

Periodische Potentiale in der eindimensionalen

Diracgleichung

Diese Diplomarbeit wurde am Institut für theoretische
Physik an der Technischen Universität Graz unter der
Leitung von Dozent Dr. Wolfgang Bulla durchgeführt.

Vorgelegt von

Karl Unterkofler

Graz, März 1986

Mein besonderer Dank gilt meinen Lehrern W. Bulla und F. Gesztesy für die interessante Themenauswahl und die besonders ausgezeichnete Betreuung.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Der Diracoperator mit periodischem Potential	2
3	Der nichtrelativistische Grenzwert des Diracoperators im Sinne der Resolventenkonvergenz und die Störungsentwicklung des Paulioperators in 1. Ordnung	27
4	Zusammenfassung	31
	Anhang	
A	Direktes Integral	32
B	Floquettheorie	35
C	Systeme gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen 1. Ordnung	38
D	Störungstheorie für das diskrete Spektrum von Operatoren	40

Symbolverzeichnis

Die Seitenzahlen beziehen sich auf [11] (J.Weidmann)

Dort findet man auch die genaue Definition der verschiedenen Begriffe mit Erläuterungen.

\mathbb{K}	Körper \mathbb{R} oder \mathbb{C}	
\oplus	orthogonale Summe	37
\otimes	Tensorprodukt	51
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Skalarprodukt	14
$\ \cdot \ $	Norm	15
$D(T)$	Definitionsbereich des Operators T	54
$\sigma(T)$	Spektrum des Operators T	98
$\rho(T)$	Resolventenmenge des Operators T	98
T^*	der adjungierte Operator von T	70
$B(\mathcal{H})$	Menge der beschränkten Operatoren auf \mathcal{H}	63
$B_\infty(\mathcal{H})$	Menge der kompakten Operatoren auf \mathcal{H}	129
$B_1(\mathcal{H})$	Menge der Spurklasseoperatoren auf \mathcal{H}	167
$B_2(\mathcal{H})$	Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren auf \mathcal{H}	133
$AC(a,b)$	Menge der absolut stetigen Funktionen auf (a,b)	
$L^\infty(\mathbb{R})$	Menge der beschränkten Funktionen auf \mathbb{R}	
$S(\mathbb{R})$	Menge der schnellfallenden Funktionen auf \mathbb{R}	270
$W_{2,1}(a,b)$	Sobolevraum	153
$C^\infty(a,b)$	Menge der unendlich oft stetig differenzierbaren komplexwertigen Funktionen auf (a,b)	
$C_0^\infty(a,b)$	wie $C^\infty(a,b)$ jedoch mit kompaktem Träger	31
$L^2(\mathbb{R})$	Menge der Äquivalenzklassen meßbarer, komplexwertiger quadratintegrabler Funktionen auf \mathbb{R}	25
a.e.	fast überall	336

1 Einleitung

Im Jahre 1979 wurde von W. B. Su, J. R. Schrieffer und A. J. Heeger in *Physical Review Letters* 42 (1979) 1698 ein Modell zur Beschreibung der Elektronenleitung in Polyacetylen vorgestellt. In der Folge wurde das Modell weiterentwickelt, und die quantenmechanische Behandlung führte im Kontinuumslimes auf einen Hamiltonoperator der nicht dem Schrödingeroperator, sondern formal dem eindimensionalen Diracoperator entspricht. (Das sehr lange Molekül kann dabei näherungsweise als eindimensional und unendlich lang betrachtet werden.) Dies ist der mathematisch-physikalische Ausgangspunkt für die mathematisch strenge Untersuchung dieses Operators. Speziell in dieser Diplomarbeit wird dieser Operator mit einem periodischen Potential untersucht. Dies wird durch die periodische Struktur des Moleküls motiviert. Die Behandlung lehnt sich an die Untersuchung von Schrödingeroperatoren mit periodischem Potential von [9] Kapitel XIII.16 an, weicht aber in beweistechnischen Details wegen der nicht vorhandenen Halbbeschränktheit des Diracoperators stark davon ab. Auch die allgemeinere Struktur des Diracoperators als Differentialoperator benötigt zusätzliche Beweisänderungen. Es wird gezeigt, daß auch beim Diracoperator mit periodischem Potential Energiebänder auftreten. Speziell ist durch die direkte Integralzerlegung des Operators mit absolut stetigem Spektrum in eine Schar von Operatoren mit diskreten Spektren eine Entwicklung der Bandkanten um den Grenzfall $c^{-1}=0$ (im Sinne der Resolventenkonvergenz) möglich.

2 Der Diracoperator mit periodischem Potential

Der Diracoperator mit periodischem Potential ist gegeben durch:

$$H := cp \otimes \sigma_1 + mc^2 \otimes \sigma_3 + v(x) \otimes 1 \quad (1)$$

σ_1, σ_3 sind die Paulimatrizen: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$m, c \dots$ konstant; $v(x) \in L^\infty(\mathbb{R}) \dots$ reellwertig

$$p := \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \quad \text{mit } D(p) = W_{2,1}(\mathbb{R})$$

p ist selbstadjungiert ([1] Satz 6.30).

$$D(H) = D(p) \otimes \mathbb{C}^2 = W_{2,1}(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$$

$$\bar{\mathcal{H}} = L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$$

Für $f \in \bar{\mathcal{H}}$ gilt: $f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$ wobei $f_i \in L^2(\mathbb{R})$, $i=1,2$ ist

Bemerkung: Für Operatoren der Form $T = \begin{pmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{pmatrix}$ mit A abgeschlossen, gilt:

T ist selbstadjungiert ([4] Seite 162).

Damit folgt, wenn man noch den Satz von Kato-Rellich verwendet ([1] Satz 5.28), die Selbstadjungiertheit von H .

Speziell sei $v(x)$ periodisch, d.h. $v(x+2\pi) = v(x)$. Dann ist der Operator H mit dem Operator der Translation um 2π vertauschbar. Diese Eigenschaft ermöglicht die Darstellung des Operators H in einer direkten Integralzerlegung.

Lemma: Es sei $\mathcal{H}' := L^2([0, 2\pi], dx) \otimes \mathbb{C}^2$ und

$$\mathcal{H} := \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} \mathcal{H}' \frac{d\theta}{2\pi} \quad (2)$$

weilers sei $\hat{U} : L^2(\mathbb{R}, dx) \otimes \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathcal{H}$

gegeben durch: $\hat{U} := U \otimes 1$

$$(Uf_j)_\theta(x) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta n} f_j(x+2\pi n), \quad j=1,2 \quad (3)$$

wobei $\theta \in [0, 2\pi)$ und $x \in [0, 2\pi]$ ist. \hat{U} ist für $f \in S(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ wohldefiniert und eindeutig zu einem unitären Operator fortsetzbar.

Weiters gilt:

$$\hat{U} \begin{pmatrix} 0 & cp \\ cp & 0 \end{pmatrix} \hat{U}^{-1} = \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} \begin{pmatrix} 0 & cp_\theta \\ cp_\theta & 0 \end{pmatrix} \frac{d\theta}{2\pi} \quad (4)$$

wobei p_θ der Operator $\frac{1}{i} \frac{d}{dx}$ auf

$$D(p_\theta) = \{ f_j \in W_{2,1}([0, 2\pi]) / f_j(2\pi) = e^{i\theta} f_j(0), j=1,2 \}$$

selbstadjungiert ist. ([7] Seite 259)

Anmerkung: Statt des Intervalls $[0, 2\pi)$ in (2), (3) und (4) kann man auch das Intervall $[0, 2\pi]$ nehmen. Auf dies wird in der Anwendung einiger Sätze ohne besonderen Hinweis Bezug genommen.

Beweis: Für $f_j \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ ist die Summe in (3) konvergent.

Die Berechnung von $\hat{U}f$ für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ ergibt:

$$\begin{aligned}
 \| \hat{U}f \|_{\mathcal{H}}^2 &= \sum_{j=1}^2 \| Uf_j \|^2 = \\
 &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \| (Uf_j)_\theta(x) \|^2 = \\
 &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} f_j(x+2\pi n) \right|^2 = \text{(Fubini)} \\
 &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \overline{f_j(x+2\pi n) f_j(x+2\pi k)} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-i(k-n)\theta} = \\
 & \qquad \qquad \qquad = \delta_{nk} \\
 &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} |f_j(x+2\pi n)|^2 = \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} |f_j(x)|^2 dx = \\
 &= \| f \|^2_{L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2}
 \end{aligned}$$

\hat{U} ist daher für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ wohldefiniert und hat daher eine eindeutige Fortsetzung zu einer Isometrie ([11] Satz 4.5). Um zu sehen, daß \hat{U} auf \mathcal{H} abbildet, berechnet man \hat{U}^* (vgl. [11] Satz 4.34 b):

$$\hat{U}^* = U^* \otimes 1$$

$$(U^*g_j)(x+2\pi n) = \int_0^{2\pi} e^{in\theta} g_{j,\theta}(x) \frac{d\theta}{2\pi}, \quad j=1,2 \quad (5)$$

denn:

$$\begin{aligned} \langle \hat{U}^*g, f \rangle &= \sum_{j=1}^2 \langle U^*g_j, f_j \rangle = \\ &= \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \overline{U^*g_j(x)} f_j(x) dx = \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \overline{U^*g_j(x+2\pi n)} f_j(x+2\pi n) = \\ &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \overline{\int_0^{2\pi} e^{in\theta} g_{j,\theta}(x) \frac{d\theta}{2\pi}} f_j(x+2\pi n) = \\ &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx \overline{g_{j,\theta}(x)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} f_j(x+2\pi n) = \\ &= \langle g, \hat{U}f \rangle \end{aligned}$$

Für alle $g \in \mathcal{H}$ gilt:

$$\begin{aligned} \|\hat{U}^*g\|_{L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2}^2 &= \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} |U^*g_j(x)|^2 dx = \\ &= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} |U^*g_j(x+2\pi n)|^2 = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=1}^2 \int_0^{2\pi} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left| \int_0^{2\pi} e^{in\theta} g_{j,\theta}(x) \frac{d\theta}{2\pi} \right|^2 = \\
&= \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} dx \int_0^{2\pi} |g_{j,\theta}(x)|^2 \frac{d\theta}{2\pi} = \|g\|_{\mathcal{H}}^2
\end{aligned}$$

wobei von der vorletzten zur letzten Zeile die Parsevalsche Gleichung für Fourierreihen

$$\sum |g_n|^2 = \|g_{j,\theta}(x)\|^2$$

verwendet wird.

Zum Beweis von (4) setzt man:

$$A := \frac{c}{i} \int_{[0, 2\pi]} \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx}_\theta \\ \frac{d}{dx}_\theta & 0 \end{pmatrix} \frac{d\theta}{2\pi} \quad \text{und} \quad H_0 := \frac{c}{i} \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx} \\ \frac{d}{dx} & 0 \end{pmatrix}.$$

Man zeigt nun, daß für $f \in S(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ $Uf \in D(A)$ ist, und $\hat{U}(H_0 f) = A(\hat{U}f)$ gilt. Da H_0 wesentlich selbstadjungiert auf $S(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ ist und A selbstadjungiert ist folgt dann (4).

Es sei $f \in S(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$, dann ist $\hat{U}f$ durch (3) gegeben und $(\hat{U}f)_\theta(x) \in C^\infty(0, 2\pi) \otimes \mathbb{C}^2$ wobei gilt:

$$(\hat{U}f')_\theta(x) = (\hat{U}f)_\theta'(x)$$

Diese Zeile folgt aus (3) durch differenzieren, wobei die Vertauschbarkeit von $\sum_{-\infty}^{\infty}$ und $\frac{d}{dx}$ wegen $f \in S(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ möglich ist.

Weiters gilt:

$$\begin{aligned}
 (\hat{U}f)_\theta(2\pi) &= \begin{pmatrix} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta n} f_1(2\pi(n+1)) \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta n} f_2(2\pi(n+1)) \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta(n-1)} f_1(2\pi n) \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\theta(n-1)} f_2(2\pi n) \end{pmatrix} = e^{i\theta} (\hat{U}f)_\theta(0).
 \end{aligned}$$

Es gilt daher $\hat{U}f \in D(A)$ und weiters ist:

$$\hat{U}(H_0 f) = A(\hat{U}f)$$

$$\frac{c}{i} \begin{pmatrix} (Uf_2)_\theta(x) \\ (Uf_1)_\theta(x) \end{pmatrix} = \frac{c}{i} \begin{pmatrix} (Uf_2)_\theta'(x) \\ (Uf_1)_\theta'(x) \end{pmatrix}.$$

Dieses Lemma ermöglicht nun die direkte Integralzerlegung des räumlich eindimensionalen Diracoperators H (Gleichung (1)) mit periodischem Potential.

Theorem 1 : Es sei $v(x)$ eine beschränkte meßbare Funktion auf \mathbb{R} mit der Periode 2π . Für $\theta \in [0, 2\pi)$ sei

$$H(\theta) := \begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & cp_\theta \\ cp_\theta & v(x) - mc^2 \end{pmatrix} \quad (6)$$

der Operator auf $L^2 [0, 2\pi] \otimes \mathbb{C}^2$. \hat{U} sei gegeben durch (3). Dann gilt mit der Zerlegung (2) :

$$\hat{U}H\hat{U}^{-1} = \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} H(\theta) \frac{d\theta}{2\pi} \quad (7)$$

Beweis: Sei $\begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & 0 \\ 0 & v(x) - mc^2 \end{pmatrix}$ der θ -unabhängige

Operator, der auf der Faser $\mathcal{H}' = L^2 [0, 2\pi] \otimes \mathbb{C}^2$ wirkt durch:

$$(V_\theta g)(x) = \begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & 0 \\ 0 & v(x) - mc^2 \end{pmatrix} g(x) \quad ; \quad x \in [0, 2\pi]$$

(7) folgt dann von [9] Theorem XIII.85g und dem Lemma indem man zeigt, daß

$$\hat{U} \begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & 0 \\ 0 & v(x) - mc^2 \end{pmatrix} \hat{U}^{-1} = \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} V_\theta \frac{d\theta}{2\pi} \text{ ist.} \quad (8)$$

Mit (3) gilt für $f \in S(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$

$$\left[\hat{U} \begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & 0 \\ 0 & v(x) - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \right]_\theta (x) =$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} (v(x+2\Pi n)+mc^2) f_1(x+2\Pi n) \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} (v(x+2\Pi n)-mc^2) f_2(x+2\Pi n) \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} (v(x)+mc^2) & \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} f_1(x+2\Pi n) \\ (v(x)-mc^2) & \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} f_2(x+2\Pi n) \end{pmatrix} = \\
&= V_{\theta} (\hat{U}f)_{\theta}(x)
\end{aligned}$$

Dies beweist (8) und damit (7).

Theorem 1 reduziert die Analyse von H auf die Analyse der Operatoren $H(\theta)$ für $\theta \in [0, 2\Pi)$.

Als erstes untersucht man den Operator

$$H_0(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & cp_{\theta} \\ cp_{\theta} & 0 \end{pmatrix}$$

Lemma: (a) Für jedes $\theta \in [0, 2\Pi)$ hat der Operator $H_0(\theta)$ eine kompakte Resolvente.

(b) $(H_0(\theta) - ic)^{-1}$ ist eine analytische operatorwertige Funktion von θ in einer Umgebung von $[0, 2\Pi)$.

Beweis: (a) [11] Satz 6.4 c besagt:

$$A \in B_{\infty}(\hat{\mathcal{H}}) \Leftrightarrow A^* A \in B_{\infty}(\hat{\mathcal{H}})$$

Mit $A := (H_0(\theta) - ic)^{-1}$ folgt

$$A^*A = (H_0(\theta) + ic)^{-1} (H_0(\theta) - ic)^{-1} = (H_0(\theta)^2 + c^2)^{-1} =$$

$$= \frac{1}{c^2} \left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1} \oplus \left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1}$$

$$\text{wobei } H_0(\theta)^2 = \begin{pmatrix} 0 & cp_\theta \\ cp_\theta & 0 \end{pmatrix}^2 = c^2 \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2_\theta} & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dx^2_\theta} \end{pmatrix} \text{ ist.}$$

Da $\left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1} \in B_\infty(\mathcal{X}')$ ist ([9] Seite 292 Lemma (a))

folgt die Behauptung.

Anmerkung: (a) folgt auch unmittelbar aus dem Beweis von (b).

$$(b): \text{ Es gilt: } \begin{pmatrix} -z & cp_\theta \\ cp_\theta & -z \end{pmatrix}^{-1} =$$

$$= \begin{pmatrix} z(c^2p_\theta^2 - z^2)^{-1} & (cp_\theta + z)^{-1} + z(c^2p_\theta^2 - z^2)^{-1} \\ (cp_\theta + z)^{-1} + z(c^2p_\theta^2 - z^2)^{-1} & z(c^2p_\theta^2 - z^2)^{-1} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Beweis: einfach ausmultiplizieren ergibt 1.

Mit $z=ic$ gilt: $(H_0(\theta) - ic)^{-1} =$

$$= \begin{pmatrix} \frac{i}{c} \left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1} & \frac{1}{c} \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx_\theta} + i \right)^{-1} + \frac{i}{c} \left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1} \\ \frac{1}{c} \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx_\theta} + i \right)^{-1} + \frac{i}{c} \left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1} & \frac{i}{c} \left(-\frac{d^2}{dx^2_\theta} + 1 \right)^{-1} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Für $K_\theta := \left(-\frac{d^2}{dx_\theta^2} + 1 \right)^{-1}$ gilt:

$$(K_\theta f)(x) = \int_0^{2\Pi} G_\theta(x,y) f(y) dy \quad (11)$$

$$G_\theta(x,y) = \frac{1}{2} e^{-|x-y|} + \alpha(\theta) e^{x-y} + \beta(\theta) e^{y-x}$$

$$\alpha(\theta) = \frac{1}{2} (e^{2\Pi-i\theta} - 1)^{-1} \quad \beta(\theta) = \frac{1}{2} (e^{2\Pi+i\theta} - 1)^{-1}$$

Beweis: [9] Seite 292 Gleichung (154).

Für $N_\theta := \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx_\theta} + i \right)^{-1}$ gilt:

$$(N_\theta f)(x) = \int_0^{2\Pi} \tilde{G}_\theta(x,y) f(y) dy \quad (12)$$

$$\tilde{G}_\theta(x,y) = i(1-e^{2\Pi-i\theta})^{-1} (c(x,y) + (1-c(x,y))e^{2\Pi-i\theta}) e^{x-y}$$

$$\text{mit } c(x,y) = \begin{cases} 1 & y \leq x \\ 0 & y > x \end{cases}$$

Beweis:

$$g(x) := (N_\theta f)(x) = \int_0^x i(1-e^{2\Pi-i\theta})^{-1} e^{x-y} f(y) dy + \\ + \int_x^{2\Pi} i(1-e^{2\Pi-i\theta})^{-1} e^{2\Pi-i\theta} e^{x-y} f(y) dy$$

Man hat zu zeigen: (i) $g(2\pi) = e^{i\theta} g(0)$

(ii) $(p_\theta + i) g(x) = f(x)$

$$(i) \quad g(2\pi) = \int_0^{2\pi} i(1-e^{2\pi-i\theta})^{-1} e^{2\pi-y} f(y) dy$$

$$g(0) = \int_0^{2\pi} i(1-e^{2\pi-i\theta})^{-1} e^{2\pi-i\theta} e^{-y} f(y) dy$$

(ii) $(p_\theta + i) g(x) =$

$$= \frac{1}{i} \int_0^{2\pi} i(1-e^{2\pi-i\theta})^{-1} (c(x,y) + (1-c(x,y)) e^{2\pi-i\theta}) e^{x-y} f(y) dy +$$

$$+ (1-e^{2\pi-i\theta})^{-1} f(x) - e^{2\pi-i\theta} (1-e^{2\pi-i\theta})^{-1} f(x) + ig(x) = f(x)$$

(11) und (12) ermöglichen die Definition eines Hilbert-Schmidt - Operators ([11] Satz 6.11) (daraus folgt auch die Kompaktheit der Resolvente) für alle θ mit $|\operatorname{Im}\theta| < 2\pi$ und die Analytizität der Resolvente in θ in einer Umgebung von $[0, 2\pi)$ ist daraus unmittelbar ersichtlich.

Dieses Lemma ermöglicht nun die vollständige qualitative Analyse des Spektrums der Operatoren

$$H(\theta) = \begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & cp_\theta \\ cp_\theta & v(x) - mc^2 \end{pmatrix}$$

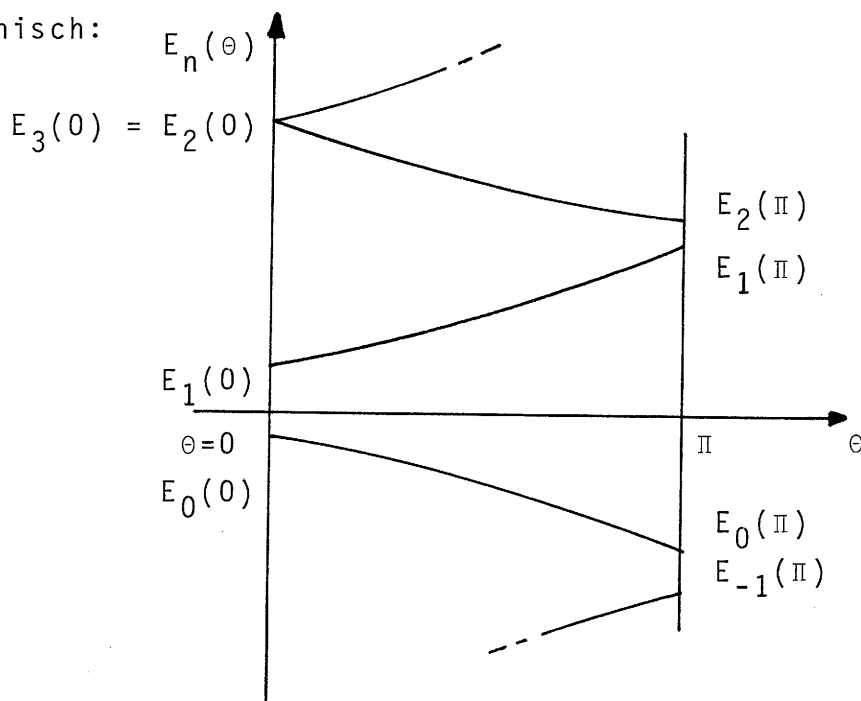
Theorem 2 : Es sei $v(x)$ stückweise stetig und $v(x+2\pi) = v(x)$.
Dann gilt:

- (a) $H(\theta)$ hat ein rein diskretes Spektrum.
 (b) $H(\theta)$ ist eine analytische Familie in einer Umgebung von $[0, 2\pi)$.
 (c) Sei $Kf := \begin{pmatrix} \bar{f}_1 \\ -\bar{f}_2 \end{pmatrix}$ dann gilt: $KH(\theta)f = H(2\pi-\theta)Kf$.
 Speziell sind die Eigenwerte der Operatoren $H(\theta)$ und $H(2\pi-\theta)$ gleich und für die Eigenvektoren gilt: $Kf_n(\theta, x) = f_n((2\pi-\theta), x)$.
 (d) Für $\theta \in (0, \pi) \cup (\pi, 2\pi)$ hat $H(\theta)$ nur nicht-entartete Eigenwerte.
 (e) Sei $E_n(\theta)$ der n -te Eigenwert von $H(\theta)$ ($n \in \mathbb{Z}$).
 Dann ist $E_n(\theta)$ analytisch in $(0, \pi)$ und stetig in $\theta=0$ bzw. $\theta=\pi$.
 (f) Bei geeigneter Numerierung der Eigenwerte gilt:
 Für n ungerade (bzw. gerade) ist $E_n(\theta)$ streng monoton wachsend (bzw. fallend) als Funktion von θ auf $(0, \pi)$. Speziell gilt:

$$\dots E_{-1}(\pi) \leq E_0(\pi) < E_0(0) \leq E_1(0) < E_1(\pi) \leq E_2(\pi) < E_2(0) \leq \dots$$

$$\dots E_{2n-1}(0) < E_{2n-1}(\pi) \leq E_{2n}(\pi) \dots$$

graphisch:



(g) Man kann die Eigenfunktionen $f_n(\theta)$ so wählen, daß sie analytisch in θ für $(0, \pi) \cup (\pi, 2\pi)$ und stetig in 0 und π sind, wobei $f_n(0) = f_n(2\pi)$ gilt.

Beweis: (a) Nach dem Lemma hat $H_0(\theta)$ eine kompakte Resolvente. Da

$$\tilde{V} := \begin{pmatrix} v(x) + mc^2 & 0 \\ 0 & v(x) - mc^2 \end{pmatrix}$$

beschränkt ist, ist es relativ kompakt zu $H_0(\theta)$ ([11] Satz 9.10)

$$\underbrace{\tilde{V}}_{\in B(\mathcal{X}')} \underbrace{(z - H_0(\theta))^{-1}}_{\in B_\infty(\mathcal{X}')} \Rightarrow \in B_\infty(\mathcal{X}')$$

(zweiseitiges Ideal)

Mit dem Satz von Weyl ([11] Satz 9.9) folgt nun

$$\sigma_{\text{ess}}(H(\theta)) = \sigma_{\text{ess}}(H_0(\theta)) = \emptyset.$$

$H(\theta)$ hat daher ein rein diskretes Spektrum, da $H_0(\theta)$ ein rein diskretes Spektrum hat ([6] Theorem 6.29).

(b) Aus der 2-ten Resolventengleichung ([11] Satz 5.13) erhält man:

$$(H_0(\theta) + \tilde{V} - z)^{-1} = (1 + (H_0(\theta) - z)^{-1} \tilde{V})^{-1} (H_0(\theta) - z)^{-1}.$$

Die Neumannsche Reihe von $(1 + (H_0(\theta) - z)^{-1} \tilde{V})^{-1}$ konvergiert für $\|(H_0(\theta) - z)^{-1} \tilde{V}\| < 1$ ([11] Satz 5.14).

Es gilt wegen $\tilde{V} \in B(\mathcal{X}')$:

$$\|(H_0(\theta) - z)^{-1} \tilde{V}\| \leq \|\tilde{V}\| \|(H_0(\theta) - z)^{-1}\| \leq \frac{\|\tilde{V}\|}{|\text{Im}z|} < 1$$

für $|\text{Im}z|$ genügend groß.

Für die Abschätzung der Resolvente verwendet man [11] Satz 5.18.

$$(c) D(H(\theta)) = \{ f \in W_{2,1} [0, 2\pi] \otimes \mathbb{C}^2 / f_i(2\pi) = e^{i\theta} f_i(0), i=1,2 \}$$

$$KD(H(\theta)) = \{ f \in W_{2,1} [0, 2\pi] \otimes \mathbb{C}^2 / f_i(2\pi) = e^{-i\theta} f_i(0), i=1,2 \}$$

$$D(H(2\pi-\theta)) = \{ f \in W_{2,1} [0, 2\pi] \otimes \mathbb{C}^2 / f_i(2\pi) = e^{-i\theta} f_i(0), i=1,2 \}$$

Für $H_0(\theta)$ gilt:

$$KH_0(\theta)f = H_0(2\pi-\theta)Kf$$

$$K \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{i} \frac{d}{dx}_\theta \\ \frac{1}{i} \frac{d}{dx}_\theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{i} \frac{d}{dx}_{2\pi-\theta} \\ \frac{1}{i} \frac{d}{dx}_{2\pi-\theta} & 0 \end{pmatrix} K \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

$$K \frac{1}{i} \begin{pmatrix} f_2' \\ f_1' \end{pmatrix} = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx}_{2\pi-\theta} \\ \frac{d}{dx}_{2\pi-\theta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -f_1 \\ -f_2 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{i} \begin{pmatrix} - \\ -f_2' \\ - \\ f_1' \end{pmatrix} = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} - \\ -f_2' \\ - \\ f_1' \end{pmatrix}$$

$$\text{Da } \tilde{V} = \begin{pmatrix} v(x)+mc^2 & 0 \\ 0 & v(x)-mc^2 \end{pmatrix} \text{ reell, diagonal und}$$

θ -unabhängig ist gilt: $KVf = VKf$

und somit folgt: $KH(\theta)f = H(2\pi-\theta)Kf$.

Aus dem Anhang C ergibt sich für die Darstellung der Lösungen der Eigenwertgleichung:

$$f = c_1 \begin{pmatrix} u_1 \\ iu_2 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} iv_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \quad u_j, v_j \text{ reell, } j=1,2$$

$$Kf = \bar{c}_1 \begin{pmatrix} u_1 \\ iu_2 \end{pmatrix} + (-\bar{c}_2) \begin{pmatrix} iv_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

(d) Ist E Eigenwert von $H(\theta)$, $\theta \in (0, \pi)$ dann hat $H(\theta)f = Ef$ eine Lösung, die die Randbedingungen erfüllt:

$$f_i(2\pi) = e^{i\theta} f_i(0), \quad i=1,2.$$

Mit f ist aber auch Kf eine linear unabhängige Lösung dieser Differentialgleichung, die die konjugierten Randbedingungen erfüllt. Da aber nur zwei linear unabhängige Lösungen existieren, ist jeder Eigenwert für $\theta \in (0, \pi)$ einfach.

(e) und (f) Zum Beweis von (e) und (f) verwendet man die Eigenschaften der Funktion $D(E)$.

Zuerst betrachtet man das Differentialgleichungssystem

$$f'(x) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{c} (v(x) - mc^2 - E) \\ -\frac{i}{c} (v(x) + mc^2 - E) & 0 \end{pmatrix} f(x) \quad (14)$$

das man aus der Gleichung $H(\theta)f = Ef$ erhält, wenn man die $f_i(x)$, $i=1,2$ von $[0, 2\pi]$ auf \mathbb{R} fortsetzt.

- (1) Als erstes zeigt man in Hinblick auf Gl. (A3), daß die Wronskideterminante eines Lösungssystems konstant ist.

$$\text{Sei } Y(x) = \begin{pmatrix} f_1(x,E) & g_1(x,E) \\ f_2(x,E) & g_2(x,E) \end{pmatrix} \quad \text{ein}$$

Lösungssystem, dann gilt:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dx} &= f'_1 g_2 + f_1 g'_2 - g'_1 f_2 - g_1 f'_2 = \\ &= -\frac{i}{c} (v(x) - mc^2 - E) f_2 g_2 - f_1 \frac{i}{c} (v(x) + mc^2 - E) g_1 + \\ &+ \frac{i}{c} (v(x) - mc^2 - E) g_2 f_2 + g_1 \frac{i}{c} (v(x) + mc^2 - E) f_1 = 0 \end{aligned}$$

$$(2) D(E) := u_1(2\pi, E) + v_2(2\pi, E)$$

d.h. $D(E)$ ist die Spur des Lösungssystems $Y(x)$ an der Stelle $x=2\pi$ wobei $Y(0)=1$ ist.

Im folgenden wird die im Anhang C gezeigte spezielle Struktur dieses Lösungssystems verwendet:

$$Y(x) = \begin{pmatrix} u_1(x) & i v_1(x) \\ i u_2(x) & v_2(x) \end{pmatrix} \quad (15)$$

wobei die $u_j(x), v_j(x)$, $j=1,2$ rein reell sind.

Eigenschaften von $D(E)$:

(i) $D(E)$ ist reell.

(ii) $D(E)$ ist analytisch in E .

(Beweis: siehe jedes Buch über gewöhnliche Diffgl.)

(iii)

$$\frac{dD(E)}{dE} \neq 0 \quad \text{für } |D| < 2$$

$$\text{Beweis: } \frac{dD(E)}{dE} = \frac{du_1(2\pi, E)}{dE} + \frac{dv_2(2\pi, E)}{dE}$$

Differenzieren der Differentialgleichung (14) nach E ergibt:

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dx} & \frac{df_1}{dE} \\ \frac{d}{dx} & \frac{df_2}{dE} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{c}(v(x)-mc^2-E) \\ -\frac{i}{c}(v(x)+mc^2-E) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{df_1}{dE} \\ \frac{df_2}{dE} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \frac{i}{c} \\ \frac{i}{c} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

Die Ableitungen nach E erfüllen die inhomogene Differentialgleichung $y' = A(x)y + b(x)$ wobei die zugehörige homogene Differentialgleichung die Struktur der Differentialgleichung (14) hat. Die Lösung der inhomogenen ist daher:

$$y(x) = X(x)y_0 + \int_{x_0}^x X(x)X(s)^{-1}b(s)ds$$

(vgl. Anhang C Satz A5, bzw. jedes Buch über gewöhnliche Diffgl.)

Speziell ist $y_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ da die Anfangsbedingungen unabhängig von E sind.

$$b(s) = \frac{i}{c} \begin{pmatrix} b_2 \\ b_1 \end{pmatrix} \quad X(x) = \begin{pmatrix} f_1 & g_1 \\ f_2 & g_2 \end{pmatrix} \quad X(s)^{-1} = \begin{pmatrix} g_2 & -g_1 \\ -f_2 & f_1 \end{pmatrix}$$

$$\det X(x) = 1$$

$$X(x)X(s)^{-1} = \begin{pmatrix} f_1(x)g_2(s) - g_1(x)f_2(s) & -f_1(x)g_1(s) + g_1(x)f_1(s) \\ f_2(x)g_2(s) - g_2(x)f_2(s) & -f_2(x)g_1(s) + g_2(x)f_1(s) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{dh_1(x,E)}{dE} \\ \frac{dh_2(x,E)}{dE} \end{pmatrix} = \frac{i}{c} \int_0^x ds \begin{pmatrix} f_1(x,E)\{g_2(s,E)b_2(s,E)-g_1(s,E)b_1(s,E)\}+g_1(x,E)\{-f_2(s,E)b_2(s,E)+f_1(s,E)b_1(s,E)\} \\ f_2(x,E)\{g_2(s,E)b_2(s,E)-g_1(s,E)b_1(s,E)\}+g_2(x,E)\{-f_2(s,E)b_2(s,E)+f_1(s,E)b_1(s,E)\} \end{pmatrix} \quad (16)$$

Nun setzt man das Fundamentalsystem aus Anhang C ein und berücksichtigt, daß $\begin{pmatrix} b_1 = u_1 \\ b_2 = iu_2 \end{pmatrix}$ bzw. $\begin{pmatrix} b_1 = iv_1 \\ b_2 = v_2 \end{pmatrix}$ $h=u,v$ ist.

$$\frac{du_1(x,E)}{dE} = \frac{i}{c} \int_0^x ds \{ u_1(x)(iv_2u_2-iv_1u_1) + iv_1(x)(u_1^2 + u_2^2) \} \quad (17)$$

$$\frac{dv_2(x,E)}{dE} = \frac{i}{c} \int_0^x ds \{ iu_2(x)(v_1^2 + v_2^2) + v_2(x)(-iu_2v_2 + iu_1v_1) \} \quad (18)$$

$$\frac{dD(E)}{dE} = -\frac{1}{c} \int_0^{2\Pi} ds \{ u_2(2\Pi)(v_1^2 + v_2^2) + v_1(2\Pi)(u_1^2 + u_2^2) + (u_1v_1 - u_2v_2)(v_2(2\Pi) - u_1(2\Pi)) \} \quad (19)$$

Multiplikation mit $4v_1(2\Pi)$ ergibt:

$$-c4v_1(2\pi)\frac{dD(E)}{dE} = \int_0^{2\pi} ds \{ 4v_1(2\pi)u_2(2\pi)(v_1^2 + v_2^2) + 4v_1(2\pi)^2(u_1^2 + u_2^2) + 4v_1(2\pi)(v_2(2\pi) - u_1(2\pi))(u_1v_1 - u_2v_2) \}$$

mit $D^2(E) = 4 + (u_1(2\pi) - v_2(2\pi))^2 - 4v_1(2\pi)u_2(2\pi)$ (20) erhält man:

$$\begin{aligned} -c4v_1(2\pi)\frac{dD(E)}{dE} &= \int_0^{2\pi} ds \{ (4-D^2)(v_1^2 + v_2^2) + 4v_1(2\pi)^2(u_1^2 + u_2^2) + (u_1(2\pi) - v_2(2\pi))^2(v_1^2 + v_2^2) + \\ &\quad + 4v_1(2\pi)(v_2(2\pi) - u_1(2\pi))(u_1v_1 - u_2v_2) \} = \\ &= \int_0^{2\pi} ds \{ (4-D^2)(v_1^2 + v_2^2) + [2v_1(2\pi)u_1 - (u_1(2\pi) - v_2(2\pi))v_1]^2 + [2v_1(2\pi)u_2 + (u_1(2\pi) - v_2(2\pi))v_2]^2 \} \end{aligned} \quad (21)$$

d.h. $\frac{dD(E)}{dE} \neq 0$ für $|D| < 2$

(iv) An einer Nullstelle E_m von $(D(E)-2)$ ist $D'(E_m)$ genau dann 0 wenn

$$v_1(2\pi, E_m) = u_2(2\pi, E_m) = 0 \quad (22)$$

Weiters ist $D''(E_m) < 0$ wenn $D'(E_m) = 0$ gilt.

Beweis: Gilt (22) dann folgt:

$$u_1(2\pi, E_m) = v_2(2\pi, E_m) = 1 \quad (23)$$

(vgl. Klassifikationsschema Anhang B Punkt D)

und aus (19) folgt dann $D'(E_m) = 0$.

Gilt $D'(E_m) = 0$ dann folgt aus (21), daß

$$(2v_1(2\pi)u_i - (u_1(2\pi) - v_2(2\pi))v_i) = 0 \quad i=1,2$$

sein muß. Da u_i und v_i linear unabhängig sind folgt, daß:

$$v_1(2\pi) = 0$$

$$u_1(2\pi) = v_2(2\pi)$$

und aus (19) folgt dann $u_2(2\pi) = 0$ und weiters

$$u_1(2\pi) = v_2(2\pi) = 1.$$

Um $D''(E_m) < 0$ zu zeigen differenziert man (19) nach E setzt dann $E = E_m$ und substituiert für die Ableitungen der u_i, v_i $i=1,2$ nach E mit (16), (17), (18). Da (22) und (23) gilt, erhält man viele Vereinfachungen:

$$-c \frac{d^2 D(E)}{dE^2} = \int_0^{2\pi} ds \quad u_2'(2\pi)(v_1^2+v_2^2) + \underbrace{u_2(2\pi)2(v_1v_1'+v_2v_2')}_{=0} + v_1'(2\pi)(u_1^2+u_2^2) + \underbrace{v_1(2\pi)2(u_1u_1'+u_2u_2')}_{=0} +$$

$$+(u_1'v_1+u_1v_1'-u_2'v_2-u_2v_2')(v_2(2\pi)-u_1(2\pi)) + (u_1v_1-u_2v_2)(v_2'(2\pi)-u_1'(2\pi))$$

$$u_1' = c^{-1} \int_0^{2\pi} dt (u_1v_1 - u_2v_2) \quad u_2' = c^{-1} \int_0^{2\pi} dt (u_1^2 + u_2^2)$$

$$v_1' = c^{-1} \int_0^{2\pi} dt (v_1^2 + v_2^2) \quad v_2' = c^{-1} \int_0^{2\pi} dt (u_2v_2 - u_1v_1)$$

$$-\frac{c^2}{2} \frac{d^2 D(E)}{dE^2} = \int_0^{2\pi} ds (v_1^2 + v_2^2) \int_0^{2\pi} dt (u_1^2 + u_2^2) - \left\{ \int_0^{2\pi} ds (u_1v_1 - u_2v_2) \right\}^2$$

$$\text{zu zeigen: } \int_0^{2\pi} (v_1^2 + v_2^2) ds \int_0^{2\pi} (u_1^2 + u_2^2) dt > \left\{ \int_0^{2\pi} (v_1^2 + v_2^2)^{1/2} (u_1^2 + u_2^2)^{1/2} ds \right\}^2 \geq \left\{ \int_0^{2\pi} |u_1v_1 - u_2v_2| ds \right\}^2$$

$$(v_1^2 + v_2^2)(u_1^2 + u_2^2) \geq |u_1v_1 - u_2v_2|^2$$

$$(v_1u_2 \pm v_2u_1)^2 \geq 0$$

Das Gleichheitszeichen in der Schwarzschen Ungleichung tritt nicht auf, da u, v linear unabhängig sind.

(3) Zusammenhang zwischen $D(E)$ und $H(\theta)$:

Setzt man die Komponenten der Eigenfunktionen von $H(\theta)$ von $[0, 2\pi]$ auf \mathbb{R} periodisch fort und wendet nun das Theorem A2 aus dem Anhang an, so sieht man, daß $\rho = e^{i\theta}$ sein muß. Für $D(E)$ erhält man wegen $D = \rho + \rho^{-1}$ die Bedingung:

$$D(E_n(\theta)) = 2\cos\theta \quad (24)$$

d. h.: $E_n(\theta)$ ist genau dann Eigenwert von $H(\theta)$, wenn diese Bedingung erfüllt ist.

Aus den Eigenschaften von $D(E)$ folgt nun:

- (i) $E_n(\theta)$ ist streng monoton in θ auf $(0, \pi)$.
- (ii) $E_n(\theta)$ ist stetig auf $(0, \pi)$.

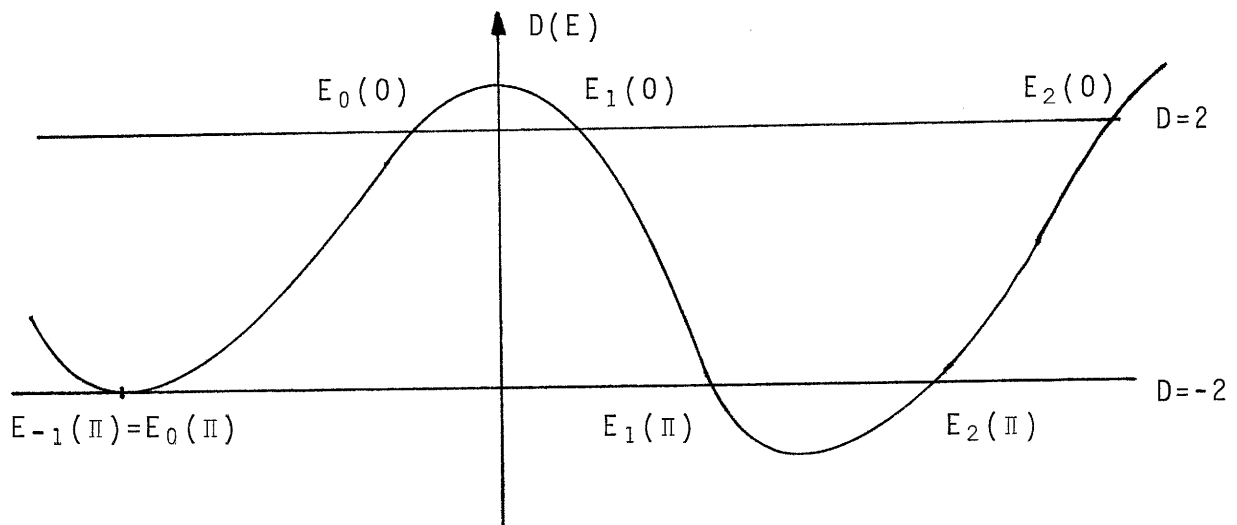
Differentiation von (24) ergibt:

$$\frac{dE}{d\theta} = \left(\frac{dD}{dE}\right)^{-1} (-2) \sin\theta$$

Die Ableitung existiert für $\theta \in (0, \pi)$.

Anmerkung: Es ergibt sich daraus sogar die Stetigkeit auf $[0, \pi]$, wenn man die Regel von de l'Hospital verwendet und beachtet, daß $\frac{d^2D}{dE^2} \neq 0$ ($|D|=2$) ist.

Der qualitative Verlauf von $D(E)$ ist daher:



(4) Klassifikationsschema und Analytizität der Eigenwerte $E(\theta)$

(i) Man nehme einen Eigenwert E von $H(\theta=0)$ mit $\frac{dD}{dE} \neq 0$

(wenn möglich den ersten positiven Eigenwert).

Dann hat man die zwei Möglichkeiten:

$$(a) \quad \frac{dD}{dE} < 0 \qquad (b) \quad \frac{dD}{dE} > 0$$

Im Falle von (b) nehme man den nächstgrößeren Eigenwert von $H(\theta=0)$ und man ist wieder bei (a). Diesen bezeichne man mit $E_1(0)$.

Es gilt: $E_1(0)$ ist einfach. Begründung: in jeder Umgebung U von $\theta=0$ existiert genau ein einfacher Eigenwert von $H(\theta)$. Die Annahme, daß $E_1(0)$ nicht einfach ist führt mit [9] Theorem XII.13 Seite 22 zur Folgerung, daß in jeder Umgebung mehr als nur ein Eigenwert existiert (für $\theta \neq 0$ sind die Eigenwerte einfach), und damit zu einem Widerspruch. Da $H(\theta)$ eine analytische Familie um $[0, 2\pi)$ ist, und $E_n(\theta)$ stetig ist, kann E_1 analytisch mit [9] Theorem XII.8 fortgesetzt werden, d. h. von $[0, \epsilon)$ auf $[0, \epsilon]$ (weil stetig) usw. bis $[0, \pi]$.

Nun betrachte man den nächstgrößeren Eigenwert von $H(\theta=0)$ und bezeichne ihn mit $E_2(0)$. Dann gibt es zwei Möglichkeiten. $E_2(0)$ ist zweifach entartet oder einfach. Ist $E_2(0)$ zweifach entartet, so wird die Entartung für $\theta \neq 0$ aufgehoben. Aus [9] Theorem XII.13 RS IV Seite 22 folgt dann, daß zwei analytische Funktionen in $U(\theta=0)$ existieren, bzw. mit [9] Theorem XII.8 eine Funktion $E_2(\theta)$ wenn $E_2(0)$ einfach ist. Ist $E_2(0)$ zweifach entartet bezeichne man die kleinere der beiden Funktionen mit $E_2(\theta)$. Analog wie im Fall von

$E_1(0)$ kann nun $E_2(0)$ auf $[0, \Pi]$ fortgesetzt werden. Durch fortgesetzte Anwendung dieses Verfahren können alle Eigenwerte von $H(\theta=0)$ die größer als $E_1(0)$ und auch die die kleiner als $E_1(0)$ sind auf $[0, \Pi]$ analytisch fortgesetzt werden. Für die kleineren geordneten Eigenwerte verwende man die Numerierung $n = 0, -1, -2, \dots$ usw.

(ii) Existiert kein Eigenwert von $H(\theta=0)$ mit $\frac{dD}{dE} \neq 0$ so nehme man einen Eigenwert von $H(\theta=\Pi)$ mit $\frac{dD}{dE} \neq 0$ (wenn möglich den ersten positiven) und klassifiziere analog zu (i).

(iii) Ist weder für $H(\theta=0)$ noch für $H(\theta=\Pi)$ ein Eigenwert mit $\frac{dD}{dE} \neq 0$ vorhanden (z. B. $m=0, v(x)=0$) so verfähre man folgendermaßen:

Man nehme den ersten positiven Eigenwert von $H(\theta=0)$. Da $\frac{d^2D}{dE^2} < 0$ ist, hat $D(E)$ ein lokales Maximum. Daraus folgt, daß in jeder Umgebung von $\theta = 0$ zwei einfache Eigenwerte, analytisch in θ , existieren und mit [9] Theorem XII.13 folgt, daß der Eigenwert zweifach entartet ist. Die größere der beiden Funktionen bezeichne man mit $E_1(\theta)$ und verfähre dann wie in (i). Insgesamt erhält man, wenn man die Monotonie von $E_n(\theta)$, $n \in \mathbb{Z}$ beachtet:

$$\dots E_{-1}(\Pi) \leq E_0(\Pi) < E_0(0) \leq E_1(0) < E_1(\Pi) \leq E_2(\Pi) < \dots$$

$$\dots E_{2n-1}(0) < E_{2n-1}(\Pi) \leq E_{2n}(\Pi) < \dots$$

(g) Dies folgt unmittelbar aus [9] Theorem XII.8 bzw. Theorem XII.13.

Theorem 2 ermöglicht nun die vollständige qualitative Analyse des Operators H .

3 Der nichtrelativistische Grenzwert des Diracoperators im Sinne der Resolventenkonvergenz und die Störungsentwicklung des Paulioperators in 1. Ordnung

Theorem 1 zeigt die unitäre Äquivalenz des Operators H aus Gleichung (1) mit dem Operator $H' := \hat{U}H\hat{U}^{-1}$. Dieser hat die direkte Integralzerlegung

$$H' = \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} H(\theta) \frac{d\theta}{2\pi}$$

Die Operatoren $H(\theta)$ haben ein rein diskretes Spektrum. Für diskrete Eigenwerte von Operatoren der Gestalt:

$$\begin{pmatrix} v_+(x) + mc^2 & cA^* \\ cA & v_-(x) - mc^2 \end{pmatrix}$$

auf $\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$; $A: \mathcal{H}_+ \rightarrow \mathcal{H}_-$; A abgeschlossen;

$v_+(x)$ (bzw. $v_-(x)$) relativ A -beschränkt (A^* -beschränkt);

$m, c \dots$ konstant

existiert ein allgemeines Konzept einer Störungstheorie (vgl. [4]).

Man kann damit zeigen, daß der Diracoperator gegen den Paulioperator (mal Projektor) im Sinne der Norm-Resolventenkonvergenz für $c^{-1} \rightarrow 0$ konvergiert, und daher eine Störungsentwicklung der Eigenwerte um den Punkt $c^{-1} = 0$ durchführen. Da die Bandkanten durch die einfachen Eigenwerte der Operatoren $H(\theta=0)$ und $H(\theta=\pi)$ gegeben sind, ergibt die Entwicklung dieser Eigenwerte die Verschiebung der Bandkanten.

Theorem 3 : Es sei $v(x)$ stückweise stetig, periodisch mit $v(x+2\pi)=v(x)$ und H der Operator (1). $E_n(0)$ ($n \in \mathbb{Z}$) seien die Eigenwerte des entsprechenden Operators $H(\theta=0)$ mit periodischen Randbedingungen und $E_n(\pi)$ die Eigenwerte des entsprechenden Operators $H(\theta=\pi)$ mit antiperiodischen Randbedingungen.

$$\alpha_n := \begin{cases} E_n(0) & n \text{ ungerade} \\ E_n(\pi) & n \text{ gerade} \end{cases} \quad \beta_n := \begin{cases} E_n(\pi) & n \text{ ungerade} \\ E_n(0) & n \text{ gerade} \end{cases}$$

dann gilt:

$$(a) \sigma(H) = \bigcup_{n=-\infty}^{\infty} [\alpha_n, \beta_n].$$

(b) H hat keine Eigenwerte.

(c) Das Spektrum von H ist rein absolut stetig.

Beweis : (a) [9] Theorem XIII.85 d besagt:

$$E \in \sigma(H) \Leftrightarrow \forall \varepsilon > 0 : \mu(\{\theta / \sigma(H(\theta)) \cap (E-\varepsilon, E+\varepsilon)\}) > 0$$

$E_n(\theta)$ stetig heißt:

Für θ_0, ε gegeben existiert ein $\delta > 0$ mit

$$|\theta_0 - \theta| < \delta \Rightarrow |E_n(\theta_0) - E_n(\theta)| < \varepsilon$$

Es gilt daher $\mu \geq \delta > 0$.

(b) [9] Theorem XIII.85 e besagt:

$$E_0 \in \sigma_d(H) \Leftrightarrow \mu(\{\theta / E_0 \in \sigma_d(H(\theta))\}) > 0$$

Die Menge $\{\theta / E_n(\theta) = E_0\}$ besteht wegen der

Monotonie der $E_n(\theta)$ aus maximal 2 Punkten.

Jede abzählbare Menge hat aber das Lebesguemaß 0.

(c) folgt aus [9] Theorem XIII.86. Die Voraus-

setzungen sind laut Theorem 2 erfüllt.

Anmerkung:

Für $c^{-1} \rightarrow 0$ kann aus der Eigenschaft der strengen Monotonie von $D(E, c)$ ($|D| < 2$) nur Monotonie von $D(E, c^{-1} \rightarrow 0)$ gefolgert werden. Weiters gilt, wie das folgende Lemma zeigt, daß $\lambda_0 \in \sigma(H_+(\theta))$ genau dann ist, wenn eine Folge $\lambda(c) \in \sigma(H(\theta) - mc^2)$ existiert mit $\lambda(c) \rightarrow \lambda_0$. Auch für $H_+(\theta)$ gilt die strenge Monotonie der Eigenwerte $E_n(\theta)$, $\theta \in (0, \pi)$ ([9] Theorem XIII.89). Daraus folgt, daß auch für $c^{-1} \rightarrow 0$ die Bandkanten durch die einfachen Eigenwerte der Operatoren $H_+(\theta)$ für $\theta = 0$ und $\theta = \pi$ gegeben sind.

Konkret gilt:

$$H' = \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} H(\theta) \frac{d\theta}{2\pi}$$

Der Operator $H(\theta)$ erfüllt die Voraussetzungen von [4] mit:

$$A = A^* = p_\theta \quad \text{und} \quad v_+ = v_- = v(x)$$

$$\mathcal{H}_+ = \mathcal{H}_- = L^2([0, 2\pi])$$

und es gilt daher für $H(\theta)$ das Theorem 2.1 und Korollar 2.1 aus [4]:

Lemma: Für $c^{-1} \rightarrow 0$ konvergiert der Operator $(H(\theta) - mc^2)$ (Ruheenergie subtrahiert) gegen den Paulioperator $H_+(\theta)$ mal dem Projektor auf $L^2([0, 2\pi], dx)$ im Sinne der Resolventenkonvergenz.

$$\lim_{|c| \rightarrow \infty} (H(\theta, c) - mc^2 - z)^{-1} = (H_+(\theta) - z)^{-1} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

wobei $H_+(\theta) = (2m)^{-1} p_\theta^2 + v(x)$ ist.

$\lambda_0 \in \sigma(H_+(\theta))$ genau dann wenn eine Folge $\lambda(c) \in \sigma(H(\theta) - mc^2)$ existiert mit $\lambda(c) \rightarrow \lambda_0$ ($c^{-1} \rightarrow 0$)

Der Operator
$$U^{-1} \left[\int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} \left(\frac{p^2}{2m} \theta + v(x) \right) \frac{d\theta}{2\pi} \right] U$$

wird in [9] Theorem XIII.90 vollständig behandelt (wobei $m=1/2$ gesetzt ist).

Anmerkung: [4] Theorem 2.1 und Korollar 2.1 sind nicht nur auf $H(\theta)$ sondern auch direkt auf H' oder H anwendbar. Es gilt:

$$(H' - mc^2 - z)^{-1} = \int_{[0, 2\pi)}^{\oplus} (H(\theta) - mc^2 - z)^{-1} \frac{d\theta}{2\pi}$$

([9] Theorem XIII.85 c)

$$\text{und } (H' - mc^2 - z)^{-1} = \hat{U} (H - mc^2 - z)^{-1} \hat{U}^{-1}$$

$$\text{da } (H' - mc^2 - z) = \hat{U} (H - mc^2 - z) \hat{U}^{-1}$$

Zur Berechnung der Verschiebung der Bandkanten wird [4] Theorem 2.2 verwendet:

Lemma: Es sei $E_{0,n}(\theta)$ ein diskreter einfacher Eigenwert von

$$H_+(\theta) \text{ mit : } H_+(\theta) f_{0,n}(\theta, x) = E_{0,n}(\theta) f_{0,n}(\theta, x)$$

mit $\|f_{0,n}(\theta, x)\| = 1$, dann gilt für c^{-2} genügend klein:

Es existiert genau ein einfacher Eigenwert $E_n(\theta, c^{-2})$ von

$H(\theta) - mc^2$ in einer Umgebung von $c^{-2} = 0$ der holomorph in

c^{-2} ist mit:

$$E_n(\theta, c^{-2}) = E_{0,n}(\theta) + \frac{1}{c^2} E_{1,n}(\theta) + O\left(\frac{1}{c^4}\right)$$

wobei $E_{1,n}(\theta) = \left(\frac{1}{2m}\right)^2 \left\langle f'_{0,n}(\theta, x), (v(x) - E_{0,n}(\theta)) f'_{0,n}(\theta, x) \right\rangle$ ist.

Für $\theta=0, \pi$ ergibt sich damit die Verschiebung der Bandkanten.

Ist $E_{0,n}(\theta)$ ein zweifacher Eigenwert von $H_+(\theta)$ (ist nur für $\theta=0, \pi$ möglich) so besteht die Möglichkeit, daß die Entartung aufgehoben wird und ein Band in zwei Bänder zerfällt. Dazu verwendet man Theorem 2.2 b aus [4] in der erweiterten Form von [12].

Lemma: Es sei $E_{0,n}(\theta)$ ein diskreter Eigenwert von $H_+(\theta)$ ($\theta=0, \pi$) mit der Multiplizität 2 wobei

$$H_+(\theta)f_{0,n,l}(\theta, x) = E_{0,n}(\theta)f_{0,n,l}(\theta, x), \quad l=1,2$$

Dann hat der Operator $(H(\theta)-mc^2)$ in einer Umgebung von $c^{-2}=0$ j verschiedene Eigenwerte $E_{n,k}(\theta, c^{-2})$ $k=1, j$ $j \leq 2$ und es gilt:

die $E_{n,k}(\theta, c^{-2})$ sind holomorph in c^{-2} um $c^{-2}=0$.

$$E_{n,k}(\theta, c^{-2}) = E_{0,n}(\theta) + \frac{1}{c^2} E_{n,k,1}(\theta) + O\left(\frac{1}{c^4}\right)$$

([12] Satz 3.7)

Für $E_{n,k,1}(\theta)$ gilt: ([12] Satz 3.8)

Die $E_{n,k,1}(\theta)$ sind die Eigenwerte der selbstadjungierten Matrix (b_{iq}) : $i=1,2 \quad q=1,2$

$$(b_{iq}) = \left(\frac{1}{2m}\right)^2 \left(\langle f'_{0,n,i}(\theta, x), (v(x) - E_{0,n}(\theta)) f'_{0,n,q}(\theta, x) \rangle \right)$$

wobei die Vektoren $f_{0,n,l}(\theta, x)$ eine Basis des Eigenraumes zum Eigenwert $E_{0,n}(\theta)$ bilden, $l=1,2$.

4 Zusammenfassung

Der Diracoperator mit periodischem Potential H ist mit dem Translationsoperator um 2π vertauschbar. (Dieser Gruppentheoretische Hintergrund, der ganz allgemein für Differentialoperatoren mit periodischen Koeffizienten gilt, wurde schon früh unbewußt verwendet: in der Mathematik 1883 von Floquet und dann 50 Jahre später in der Physik von Bloch.)

Daher ist eine direkte Integralzerlegung des Diracoperators mit periodischem Potential möglich. Die dabei erhaltene Schar von Operatoren $H(\theta)$ bildet eine analytische Familie im Sinne von Kato für $\theta \in [0, 2\pi)$. Weiters ist das Spektrum dieser Operatoren rein diskret, und die Eigenwerte sind analytisch in θ und streng monoton auf $(0, \pi)$. Die Summe dieser Eigenschaften ermöglicht es in Theorem 3 zu zeigen, daß das Spektrum des Operators H rein absolut stetig ist und aus Bändern $[\alpha_n, \beta_n]$ besteht.

Da der Diracoperator nicht halbbeschränkt ist, existiert kein Grundzustand und nicht notwendigerweise ein Zustand, der einfach ist. Deshalb wird bei den Beweisen abweichend von [9] auf klassische Methoden zurückgegriffen. Auch dort ergeben sich durch die allgemeinere Struktur der Differentialgleichung (14) zusätzliche Schwierigkeiten, die aber leicht zu lösen sind.

Da die $H(\theta)$ ein rein diskretes Spektrum haben und für diskrete Eigenwerte der Diracgleichung in [4] ein allgemeines Konzept einer Störungstheorie entwickelt wurde, kann ohne Schwierigkeiten eine Störungsentwicklung der Bandkanten um den nichtrelativistischen Grenzfall (Resolventenkonvergenz) durchgeführt werden.

Anhang

A Direktes Integral

Es sei M ein lokal bikompakter Raum mit dem Maß μ , das als Träger M hat, und $C(M)$ die Menge der beschränkten stetigen Funktionen auf M . Jedem Punkt $t \in M$ sei ein Hilbertraum $H(t)$ zugeordnet. Eine Menge S von vektorwertigen Funktionen $f=f(t)$ mit Werten aus $H(t)$ nennt man Basis des topologischen direkten Integrals, wenn S folgende Bedingungen erfüllt:

- (1) Für alle $f(t), g(t) \in S$ ist das Skalarprodukt $\langle f(t), g(t) \rangle$ eine stetige und nach μ integrierbare Funktion auf M .
- (2) Die Menge S ist linear: $f(t), g(t) \in S \Rightarrow af(t) + bg(t) \in S$ wobei $a, b \in \mathbb{K}$.
- (3) Für $f(t) \in S$ und $x=x(t) \in C(M)$ gehört die Vektorfunktion $xf \ni x(t)f(t)$ zu S .
- (4) Für jedes feste $t_0 \in M$ ist die Menge der Vektoren $f(t_0)$, $f(t) \in S$ dicht in $H(t_0)$.

Definiert man das Skalarprodukt in S durch

$$\langle f, g \rangle = \int_M \langle f(t), g(t) \rangle d\mu(t)$$

so wird S zu einem Prähilbertraum. Die vollständige Hülle dieses Raumes nennt man das topologische direkte Integral der Räume $H(t)$ bezüglich μ und schreibt:

$$H = \int_M^{\oplus} H(t) d\mu$$

Einfache Beispiele:

- a) Das Maß μ auf M sei diskret und M abzählbar, d. h. $\mu(t)=1$, $t \in M$. Dann ist H als direkte Summe darstellbar:

$$H = \bigoplus_{i=0}^{\infty} H_i$$

b) Der Hilbertraum $H(t)$ ist konstant, d. h. $H(t) = H^1$.

Dann gilt:

$$H = L^2(M, d\mu; H^1)$$

d. h. $g \in H$ ist eine hilbertraumwertige Funktion, (vgl. RS1 Seite 40, Beispiel 6).

Im Folgenden wird nur der Spezialfall b) betrachtet.

Definition: Ein beschränkter Operator A auf $H = \int_M^\oplus H^1 d\mu$

heißt zerlegbar in eine direkte Integralzerlegung, genau dann wenn eine Funktion $A(\cdot)$ in $L^\infty(M, d\mu; B(H^1))$ existiert, sodaß für alle $f \in H$ gilt:

$$(Af)(m) = A(m)f(m)$$

Man schreibt dann

$$A = \int_M^\oplus A(m) d\mu(m)$$

und nennt die $A(m)$ die Fasern von A .

Für unbeschränkte Operatoren benötigt man folgende Definition:

Definition: Eine nicht notwendigerweise beschränkte Funktion $A(\cdot)$ vom Maßraum M in die selbstadjungierten Operatoren eines Hilbertraumes H^1 heißt meßbar, genau dann wenn die Funktion $(A(\cdot) + i)^{-1}$ meßbar ist. Ist eine solche Funktion gegeben, definiert man den Operator A auf $H = \int_M^\oplus H^1 d\mu$ mit dem Definitionsbereich:

$$D(A) = \left\{ f \in H, f(m) \in D(A(m)) \text{ a.e.}; \int_M \|A(m)f(m)\|_H^2 d\mu(m) < \infty \right\}$$

durch $(Af)(m) = A(m)f(m)$

und schreibt $A = \int_M^\oplus A(m) d\mu$

Die Eigenschaften solcher Operatoren werden im folgenden Theorem zusammengefaßt.

Theorem A1 : Sei $A = \int_M^{\oplus} A(m) d\mu$ wobei $A(\cdot)$ meßbar und $A(m)$

selbstadjungiert für alle m ist. Dann gilt:

- (a) Der Operator A ist selbstadjungiert.
 (b) Ein selbstadjungierter Operator A hat genau dann die Form $A = \int_M^{\oplus} A(m) d\mu$, wenn $(A+i)^{-1}$ ein beschränkter zerlegbarer Operator ist.
 (c) Für jede beschränkte und meßbare Funktion F auf \mathbb{R} gilt:

$$F(A) = \int_M^{\oplus} F(A(m)) d\mu$$

- (d) $\lambda \in \sigma(A)$ genau dann, wenn für alle $\varepsilon > 0$ gilt:

$$\mu(\{m / \sigma(A(m)) \cap (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \neq \emptyset\}) > 0$$

- (e) λ ist genau dann ein Eigenwert wenn:

$$\mu(\{m / \lambda \text{ ist Eigenwert von } A(m)\}) > 0$$

- (f) Hat jeder Operator $A(m)$ ein rein absolut stetiges Spektrum, so hat es auch A .

- (g) Sei $B = \int_M^{\oplus} B(m) d\mu$ wobei die $B(m)$ selbstadjungiert für alle m sind. Ist B A -beschränkt mit A -Schranke a , dann ist $B(m)$ a.e. $A(m)$ -beschränkt mit $A(m)$ -Schranke $a(m) \leq a$. Ist $a < 1$, dann ist

$$A+B = \int_M^{\oplus} (A(m)+B(m)) d\mu \quad \text{selbstadjungiert auf } D(A).$$

Beweis: RS IV Theorem XIII.85 Seite 284

B Floquettheorie

Es wird spezialisiert auf ein System von 2 linearen Differentialgleichungen 1. Ordnung.

$$(a) \quad y'(x) = C(x)y(x)$$

$$\text{wobei } y(x) = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{pmatrix}, \quad C(x) = \begin{pmatrix} c_{11}(x) & c_{12}(x) \\ c_{21}(x) & c_{22}(x) \end{pmatrix}$$

und $C(x+a) = C(x)$; Periode: a

Theorem A2 : Es gibt eine Konstante $\rho \neq 0$ und eine nicht-triviale Lösung von (a), sodaß gilt:

$$y(x+a) = \rho y(x)$$

Beweis: Es sei $Y(x) = \begin{pmatrix} u_1(x) & v_1(x) \\ u_2(x) & v_2(x) \end{pmatrix}$ ein Lösungssystem

$$\text{mit } Y(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Es gilt: } Y(x+a) = \begin{pmatrix} u_1(x) & v_1(x) \\ u_2(x) & v_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = Y(x)A$$

Koeffizientenvergleich ergibt für A :

$$A = \begin{pmatrix} u_1(a) & v_1(a) \\ u_2(a) & v_2(a) \end{pmatrix}$$

Allgemein gilt für eine Lösung:

$$y(x) = Y(x)b \quad b = (b_1 \ b_2)^t$$

Da $y(x+a) = \rho y(x)$ gelten soll, folgt:

$$Y(x+a)b = \rho Y(x)b$$

$$Y(x)A b = \rho Y(x)b$$

$$|A - \rho I| = 0$$

$$(A3) \rho^2 - \rho \text{tr}A + \det A = 0$$

Zwischenbemerkung: Die Jordansche Normalform von A :

(a) Es sei $\rho_1 \neq \rho_2$: dann gilt: es existiert eine reguläre Matrix J und

$$A = J \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 \\ 0 & \rho_2 \end{pmatrix} J^{-1}$$

(b) Es sei $\rho_1 = \rho_2 = \rho$: dann gilt:

$$(b1) \quad A = J \begin{pmatrix} \rho & 0 \\ 0 & \rho \end{pmatrix} J^{-1} \quad \text{oder}$$

$$(b2) \quad A = J \begin{pmatrix} \rho & 1 \\ 0 & \rho \end{pmatrix} J^{-1}.$$

Anmerkung: Man vergleiche dazu z. B.: RS IV Seite 10 und Seite 69 Beispiel 4.

Theorem A4 : Es existieren linear unabhängige Lösungen der Differentialgleichung (a) $y_1(x), y_2(x)$ sodaß gilt:

$$\text{bei (a)} \quad y_1(x) = e^{m_1 x} p_1(x) \quad y_2(x) = e^{m_2 x} p_2(x)$$

bei (b1) wie im Fall (a), jedoch mit $m_1 = m_2$

$$\text{bei (b2)} \quad y_1(x) = e^{m x} p_1(x) \quad y_2(x) = e^{m x} (x p_1(x) + p_2(x))$$

Beweis: Eastham Theorem 1.5.2 Seite 13.

($y_i(x)$ und $p_i(x)$ sind zweikomponentig, $i = 1, 2$)

Klassifikation der Lösungen für den Fall $\det A = 1$:

$$\rho^2 - \text{tr}A \rho + 1 = 0$$

$$\text{tr}A = u_1(a) + v_2(a) =: D \quad \text{Diskriminante}$$

$$(A) \quad D > 2 : \quad \rho_1 = e^{am} \quad \rho_2 = e^{-am} \quad m \in \mathbb{R}$$

$$y_1(x) = e^{mx} p_1(x) \quad y_2(x) = e^{-mx} p_2(x)$$

(B) $D < -2$: da $\rho_i < 0$ ersetzt man m durch $m + i\pi/a$

(C) $-2 < D < 2$: ρ_1, ρ_2 sind konjugiert komplex und $|\rho_i| = 1, i=1,2$

$$\rho_1 = e^{i\alpha} \quad \rho_2 = e^{-i\alpha} \quad 0 < \alpha < \pi$$

$$y_1(x) = e^{i\alpha x} p_1(x) \quad y_2(x) = e^{-i\alpha x} p_2(x)$$

(D) $D = 2$: $\rho_1 = \rho_2 = 1$

(i) $v_1(a) = u_2(a) = 0$: $y_1(x) = p_1(x) \quad y_2(x) = p_2(x)$

(ii) $v_1(a), u_2(a)$ nicht beide gleichzeitig null:

$$y_1(x) = p_1(x) \quad y_2(x) = xp_1(x) + p_2(x)$$

(E) $D = -2$: $\rho_1 = \rho_2 = -1$

(i) $v_1(a) = u_2(a) = 0$:

$$y_1(x) = e^{i\pi x/a} p_1(x) \quad y_2(x) = e^{i\pi x/a} p_2(x)$$

(ii) $v_1(x), u_2(x)$ nicht beide gleichzeitig null:

$$y_1(x) = e^{i\pi x/a} p_1(x) \quad y_2(x) = e^{i\pi x/a} (xp_1(x) + p_2(x))$$

(F) D kann auch komplex werden.

C Systeme gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen 1. Ordnung

Für die Behandlung linearer Differentialgleichungssysteme vergleiche man W.Walter Kap.III §§ 14,15,16.

Form: $y'(x) = A(x)y(x) + b(x)$

Ist $b(x) = 0$, dann ist das System homogen.

Lösungsmatrix: $Y(x) = (y_1(x) \dots y_n(x))$
wobei die $y_i(x)$, $i=1, n$ linear unabhängige
Lösungen sind.

Wronskideterminante: $W(y_1(x) \dots y_n(x)) := \det Y(x)$

Satz A5 : Das Anfangswertproblem $y'(x) = A(x)y(x) + b(x)$, $y(x_0) = y_0$
hat die eindeutig bestimmte Lösung

$$y(x) = X(x)y_0 + \int_{x_0}^x X(x)X^{-1}(s)b(s) ds$$

wobei $X(x)$ das Fundamentalsystem der homogenen
Differentialgleichung mit $X(x_0) = 1$ ist.

Beweis: W.Walter §16 Seite 116 Satz III

Komplexe Systeme

$$z'(t) = B(t)z(t) + h(t) \quad \text{ist äquivalent zu}$$

$$u'(t) = A(t)u(t) + e(t) \quad \text{wobei}$$

$z(t) = x(t) + iy(t)$, $h(t) = c(t) + id(t)$, $B(t) = C(t) + iD(t)$ und

$$u = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad e = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} C & -D \\ D & C \end{pmatrix} .$$

Ein komplexes System n -ter Ordnung ist daher äquivalent
einem reellen System $2n$ -ter Ordnung von obiger Form.

Dies wird nun auf die Differentialgleichung (14) angewendet.

Als Abkürzungen definiert man: $a := -(v(t) - mc^2 - E)/c$

$b := -(v(t) + mc^2 - E)/c$

$$z'(t) = \begin{pmatrix} 0 & ia \\ ib & 0 \end{pmatrix} z(t)$$

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ y_1' \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -a \\ 0 & 0 & -b & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

Diese Gleichung zerfällt in:

$$(i) \quad \begin{pmatrix} x_1' \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -a \\ b & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (ii) \quad \begin{pmatrix} -y_1' \\ x_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -a \\ b & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -y_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Ist $(u \ v)$ ein Fundamentalsystem von (i) so ist es auch eines von (ii); wobei gelten soll: $(u(0) \ v(0)) = 1$.

Man erhält daher als Fundamentalsystem insgesamt:

$$Y = \begin{pmatrix} u_1 & \tilde{v}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_2 & v_2 \\ 0 & 0 & -u_1 & -\tilde{v}_1 \\ u_2 & v_2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \det Y = 1$$

Als Fundamentalsystem für das komplexe System erhält man:

$$(A6) \quad Y(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) & iv_1(t) \\ iu_2(t) & v_2(t) \end{pmatrix} \quad \text{mit } Y(0) = 1, \quad v_1 = -\tilde{v}_1$$

Anmerkung: Spalte (1) und Spalte (3) sind im Komplexen linear abhängig; $(1) = i(3)$.

D Störungstheorie für das diskrete Spektrum von Operatoren

Definition: Eine operatorwertige Funktion $T(s)$, $s \in G \subset \mathbb{C}$ heißt eine analytische Familie (im Sinne von Kato) genau dann, wenn:

- (i) Für jedes $s \in G$ ist $T(s)$ abgeschlossen, und die Resolventenmenge ist nicht leer.
- (ii) Für jedes $s_0 \in G$ existiert ein $z_0 \in \rho(T(s_0))$, sodaß $z_0 \in \rho(T(s))$ für s in einer Umgebung U von s_0 ist, und weiters $(T(s) - z_0)^{-1}$ eine analytische operatorwertige Funktion von s in einer Umgebung von s_0 ist.

Theorem A7 : Es sei $T(s)$ eine analytische Familie im Sinne von Kato . E_0 sei ein nichtentarteter diskreter Eigenwert von $T(s_0)$. Dann existiert für $s \in U(s_0)$ genau ein Wert $E(s)$ von $\sigma(T(s))$ mit $E(s) \in U(E_0)$, wobei $E(s)$ diskret und nicht entartet ist. $E(s)$ ist eine analytische Funktion von s für $s \in U(s_0)$, und auch der Eigenvektor $f(s)$ ist analytisch für $s \in U(s_0)$. Ist $T(s)$ selbstadjungiert für $s - s_0$ reell, dann können die Eigenvektoren $f(s)$ normiert gewählt werden für $s - s_0$ reell.

Beweis: RS IV Theorem XII.8 , Seite 15.

Theorem A8 : Es sei $T(s)$ eine analytische Familie im Sinne von Kato für $s \in U(0)$ die selbstadjungiert ist für s reell. E_0 sei ein diskreter Eigenwert mit der Vielfachheit m . Dann existieren m (nicht notwendigerweise verschiedene) analytische Funktionen für $s \in U(0)$, $E^1(s), \dots, E^m(s)$ mit $E^k(0) = E_0$, sodaß $E^1(s), \dots, E^m(s)$ Eigenwerte von $T(s)$ für $s \in U(0)$ sind. Weiters gilt, daß dies die einzigen Eigenwerte $E \in U(E_0)$ sind.

Beweis: RS IV Theorem XII.13 , Seite 22.

Anmerkung: Aus dem Beweis folgt auch die Analytizität der Eigenvektoren $f^k(s)$ für $s \in U(0)$.

LITERATURVERZEICHNIS

- 1 Amrein, W.O. und Jauch, J.M. und Sinha, K.B. : Scattering theory in quantum mechanics. W.A. Benjamin, Inc. (1977)
- 2 Berthier, A.M. : Spectral theory and wave operators for the schrödinger equation. Pitman (1982)
- 3 Eastham, M.S.P. : The spectral theory of periodic differential equations. Scottish Academic Press (1973)
- 4a Gesztesy, F. und Grosse, H. und Thaller, B. : A rigorous approach to relativistic corrections of bound state energies for spin-1/2 particles. Ann. Inst. Henri Poincaré A 40, 159 (1984)
- b An efficient method for calculating relativistic corrections for spin-1/2 particles. Phys. Rev. Lett., 50, 625 (1983)
- 5 Großmann, S. Funktionalanalysis II. Akademische Verlagsgesellschaft (1977)
- 6 Kato, T. : Perturbation theory for linear operators. Springer, New York (1966)
- 7 Reed, M. und Simon, B. : Methods of modern mathematical physics Vol. I Functional analysis (1972)
- 8 Vol. II Fourier analysis, self-adjointness (1975)
- 9 Vol. IV Analysis of operators (1979)
Academic Press, New York
- 10 Walter, W. : Gewöhnliche Differentialgleichungen. Springer (1976)
- 11 Weidmann, J. : Lineare Operatoren in Hilberträumen Teubner (1976)
- 12 Wiegner, A. : Über den nichtrelativistischen Grenzwert der Eigenwerte der Diracgleichung. Diplomarbeit, Fernuniversität-Gesamthochschule - Hagen (1984)