

SAJÁTÉRTÉK-FELADATOK PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁSA

SZŐKEFALVI-NAGY BÉLA lev. tag

Előadta az 1950. december 1-én tartott osztályülésen.

A perturbációszámítás azzal a kérdéssel foglalkozik, miképpen változnak meg az $A_0\varphi = \lambda\varphi$ sajátértékprobléma megoldásai: a λ sajátértékek és a φ sajátfüggvények vagy sajátvektorok, ha az A_0 operátort perturbáljuk, azaz egy tőle kevésbé különböző $A(\varepsilon)$ operátorral helyettesítjük; ε itt egy valós paraméter, $A(0) = A_0$. Természetesen mind az eredeti, mind a perturbált operátorról feltesszük, hogy rájuk nézve a sajátértékprobléma megoldható, azaz hogy a Hilbert-tér Hermite-féle, pontosabban: *önadjungált* operátorai. A Rayleigh által az akusztikában, Schrödinger által pedig a kvantummechanikában alkalmazott perturbációszámítás abból az alapfeltevésből indul ki, hogy ha a perturbált operátor az ε paraméter kis értékeire az

$$A(\varepsilon) = A_0 + \varepsilon A_1 + \varepsilon^2 A_2 + \dots$$

hatványsorral állítható elő, azaz ha a perturbáció *reguláris*, akkor az $A(\varepsilon)$ sajátértékei és sajátvektorai is az ε hatványsoraival állíthatók elő, azaz szintén regulárisak. Pontosabban, az alapfeltevés az, hogy ha λ_0 az A_0 operátor elszigetelt m -szeres sajátértéke, akkor kis ε -ra az $A(\varepsilon)$ -nak a λ_0 környezetében a megfelelő multiplicitásokkal számítva ugyancsak m darab sajátértéke van, és ezek, valamint a hozzájuk tartozó m ortogonális normált sajátvektor az ε hatványsoraival állíthatók elő az ε paraméter kis értékeire. Ha ez az alapfeltevés teljesül, akkor e hatványsorok együtthatóit (melyek számok, ill. vektorok), egy rekurzív egyenletrendszer segítségével számíthatjuk ki, amelyet úgy nyerünk, hogy az

$$A(\varepsilon)\varphi(\varepsilon) = \lambda(\varepsilon)\varphi(\varepsilon), \quad (\varphi(\varepsilon), \varphi(\varepsilon)) = 1$$

egyenletekbe behelyettesítjük az $A(\varepsilon)$ adott és a $\lambda(\varepsilon)$ és $\varphi(\varepsilon)$ keresett hatványsorait és az ε egyenlő hatványainak együtthatóit összehasonlítjuk.

Nem szándékszem ezeket a számításokat most elismételni, hiszen minden kvantummechanikával foglalkozó tankönyvben megtalálhatók. Ezek a számítások azonban formálisak, azaz nem vetik fel azt a kérdést, hogy az így együtthatóról együtthatóra kiszámított hatványsorok egyáltalán konvergensek-e, vagy hogy a sorok első-, másod- stb. rendű tagjainál megállva, a kapott közelítések milyen pontosságúak. Ez az ilyen számítások megbízhatóságát kérdésessé teszi. Szükséges tehát a perturbációszámítás pontosabb matematikai

analizise. Szükséges elsősorban annak a fentemlített alapfeltevésnek az igazolása, hogy az operátor reguláris perturbációja a sajátértékek és sajátvektorok reguláris felhasadását eredményezi. De ezenfelül szükséges az is, hogy az illető hatványsorok konvergenciájának gyorsaságára is felvilágosítást nyerjünk, explicit hibabecslésekkel az első, második stb. közelítésre vonatkozólag.

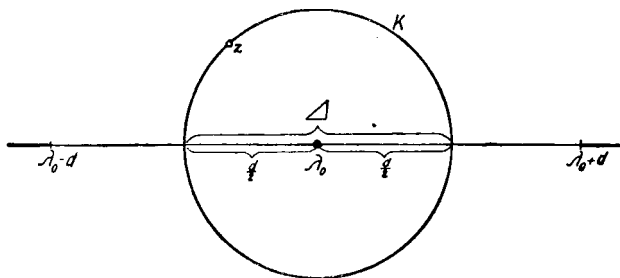
Ilyen irányú matematikai vizsgálatokat *F. Rellich* kezdeményezett, s 1936 és 1942 közt megjelent dolgozataiban¹ az említett problémákra először adott kielégítő választ. Előadó sokkal egyszerűbb módszerrel építette fel később az elméletet², módszere pontosabb hibabecsléseket szolgáltat és a Rellichétől eltérően, alkalmazható a spektrum³ tetszőleges elszigetelt darabja perturbációjának a vizsgálatára. A következőkben vázolni fogom e módszer lényegét; előadásom rövidre szabott keretei miatt szükségképpen főleg a kvalitatív vonatkozásokra szorítkozom és a hibabecsléseknek csupán a lehetőségére mutatok rá.

Az $A(\epsilon)$ perturbált operátor hatványsorfejtésében szereplő A_k együtt-hatók legyenek a Hilbert-tér korlátos, vagy nem korlátos önadjungált operátorai, melyek értelmezve vannak a Hilbert-tér minden olyan f elemére, amelyre az eredeti A_0 operátor értelmezve van. Tegyük fel továbbá, hogy léteznek olyan nem negatív a, b, p állandók, hogy minden ilyen f -re:

$$\|A_k f\| \leq p^{k-1} (a \|f\| + b \|A_0 f\|) \quad (k = 1, 2, \dots). \quad (1)$$

Ezek a feltételek nem önkényesek; meg lehet ugyanis mutatni, hogy minden olyan esetben, amikor a perturbált operátor értelmezési tartománya az ϵ -től független (tehát ugyanaz, mint az A_0 operátoré), ilyen a, b, p állandók léteznek. Jegyezzük meg, hogy abban az egyszerű esetben, amikor $A(\epsilon) = A_0 + \epsilon A_1$ (azaz, amikor $A_2 = A_3 = \dots = 0$), a p választható 0-nak.

Tegyük fel, hogy a λ_0 valós szám az A_0 -nak egy elszigetelt sajátértéke, azaz, hogy ennek valamely $(\lambda_0 - d, \lambda_0 + d)$ környezetébe az A_0 spektrumának más pontja nem esik. Ha K jelenti a komplex síkban a λ_0 körül $\frac{d}{2}$ sugárral írt



kört, akkor a K kör minden z pontja az A_0 spektrumától legalább $\frac{d}{2}$ távolságra van; következésképpen létezik az

$$R_{z0} = \frac{1}{A_0 - z}$$

operátor és korlátos: $\|R_{z_0}\| \leq \frac{2}{d}$. Felhasználva az

$$A(\varepsilon) - z = (A_0 - z) + (A(\varepsilon) - A_0) = [1 + (A(\varepsilon) - A_0)R_{z_0}](A_0 - z)$$

azonosságot és hivatkozva az (1) alatt feltett egyenlőtlenségekre, belátható, hogy az ε megadhatóan kis értékeire létezik

$$R_z(\varepsilon) = \frac{1}{A(\varepsilon) - z}$$

is, sőt hogy az ε szerint hatványsorba fejthető:

$$R_z(\varepsilon) = R_{z_0} + \varepsilon R_{z_1} + \varepsilon^2 R_{z_2} + \dots; \quad (2)$$

az R_{z_k} együtthatók folytonosan függnek a K körön változó z ponttól, normáik azonban a z -től függetlenül megbecsülhetők a megfelelően szerkesztett, numerikus együtthatókkal bíró hatványsor együtthatóival.

Ha $A(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_{\lambda}(\varepsilon)$ az $A(\varepsilon)$ spektrálfelbontása, akkor

$$R_z(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda - z} dE_{\lambda}(\varepsilon),$$

és így a

$$- \frac{1}{2\pi i} \oint_K R_z(\varepsilon) dz \quad (3)$$

konturintegrál egyenlő a K kör által a λ -tengelyből kivágott $\Delta = \left(\lambda_0 - \frac{d}{2}, \lambda_0 + \frac{d}{2}\right)$

intervallumhoz tartozó $P(\varepsilon) = E_{\lambda_0 + \frac{d}{2}}(\varepsilon) - E_{\lambda_0 - \frac{d}{2}}(\varepsilon)$ spektrálprojektorral.

Behelyettesítve a (3) alatti integrálba a (2) alatti hatványsorfejtést és tagonként integrálva (ami szabad), adódik e spektrálprojektor sorfejtése:

$$P(\varepsilon) = P_0 + \varepsilon P_1 + \varepsilon^2 P_2 + \dots,$$

ismét egyszerű becslésekkel a P_k együtthatók (amelyek a P_0 kivételével általában nem projektorok) normáira.

A $P_0 = P(0)$, ill. a $P(\varepsilon)$ spektrálprojektorhoz tartozó spektráaltért jelöljük M_0 -al, ill. $M(\varepsilon)$ -nal. A_0 spektrumának Δ -ban egyetlen pontja a λ_0 lévén, az M_0 alteret az A_0 -nak a λ_0 sajátértékéhez tartozó sajátvektorai alkotják.

Mármost a P_k együtthatók normáira kapott becslések alapján meg tudjuk adni az $\varepsilon = 0$ egy olyan kis környezetét, amelyben levő ε -okra

$$\|P(\varepsilon) - P_0\| < 1,$$

s amelyekre ennél fogva képezhető az

$$U(\varepsilon) = P(\varepsilon) [1 + P_0(P(\varepsilon) - P_0)P_0]^{-\frac{1}{2}} P_0$$

operátor. Kis ε -okra $U(\varepsilon)$ is az ε hatványsorába fejthető, s vele együtt az $U^*(\varepsilon)$ adjungált operátor is. Kimutatható, hogy $U(\varepsilon)$ az adjungáltjával a következő kapcsolatban van :-

$$U^*(\varepsilon) U(\varepsilon) = P_0, \quad U(\varepsilon) U^*(\varepsilon) = P(\varepsilon),$$

amiből az következik, hogy $U(\varepsilon)$ az M_0 alteret *izometrikusan* az $M(\varepsilon)$ altérre képezi le, $U^*(\varepsilon)$ pedig ennek a leképezésnek az inverzét szolgáltatja. Ennél fogva ezekre a kis ε -okra az $M(\varepsilon)$ altér dimenziója egyenlő kell, hogy legyen az M_0 altér dimenziójával, azaz a λ_0 -nak, mint az A_0 sajátértékének a multiplicitásával.

Ha tehát ez a multiplicitás véges, mondjuk m -mel egyenlő, akkor az $M(\varepsilon)$ spektráaltér is m -dimenziós, és ebből következik, hogy a szakaszba nem eshet az $A(\varepsilon)$ folytonos spektrumának pontja, hanem csak a pontspektrumának, mégpedig véges sok sajátérték, amelyek multiplicitásainak összege m .

Ha speciálisan λ_0 az A_0 -nak *egyszeres* sajátértéke, akkor így Δ -ban az $A(\varepsilon)$ -nak is csak egy egyszeres sajátértéke van : $\lambda(\varepsilon)$. Ha φ_0 az A_0 -nak a λ_0 -hoz tartozó normált sajátvektora, akkor $\varphi(\varepsilon) = U(\varepsilon)\varphi_0$ az $A(\varepsilon)$ -nak a $\lambda(\varepsilon)$ -hoz tartozó, ugyancsak normált sajátvektora. $U(\varepsilon)$ -nal együtt ez a $\varphi(\varepsilon)$ vektor is az ε hatványsorával állítható elő, úgyszintén a $\lambda(\varepsilon)$ sajátérték is, hiszen

$$\lambda(\varepsilon) = (A(\varepsilon)\varphi(\varepsilon), \varphi(\varepsilon));$$

a $\varphi(\varepsilon)$ és a $\lambda(\varepsilon)$ sorának együtthatói explicite megbecsülhetők.

Ezzel *egyszeres* sajátérték esetében a programmunkat végrehajtottuk.

Többszörös sajátérték esetében a bizonyítást teljes indukcióval végezzük. Feltesszük, hogy az m -nél kisebb multiplicitású elszigetelt sajátértékek a hozzájuk tartozó sajátvektorokkal együtt regulárisan hasadnak fel, s bebizonyítjuk, hogy ez akkor a λ_0 m -szeres sajátértékre is áll.

Tekintsük evégből a

$$C(\varepsilon) = U^*(\varepsilon) A(\varepsilon) U(\varepsilon)$$

operátort. $U(\varepsilon)$ az M_0 alteret az $M(\varepsilon)$ altérbe viszi át, $A(\varepsilon)$ az $M(\varepsilon)$ alteret önmagába képezi le, $U^*(\varepsilon)$ pedig az $M(\varepsilon)$ -t visszaviszi M_0 -ba ; ennél fogva $C(\varepsilon)$ az M_0 m -dimenziós altér önmagába való, nyilván önadjungált leképezése. Az $A(\varepsilon)$ -nal és az $U(\varepsilon)$ -nal együtt $C(\varepsilon)$ is kis ε -ra hatványsorral állítható elő :

$$C(\varepsilon) = C_0 + \varepsilon C_1 + \dots ;$$

az első együttható : $C_0 = U^*(0) A_0 U(0) = P_0 A_0 P_0 = \lambda_0 P_0$.

Lehetséges, hogy nemcsak a C_0 , hanem az összes többi C_k együttható is a P_0 -nak skaláris többszöröse, s velük együtt a $C(\varepsilon)$ is, azaz $C(\varepsilon) = \lambda(\varepsilon) P_0$.

Ebben az esetben akárhogy választunk is M_0 -ban egy $\{\varphi_0^{(i)}\}$ ($i = 1, \dots, m$) teljes normált ortogonális vektorrendszert,

$$C(\varepsilon)\varphi_0^{(i)} = \lambda(\varepsilon)\varphi_0^{(i)}, \text{ és így } A(\varepsilon)U(\varepsilon)\varphi_0^{(i)} = \lambda(\varepsilon)U(\varepsilon)\varphi_0^{(i)}.$$

Eszerint ekkor a

$$\varphi^{(i)}(\varepsilon) = U(\varepsilon)\varphi_0^{(i)} \quad (i = 1, \dots, m)$$

vektorok, melyek az $U(\varepsilon)$ izometrikus tulajdonsága miatt az $M(\varepsilon)$ altérben szintén teljes normált ortogonális rendszert alkotnak, mindannyian az $A(\varepsilon)$ -nak a $\lambda(\varepsilon)$ sajátértékhez tartozó sajátvektorai. Ebben az esetben tehát a λ_0 m -szeres sajátérték a perturbáció következtében nem hasad fel, hanem csupán elmozdul a $\lambda(\varepsilon)$ helyzetbe. $C(\varepsilon)$ -nal és $U(\varepsilon)$ -nal együtt, mint azonnal látható, a $\lambda(\varepsilon)$ sajátérték és a hozzátartozó $\varphi^{(i)}(\varepsilon)$ sajátvektorok is kis ε -ra az ε hatvány-soraival állíthatók elő.

Ezzel elintéztük azt az esetet, amikor mindegyik C_k együttható a P_0 skaláris többszöröse. Marad az az eset, amikor a C_0 és esetleg még a rákövetkező néhány együttható a P_0 skaláris többszöröse, pl.

$$C_1 = \lambda_1 P_0, C_2 = \lambda_2 P_0, \dots, C_{s-1} = \lambda_{s-1} P_0,$$

de már C_s nem ilyen. Ez azt jelenti, hogy a C_s -nek, mint az m -dimenziós M_0 tér önadjungált operátorának, van legalább két különböző sajátértéke, s következésképpen a sajátértékei mind m -nél kisebb multiplicitásúak. Alkalmazhatjuk tehát az indukciós feltevésünket az M_0 térbeli

$$C_s(\varepsilon) = C_s + \varepsilon C_{s+1} + \dots$$

reguláris perturbációproblémára, mégpedig a C_s mindegyik sajátértéke esetében. Így adódik, hogy van $C_s(\varepsilon)$ -nak M_0 -ban egy $\{\psi^{(i)}(\varepsilon)\}$ ($i = 1, \dots, m$) teljes normált ortogonális sajátvektorrendszere, úgyhogy mindegyik sajátvektor és a hozzátartozó $\kappa^{(i)}(\varepsilon)$ sajátérték kis ε -ra az ε hatványsorával állítható elő. De akkor

$$C(\varepsilon)\psi^{(i)}(\varepsilon) = \lambda^{(i)}(\varepsilon)\psi^{(i)}(\varepsilon), \text{ ahol } \lambda^{(i)}(\varepsilon) = \lambda_0 + \varepsilon\lambda_1 + \dots + \varepsilon^{s-1}\lambda_{s-1} + \varepsilon^s\kappa^{(i)}(\varepsilon),$$

és így

$$A(\varepsilon)U(\varepsilon)\psi^{(i)}(\varepsilon) = \lambda^{(i)}(\varepsilon)U(\varepsilon)\psi^{(i)}(\varepsilon),$$

azaz ekkor a

$$\varphi^{(i)}(\varepsilon) = U(\varepsilon)\psi^{(i)}(\varepsilon) \quad (i=1, \dots, m)$$

vektorok, melyek az $M(\varepsilon)$ altérben teljes normált ortogonális rendszert alkotnak, az $A(\varepsilon)$ -nak a $\lambda^{(i)}(\varepsilon)$ sajátértékekhez tartozó sajátvektorai. Az előállításból látható, hogy a sajátvektorok és a sajátértékek az ε paraméternek szintén reguláris függvényei.

Ezzel a többszörös sajátértékek esetére is befejeztük a bizonyítást. Megjegyezzük, hogy a többszörös sajátértékek esetében kapott sorfejtések egyúttartóinak megbecslése nehezebb, mint az egyszeres sajátértékek esetében.

Abban a leggyakoribb esetben azonban, amikor a többszörös sajátérték már az első közelítésben egyszeresekre hasad szét (azaz, amikor a $C_1 = P_0 A_1 P_0$ operátornak az M_0 térben csupa egyszeres sajátértéke van), sikerül egyszerűen ilyen explicit becsléseket nyerni.

Hogy a most bizonyított tétel egyáltalában nem magától értetődő, az legjobban abból látható, hogy ha a perturbált operátor *több* paraméter reguláris függvénye, akkor általában csak az egyszeres sajátértékek változnak meg szintén reguláris módon, a többszörösek nem. Példa erre a 2-dimenziós térben az az operátor, amelynek a matrixa

$$A(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \varepsilon_1 \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \varepsilon_2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Mint hogy $A(0,0) = 0$, a perturbálatlan operátornak a 0 kétszeres sajátértéke. Ez felhasad az $A(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ két sajátértékére: $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \pm \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}$, amelyek az $(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = (0,0)$ környezetében nem fejthetők hatványsorba az $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ szerint.

A perturbáció-elmélet további feladataihoz tartozik a spektrum nem elszigetelt részei perturbációjának vizsgálata, így pl. a folytonos spektrumra helyezett sajátértékek vizsgálata, amely pl. az Auger-effektus szempontjából nagyfontosságú probléma. Ezek a problémák más módszereket igényelnek és lényegesebben nehezebben foghatók meg matematikailag. Újabban *K. Friedrichs*-nek sikerült e téren is sikereket elérnie³. E vizsgálatok ismertetésére ebben az előadásban nem térhetek ki.

Szegedi Tudományegyetem,
Bolyai-Intézete.

IRODALOM

¹ Rellich F.: Math. Annalen, 113 (1936) 600—619.; 113 (1936) 677—685.; 116 (1939) 555—570.; 117 (1940) 356—382.; 118 (1942) 462—484.

² Szőkefalvi-Nagy Béla: Matematikai és Természettudományi Értesítő, 61 (1942) 755—775.; 62 (1943) 63—79.; Commentarii Math. Helvetici, 19 (1947) 347—366.

³ Friedrichs K. O.: Communications on applied mathematics, 7 (1948) 361—406.