi_m \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi^{(1)} = \sum_{\lambda_m \neq \lambda^{(0)}} \frac{(C\psi^{(0)}, \psi_m)}{\lambda^{(0)} - \lambda_m}\psi_m} \quad + \psi^{(0)}$$

Analog, die Gl. (2) hat eine Lösung, wenn

$$(\lambda^{(1)} I - C)\,\psi^{(1)} + \lambda^{(2)}\psi^{(0)} \perp \psi^{(0)}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \lambda^{(2)} = \left(C\psi^{(1)} - \lambda^{(1)}\psi^{(1)},\ \psi^{(0)}\right)$$

$$= \left(C\psi^{(1)},\ \psi^{(0)}\right)$$

$$= \sum_{\lambda_m \neq \lambda^{(0)}} \frac{\left(C\psi^{(0)}, \psi^{(m)}\right)\left(C\psi^{(m)}, \psi^{(0)}\right)}{\lambda^{(0)} - \lambda_m}$$

$$\boxed{\lambda^{(2)} = \sum_{\lambda_m \neq \lambda^{(0)}} \frac{\left|\left(C\psi^{(0)}, \psi^{(m)}\right)\right|^2}{\lambda^{(0)} - \lambda_m}}$$

u.s.w.

Störung eines mehrfachen EW

Es sei $\lambda^{(0)}$ ein EW der Vielfachheit q, d.h. der Eigenraum $\mathcal{H}_0$ hat $\mathrm{Dim} = q$:

$$A\psi_i = \lambda^{(0)}\psi_i, \quad i = 1, \dots, q$$

Es sei $Q : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_0$ der Projektor auf $\mathcal{H}_0$.

Gl. (0): $\psi^{(0)} \in \mathcal{H}_0 \Longleftrightarrow \psi^{(0)} = \sum_{i=1}^{q} a_i \psi_i$.

Gl. (1):

$$(\lambda^{(1)} I - C)\,\psi^{(0)} \perp \mathcal{H}_0 \Longleftrightarrow$$

$$\Longleftrightarrow Q\,(\lambda^{(1)} I - C)\,\psi^{(0)} = 0 \Longleftrightarrow \quad (\text{da } Q\psi^{(0)} = \psi^{(0)})$$

$$\Longleftrightarrow QCQ\,\psi^{(0)} = \lambda^{(1)}\psi^{(0)}.$$

Also muss $\psi^{(0)}$ EV von QCQ sein; der letzte Operator ist effektiv q-dim!

$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{q} \sum_{j=1}^{q} \psi_i \psi_i^* C \psi_j \psi_j^* \psi^{(0)} = \lambda^{(1)} \psi^{(0)}$$

$$\Longleftrightarrow \sum_{i=1}^{q} \sum_{j=1}^{q} \psi_i \, (C\psi_j, \psi_i)(\psi^{(0)}, \psi_j) = \lambda^{(1)} \psi^{(0)}$$

$$= \lambda^{(1)} \sum_{i=1}^{q} a_i \psi_i$$

$$\sum_{i=1}^{q} \sum_{j=1}^{q} \sum_{k=1}^{\ell} (C\psi_j, \psi_i) \, a_k (\psi_k, \psi_j) \psi_i$$

$$= \sum_{i=1}^{q} \sum_{j=1}^{q} (C\psi_j, \psi_i) a_j \psi_i = \lambda^{(1)} \sum_{i=1}^{q} a_i \psi_i$$

In anderen Worten,

$$\sum_{j=1}^{q} (C\psi_j, \psi_i) a_j = \lambda^{(1)} a_i \quad , \; i = 1, \dots, q$$

$$\bar{C} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_q \end{pmatrix} = \lambda^{(1)} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_q \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \bar{C}_{ij} = (C\psi_j, \psi_i)$$

Das Problem ist zurückgeführt auf das EW-Problem für die s.a. $q \times q$ Matrix $\bar{C}$. Die hat eine ONB von EV $\begin{pmatrix} a_{1j} \\ \vdots \\ a_{qj} \end{pmatrix}$ zu den EW $\lambda_j^{(1)}$, $j = 1, \dots, q$

Also werden aus einem q-fachen EW $\lambda^{(0)}$ von A unter Störung q verschiedene (in allgemeiner Lage) EW $\lambda^{(0)} + \varepsilon \lambda_j^{(1)}$

<u>Beispiel</u>. Wasserstoffatom im konstanten homogenen Magnetfeld $(0, 0, \beta)$:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{\alpha}{r} \underbrace{-\beta L_3}_{\text{Störung}}$$

Für die Eigenfunktionen $\psi_{n\ell m}$ zum EW $E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2}$ ($0 \leq \ell \leq n-1$, $m \in \{-\ell, -(\ell-1), \dots, (\ell-1), \ell\}$, insgesamt n^2 Stück) haben wir:

$L^2 \psi_{nlm} = l(l+1)\,\psi_{nlm}$, $\quad L_3 \psi_{nlm} = m\,\psi_{nlm}$.

Also ist die $n^2 \times n^2$-Matrix der Störung $-\beta L_3$ diagonal, mit Diagonaleinträgen $-\beta m$. Also hat H (in der ersten Näherung) die EW

$$E_{nm} = -\frac{\alpha^2}{2n^2} - \beta m \qquad \text{für alle } m \in \{-(n-1), \dots, (n-1)\}$$

Die sind allerdings nicht einfach, sondern gelten für alle $l \geq |m|$, $l \leq n-1$. Die Störung hat die Kugelsymmetrie zerstört.

Variationsbeschreibung der Eigenwerte

Es sei H ein s.a. Operator mit einem nach unten beschränkten Punktspektrum, mit EW

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots;$$

für $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n$ haben wir $H\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n E_n \psi_n$,

$$(H\psi, \psi) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |c_n|^2 \geq E_0 \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2}_{=E_0(\psi,\psi)} \text{ mit } „="$$

genau dann, wenn alle $c_n = 0$, $n \geq 1$. In anderen Worten,

$$E_0 = \min_{\psi \in \mathcal{H}} \frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)}$$

Analog,

$$E_1 = \min_{\psi \perp \psi_0} \frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)}$$

$$E_2 = \min_{\psi \perp \psi_0, \psi_1} \frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)} \qquad \text{u.s.w.}$$

Allgemeiner: Betrachtet man das Funktional

$$E(\psi) = \frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)}, \quad \psi \in \mathcal{H}$$

(Erwartungswert der Energie im Zustand $\frac{\psi}{\|\psi\|}$;

$E(\psi_n) = E_n$, wenn $H\psi_n = E_n\psi_n$), so sind die kritischen Punkte von E genau äquivalent zu den EV:

$$\delta E = 0 \Leftrightarrow H\psi = E\psi.$$

In der Tat:

$$\delta E = \frac{(H\delta\psi, \psi) + (H\psi, \delta\psi)}{(\psi,\psi)} - \frac{(H\psi,\psi)\left((\delta\psi,\psi) + (\psi,\delta\psi)\right)}{(\psi,\psi)^2}$$

$$= 2\,\mathrm{Re}\,\frac{(H\psi, \delta\psi)}{(\psi,\psi)} - 2E\,\mathrm{Re}\,\frac{(\psi,\delta\psi)}{(\psi,\psi)}$$

$$= 2\,\mathrm{Re}\,\frac{((H-E)\psi, \delta\psi)}{(\psi,\psi)}.$$

Also $H\psi = E\psi \Rightarrow \delta E = 0$.

Aus $\delta E[\delta\psi] = 0$, $\delta E[i\delta\psi] = 0 \Rightarrow \frac{((H-E)\psi, \delta\psi)}{(\psi,\psi)} = 0 \quad \forall \delta\psi \in \mathcal{H}$

$\Rightarrow H\psi = E\psi$.

<u>Example</u>.

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

(He-Atom).

Testfunktion:

$$\psi(x_1, x_2, \alpha) = e^{-\alpha r_1 - \alpha r_2}$$

Behauptung:

$$E(\alpha) = \alpha^2 - \frac{27}{8}\alpha \longrightarrow \min$$

$$\rightsquigarrow \quad \alpha = \frac{27}{16}, \qquad E_{min} = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 = -2{,}85$$

Experimentalwert: $E = -2{,}90$