EIN MODELL FÜR DIE PRÄDISSOZIATION VON DIATOMISCHEN MOLEKÜLEN

DIPLOMARBEIT

angefertigt bei Prof.Dr. K.E.Hellwig
und Prof.Dr. R.Seiler

von Joachim Asch

Matr.Nr. 64527

Technische Universität Berlin 1985
Fachbereich Physik

Inhalt

1. Einleitung

1.1 Problemstellung und Zusammenfassung

Gegenstand der Arbeit ist die Behandlung der Prädissoziation (P.d.) von Molekülen anhand eines Modells im Rahmen der strengen Schrödingertheorie.

Mit P.d. wird die heuristische Vorstellung des strahlungslosen Zerfalls von diatomischen Molekülen durch Übergang in nichtbindende Elektronenzustände bezeichnet [H,VII.2], [LL,XI.90], c.f. auch 1.2 .

Spektroskopisch äußern sich solche Dissoziationsvorgänge einerseits durch diffuse Banden (das sind Banden ohne feststellbare Feinstruktur) in Absorptionsspektren, andererseits durch Intensitätsschwächung in gewissen Bereichen von Emissionsspektren [H,II.1] .

Der Heuristik entsprechend, sollten derartige Zerfallsprozesse durch Resonanzen des Molekülhamiltonoperators zu beschreiben sein, i.e. Energie und Breite der Banden sind durch einen Pol eines geeignet auf ein zweites Blatt fortgesetzten Matrixelementes der Resolvente gegeben [RSIV,Ch.XII.6]. Die Existenz solcher Resonanzen ist mathematisch nicht gezeigt.

Für den hier als Modell betrachteten Matrixoperator $\mathbb{H}$ in $L^2(R^+) \oplus L^2(R^+)$ mit dem Symbol

$$\begin{pmatrix} -k^4\Delta + V_D & k^4 \\ k^4 & -k^4\Delta + V_C \end{pmatrix}$$

(zur Definition c.f. 1.2, 2.1), lassen sich Resonanzen beschreiben.

Dieses geschieht in Anlehnung an die "complex-scaling" Technik für Einteilchenschrödingeroperatoren [AC,71],[S,72]. Für Potentiale V_D und V_C, die den in 2.1 angegebenen Regularitätsbedingungen genügen, definieren wir Resonanzen von $\mathbb{H}$ als Eigenwerte eines nicht selbstadjungierten Operators $\mathbb{H}(\theta)$.

Für ein Beispiel wird eine Approximation von "P.d."Resonanzen berechnet. Es zeigt sich ein, von dem der "shape"Resonanzen (Zerfall vermöge tunneln durch einen Potentialwall [CDS,84]) abweichendes Verhalten im Parameter k.

1.2 Das adiabatische Modell für die Molekülenergie

Spektraluntersuchungen von diatomischen Molekülschrödingeroperatoren werden üblicherweise in der Born-Oppenheimer Approximation durchgeführt. Dabei wird das Moleküleigenwertproblem durch eines für einen Matrixoperator ersetzt, der die Bewegung der Kerne in einem effektiven Potential beschreibt, welches die Elektronenfreiheitsgrade beinhaltet.

Wir zitieren in diesem Abschnitt einige strenge Resultate aus [CDS,81].

In Koordinaten des Massezentrums der Kerne (CMNS) wird als der Hamiltonoperator von N+2 "Teilchen" (A,B,1..N) mit Massen $(m_A, m_B, m_i=1)$, Ladungen $(Z_A, Z_B, -(e=1))$ und Coulombwechselwirkungen betrachtet:

$$H(k) := \frac{k^4}{2}\left(p^2 + r\left(\sum_1^N p_i\right)^2\right) + H^{el}(x) \qquad D(H(k)) = \mathcal{H}^2(R^{3(N+1)})$$

$$H^{el}(x) := \frac{1}{2}\sum_1^N p_i^2 - \sum \frac{Z_A}{|s_A x - x_i|} - \sum \frac{Z_B}{|s_B x + x_i|} + \sum \frac{1}{|x_i - x_j|} + \frac{Z_A Z_B}{|x|} .$$

Die Bewegung des Gesamtmassezentrums ist bereits absepariert. Es sind dabei:

x, p die Operatoren der Relativkoordinate und des Impulses der Kerne,

x_i, p_i die, der Koordinaten und Impulse der Elektronen im Massezentrum der Kerne,

$k^4 := m_A^{-1} + m_B^{-1}$, $r := m_A m_B (m_A + m_B)^{-2}$, $s_{A,B} := m_{A,B}(m_A + m_B)^{-1}$, $Z_{A,B} \in N$.

Für die strenge Behandlung der Approximation wird folgende technische Vorraussetzung benötigt:

Annahme: Es existiert $\delta > 0$ und eine glatte Funktion

$$\varepsilon: R^+ \to R \text{ mit } \mathrm{dist}[\varepsilon(|x|), \sigma(H^{el}(x)] \geq \delta \quad (x \in R^3 \setminus (0)).$$

Bem.: Es gilt:

$$\sigma(H^{el}(x)) \cap (-\infty, \varepsilon(|x|)) \subset \sigma_d(H^{el}(x)) \qquad (x \in R^3 \setminus (0)).$$

Motiviert durch die Kleinheit von k für physikalische Werte von m_A, m_B wird nun der "adiabatische" Operator H^{AD} definiert.

Def.:

Sei $P(x):=P^{H^{el}(x)}_{(-\infty,\varepsilon(|x|))}$

der Spektralprojektor von $H^{el}(x)$ $(x\in R^3)$ aufgefaßt als Operator in $L^2(R^{3N})$.

In $L^2(R^{3(N+1)}) \simeq \int_{\oplus} dx\, L^2(R^3)$ sei dann:

(i) $P^{AD}:=\int_{\oplus} dx\, P(x)$

(ii) $H^{AD}(k):= P^{AD}H(k)P^{AD}$, $D(H^{AD}(k)):=P^{AD}\mathcal{H}^2(R^{3(N+1)})\oplus QL^2(R^{3(N+1)})$

Dabei ist $P^{AD}+Q:=1$.

Bem.:

Wegen der Annahme gilt dim Ran$(P(x))=n$ (n geeignet, $x\in R^3\setminus(0)$)

Weiterhin gilt:

Satz:

$H^{AD}(k)$ ist selbstadjungiert.

In [CDS,81] für den Fall dim Ran$(P(x))=1$,
in [E,85] für dim Ran$(P(x))=2$ ist das folgende, für die Spektraluntersuchung von $H(k)$ grundlegende Ergebnis gezeigt:

Satz E:

Sei $E_j^{AD}(k) \in \sigma_d(H^{AD}(k)) \cap (-\infty, \inf\varepsilon(|x|))$ der j-te Eigenwert von $H^{AD}(k)$ (vom tiefsten mit Multiplizität gezählt),

$E_j(k) \in \sigma_d(H(k)) \cap (-\infty, \inf\varepsilon(|x|))$ der j-te Eigenwert von $H(k)$, dann gilt

$$E_j(k) - E_j^{AD}(k) = o(k^6) \quad (k\to 0).$$

Für die unteren Eigenwerte von $H(k)$ ist in diesem Sinn also der Fehler der Approximation durch $H^{AD}(k)$ kontrolliert.

Um weitere Aussagen zu erhalten, wird $H^{AD}(k)$ isomorph auf einen Matrixoperator $\mathbb{H}(k)$ für die Kernbewegung abgebildet.

Satz:

Sei $n := \dim \operatorname{Ran}(P(x)) \quad (x \in R^3 \setminus (0))$.

Es existiert eine Familie

$$((e_i(x))_{i \in (1..n)})_{x \in R^3 \setminus (o)} \text{ mit:}$$

$(e_i(x))_{i \in (1..n)}$ ON-Basis von $\operatorname{Ran}(P(x))$ so, daß gilt:

(i) $J : P^{AD}(\int_{\oplus} dx \; L^2(R^{3N})) \rightarrow \bigoplus_1^N L^2(R^3)$

$$\psi(x,.) \mapsto \begin{pmatrix} (e_1(x)(.) \; , \; \psi(x,.)) \\ \vdots \\ (e_n(x)(.) \; , \; \psi(x,.)) \end{pmatrix}$$

ist unitär.

$(.,.)$ bezeichnet hier das Skalarprodukt in $L^2(R^{3N})$.

(ii) $JH^{AD}(k)J^{-1}$ ist wohldefiniert und selbstadjungiert.

Dann sei definiert:

$$H(k) := JH^{AD}(k)J^{-1} = \tfrac{1}{2}k^4 (-\boldsymbol{\Delta}_x + \mathbb{T}_{eff}) + \mathbb{V}_{eff} \quad \text{mit}$$

$$(-\boldsymbol{\Delta}_x)_{mn} := -\Delta_x \, \delta_{mn}$$

$$(\mathbb{T}(x))_{\substack{mn \\ eff}} := (e_m(x) \; , \; [-\Delta_x + r(\Sigma p_i)^2] e_n(x)) \\ -2(e_m(x) \; , \; i\nabla_x e_n(x)) i\nabla_x$$

$(\mathbb{V}_{eff}(x))_{mn} := E_m(x) \delta_{mn}$, wobei hier $E_m(x)$ der m-te Eigenwert von $H^{el}(x)$ ist.

Nun wird die Heuristik der Prädissoziation deutlich:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}(k) &= \tfrac{1}{2}k^4(-\boldsymbol{\Delta}_x) + \mathbb{V}_{eff} && + \tfrac{1}{2}k^4 \mathbb{T}_{eff} \\ &= \bigoplus_1^n -\tfrac{1}{2}k^4 \Delta_x + E_l && + \tfrac{1}{2}k^4 \mathbb{T}_{eff} \\ &=: \bigoplus_l h_l(k) && + \tfrac{1}{2}k^4 \mathbb{T}_{eff} \; , \end{aligned}$$

ein in das kontinuierliche Spektrum eingebetteter Eigenwert E von $\bigoplus_l h_l$ mit $E \in \sigma_d(h_l)$ (l geeignet) kann durch die Störung mit $\frac{1}{2}k^4 \mathbb{T}_{eff}$ zu einer Resonanz von $\mathbb{H}(k)$ werden, i.e in einer Umgebung von E gibt es kein Punktspektrum aber einen Pol in einem auf ein zweites Blatt fortgesetzten Resolventenmatrixelement von $\mathbb{H}(k)$.

Solche Resonanzen sind zu unterscheiden von "shape"Resonanzen, die durch tunneln bereits in $\bigoplus_l h_l(k)$ vorhanden sind.

Nach dieser Erläuterung der Heuristik sei darauf hingewiesen, daß Satz E nur eine Aussage über die Approximation der Eigenwerte von $H(k)$ durch die von $\mathbb{H}(k)$ trifft ($\mathbb{H}(k)$ und $H^{AD}(k)$ sind unitär äquivalent). Der Zusammenhang zwischen Resonanzen von $H(k)$ und Resonanzen von $\mathbb{H}(k)$ dagegen ist nicht geklärt. Dieses Problem soll hier jedoch nicht behandelt werden.

2. Eine complex-scaling Methode zur Beschreibung der Resonanzen von $\mathbb{H}$

Sei $k > o$ eine festgewählte Zahl.
Als Modell für den Matrixoperator $\mathbb{H}(k)$ in 1.2 betrachten wir, wie bereits angedeutet $\mathbb{H} := \mathbb{H}_u + \mathbb{K}$ mit

$$\mathbb{H}_u := \begin{pmatrix} -k^4\Delta + V_D & 0 \\ 0 & -k^4\Delta + V_C \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$\mathbb{K} := \begin{pmatrix} 0 & k^4 \\ k^4 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nach 1.2 entstehen "P.d."Resonanzen von $\mathbb{H}$ aus eingebetteten Eigenwerten von $\mathbb{H}_u$ durch Störung mit der Kopplung $\mathbb{K}$.

Der Modellcharakter von $\mathbb{H}$ wird neben dem des "physikalischen" Operators $\mathbb{H}(k)$ durch die Trivialität von $\mathbb{K}$ sowie durch die Forderungen an die Potentiale in $\mathbb{H}_u$ bestimmt.

Wir geben Bedingungen an V_D (Dilatationsanalytizität, Def.(2,3)) und an V_C (Def.(2,5)) an so, daß $\mathbb{H}_u$, $\mathbb{H}$ wohldefinierte Operatoren sind und analytische "Fortsetzungen" $\mathbb{H}_u(.)$, $\mathbb{H}(.)$ in $D \subset \mathbb{C}$ mit explizit bekanntem $\sigma_{ess}(\mathbb{H}_u(\theta))$, $\sigma_{ess}(\mathbb{H}(\theta))$ $(\theta \in D)$ definiert werden können.

Damit läßt sich wie in [S,73] das Störungsproblem für eingebettete Eigenwerte von $\mathbb{H}_u$ auf ein analytisches für diskrete Eigenwerte von $\mathbb{H}_u(\theta)$ $(\theta \in D$ geeignet) zurückführen.

2.1 Die analytischen Familien $\mathbb{H}_U(.)$, $\mathbb{H}(.)$

Sei mit H_o der Hamiltonoperator der freien Bewegung auf der Halbachse mit Dirichlet-Randbedingung bezeichnet, i.e. für ein $k>o$ ist H_o der zu der Form

$$q_o(\Phi,\Psi) := (k^2 D\Phi, k^2 D\Psi) \quad (\Phi,\Psi \in H_o^1(R^+))$$

assoziierte selbstadjungierte Operator.

$H_o^1(R^+)$ ist der Abschluß von $C_o^\infty(R^+)$ in der q_o-Norm, $\|\phi\|_{q_o}^2 := (k^2 D\phi, k^2 D\phi) + (\phi,\phi) \quad (\phi \in C_o^\infty(R^+))$, D der Operator der Differentiation im $L^2(R^+)$ im Distributionssinn.

$\mathbb{L}(R^+) := L^2(R^+) \oplus L^2(R^+)$.

Def. (2,1):

Sei $\theta \in R$.

(i) $(U(\theta)\psi)(x) := e^{\theta/2}\psi(e^\theta x) \quad (\psi \in L^2(R^+)$, f.f.a. $x \in R^+)$.

(ii) $\mathbb{U}(\theta) : \mathbb{L}^2(R^+) \to \mathbb{L}^2(R^+)$

$$\boldsymbol{\psi} := \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \to \begin{pmatrix}U(\theta) & o\\ o & U(\theta)\end{pmatrix} \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} .$$

Bem. (2.2)

(i) $\mathbb{U}(.)$ ist unitäre Darstellung von $<R^+,+>$ in $\mathbb{L}^2(R^+)$.

Bew.:

$$\|\mathbb{U}(\theta)\boldsymbol{\psi}\|^2 = \|U(\theta)\psi_1\|^2 + \|U(\theta)\psi_2\|^2 = \|\boldsymbol{\psi}\|^2 \quad (\boldsymbol{\psi} \in \mathbb{L}^2(R^+), \theta \in R);$$

Darstellung klar.

(ii) $U(\theta): H_o^1(R^+) \to H_o^1(R^+)$ ist beschränkt in der q_o-Norm.

Bew.:

$$\begin{aligned}\|U(\theta)\psi\|_{q_o}^2 &= \|k^2 DU(\theta)\psi\|^2 + \|U(\theta)\psi\|^2\\ &= \|e^\theta k^2 D\psi\|^2 + \|\psi\|^2\\ &\le |(e^{2\theta}+1)| \, \|\psi\|_{q_o}^2 \qquad (\psi \in H_o^1(R^+)).\end{aligned}$$

Im Folgenden machen wir von einigen Notationen Gebrauch:

Sei (M,dm) Maßraum,

T Operator in $L^2(M,dm)$, $\Omega(T) := (\psi \in L^2(M,dm) / \int|\overline{\psi}T\psi| < \infty)$.

Dann ist durch $q_T(\phi,\psi) := \int\overline{\phi}T\psi \quad (\phi,\psi \in \Omega(T))$ eine Sesquilinearform definiert.

Manchmal benutzen wir die Bezeichnung $[\phi,T\psi] := q_T(\phi,\psi)$.

Ist T selbstadjungiert, so ist $\Omega(T)$ sein Formdefinitionsbereich und q_T dicht definiert und abgeschlossen.

Für eine beliebige Sesquilinearform q bezeichne $Q(q)$ immer den Definitionsbereich.

Für $\alpha > o$ sei $B_\alpha := (\theta \in C / |\mathrm{Im}\theta| < \alpha)$.

Def.(2,3):

Sei $\alpha > o$.
Ein Operator V in $L^2(R^+)$ heißt dilatationsanalytisch in B_α falls gilt:

(i) q_V ist symmetrisch, $\Omega(V) \supset H_o^1(R^+)$,

(ii) $(H_o+1)^{-1/2}V(H_o+1)^{-1/2}$ ist kompakt

(iii) $(H_o+1)^{-1/2}U(\theta)VU^{-1}(\theta)(H_o+1)^{-1/2}$ hat analytische Fortsetzung als beschränkter Operator von R nach B_α.

Bem.: Dies ist die übliche erweiterte Definition von Dilatationsanalytizität [S,72] .

Satz(2,4):

Sei $\alpha > o$, V dilatationsanalytisch in B_α.
Für $\theta \in B_\alpha$ seien:

$q_o(\theta) := e^{-2\theta}q_o$ mit $Q(q_o(\theta)) := H_o^1(R^+)$,

$q(\theta) := q_o(\theta) + q_{V(\theta)}$ mit $Q(q(\theta)) := H_o^1(R^+)$.

Es gilt:

(i) $q(.)$ ist analytische Familie vom Typ(a) in $B_{\min(\alpha,\pi/4)}$

(ii) für $\varepsilon > o$ existiert ein $z \in C$ so, daß
NumRan $q(\theta) \subset (E \in C / 2\mathrm{Im}\theta - \varepsilon < \arg(E-z) < 2\mathrm{Im}\theta + \varepsilon)$.

Bew.: [RSIV,Ch.XIII.10] .

Zur Definition von analytischen Familien c.f. Anhang.

Def.(2,5):

Sei $\alpha > o$.
Ein Potential V in $L^2(R^+)$ heißt c-analytisch in B_α falls:

(i) $V \in L^1_{loc}(R^+)$, $V(x) \geq o$ (f.f.a. $x \in R^+$)

(ii) $U(\theta)Q(V) = Q(V)$ $(\theta \in R)$ und
es existiert eine analytische Familie $q_V(.)$ vom Typ(a) in B_α mit:
$q_V(\theta)(\phi,\psi) = q_V(U^{-1}(\theta)\phi, U^{-1}(\theta)\psi)$ $(\theta \in R;\ \phi,\psi \in Q(V))$

(iii) Für die Formsumme $H := H_o \dot{+} V$ gilt:
$(H-E)^{-1}$ ist kompakt ($E \in \rho(H)$ geeignet) .

Bem.:

(i) q_V ist dicht definiert, abgeschlossen, symmetrisch, halbbeschränkt, $Q(V) \cap H^1_o(R^+)$ ist dicht in $L^2(R^+)$.

(ii) Da $q_o(.)$ analytisch(a) in $B_{\pi/4}$ ist, ist auch $q_c(.) := q_o(.) + q_V'(.)$ analytisch(a) in $B_{\min(\alpha,\pi/4)}$.

(iii) Für den zu $q_c(\theta)$ assoziierten maximal sectoriellen Operator $H_c(\theta)$ gilt:
$H_c(\theta)$ hat kompakte Resolvente $(\theta \in B_{\min(\alpha,\pi/4)})$ [K,VIITh4.3].

Die Klasse der c-analytischen Potentiale ist nicht leer, wie das folgende Beispiel zeigt:

Beispiel(2,7):

(i) Sei $V: R^+ \to R^+$ homogen vom Grad h ($h > o$ geeignet).
Der maximale Multiplikationsoperator V ist dann c-analytisch in $B_{\pi/2h}$.

(ii) Sei N eine natürliche Zahl und für $n \in (1,..,N)$
$V_n: R^+ \to R^+$ homogen vom Grad h_n ($h_n > o$ geeignet).
$V := \sum_1^N V_n$ ist dann c-analytisch in $B_{\pi/2\max(h_n)}$.

Bew.:

Wegen $\int\limits_0^\infty e^{\theta/2}\overline{\phi}(e^\theta x)V(x)e^{\theta/2}\psi(e^\theta x)\,dx$

$$= \int \overline{\phi}(x)V(e^{-\theta}x)\psi(x)\,dx = e^{-\theta h}\int \overline{\phi}V\psi \qquad (\phi,\psi\in Q(V))$$

ist $U(\theta)Q(V) = Q(V) \quad (\theta\in R)$.

Analog folgt:

$$q_V(U^{-1}(\theta)\phi, U^{-1}(\theta)\psi) = e^{h\theta}q_V(\phi,\psi) \qquad (\phi,\psi\in Q(V),\ \theta\in R);$$

also ist mit

$$q_V(\theta) := e^{\theta h}q_V \quad \text{auf } Q(q_V(\theta)) := Q(V) \qquad (\theta\in B_{\pi/2h})$$

$q_V(.)$ analytische Familie mit der geforderten Fortsetzungseigenschaft.

Die Kompaktheit der Resolvente sieht man so ein:

$$\text{Sei } \tilde{V}(x) := \begin{cases} V(x) & x>0 \\ V(-x) & x<0 \end{cases}$$

dann gilt für

$\tilde{H} := -k^4\Delta\dot{+}\tilde{V}$ mit $Q(\tilde{H}) := H^1(R^+) \cap Q(\tilde{V})$:

$(\tilde{H}-E)^{-1}$ ist kompakt $(E\in\rho(\tilde{H}))$. Bew.:[RSIV,Th.XIII67] .

Sei $H^D := -k^4\Delta\dot{+}\tilde{V}$ mit $Q(H^D) := [H_0^1(R^-) \oplus H_0^1(R^+)] \cap Q(\tilde{V})$

(dabei ist die Einbettung von $..\oplus..$ in $L^2(R)$ nicht extra notiert).

Nach der Kreinschen Formel existiert für $E\in(\rho(\tilde{H}) \cap \rho(H^D))$ ein Operator $P(E)$ mit $\mathrm{rank}P(E) = 1$ so, daß

$$(\tilde{H}-E)^{-1} - (H^D-E)^{-1} = P(E).$$

Damit ist $(H^D-E)^{-1}$ kompakt.

Mit $H_- := -k^4\Delta\dot{+}\tilde{V}|_{R^-}$ und $Q(H_-) := H_0^1(R^-) \cap Q(\tilde{V}|_{R^-})$

gilt aber:

$$(H^D-E)^{-1} = (H_- - E)^{-1} \oplus (H-E)^{-1}$$

woraus die Kompaktheit von $(H-E)^{-1}$ folgt.

Bem.:

Die Notwendigkeit der Bedingung $\pi/2h$ an den "Winkel" ersieht man aus der Sectorialitätsforderung für Typ(a) Analytizität bzw. aus (ii) der obenstehenden Bemerkung.

Nun können wir die Symbole $\mathbb{H}_u$, $\mathbb{H}$ zu wohldefinierten selbstadjungierten Operatoren machen und analytische Familien $\mathbb{H}_u(.)$, $\mathbb{H}(.)$ in B_α definieren, die für reelle Parameter unitär äquivalent zu $\mathbb{H}_u$, $\mathbb{H}$ sind.

Def. (2.8):

Sei $\Sigma \in R$; $\alpha_D, \alpha_C > o$;

V_D dilatationsanalytisch in B_{α_D},

V_C c-analytisch in B_{α_C}.

Für $\theta \in B_\alpha$ mit $\alpha := \min(\alpha_D, \alpha_C, \pi/4)$ und

$\phi, \psi \in Q(\mathfrak{q}_u(\theta)) := H_o^1(R^+) \oplus [H_o^1(R^+) \cap Q(V_C)]$ sei

(i) $\mathfrak{q}_u(\theta)$ definiert durch:

$$\mathfrak{q}_u(\theta)(\phi,\psi) := q_o(\theta)(\phi_1,\psi_1)+(\phi_1,\Sigma\psi_1)+q_{V_D(\theta)}(\phi_1,\psi_1) + q_o(\theta)(\phi_2,\psi_2)+q_{V_C}(\theta)(\phi_2,\psi_2) .$$

Nach Konstruktion ist $\mathfrak{q}_u(.)$ analytisch vom Typ(a) in B_α und definiert eine analytische Familie vom Typ(B)

$$\mathbb{H}_u(.) := \begin{pmatrix} H_D(.) & o \\ o & H_C(.) \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} H_o(.)+\Sigma \dot{+} V_D(.) & o \\ o & H_o(.) \dot{+} V_C(.) \end{pmatrix} .$$

(ii) $\mathbb{H}(\theta) := \mathbb{H}_u(\theta) + \mathbb{K}$, $D(\mathbb{H}(\theta)) = D(\mathbb{H}_u(\theta))$.

Dabei ist $\mathbb{K} := \begin{pmatrix} o & k^4 \\ k^4 & o \end{pmatrix}$.

Bem.:

(i) $\mathbb{K}$ ist beschränkt und ändert sich nicht unter einer Dilatation, damit ist auch $\mathbb{H}(.)$ analytisch vom Typ(B).

(ii) Die Konstante Σ in $H_D(\theta)$ bestimmt für reelle θ den Boden des wesentlichen Spektrums.

2.2 SPEKTRALE EIGENSCHAFTEN VON $\mathbb{H}_u(.)$, $\mathbb{H}(.)$;

RESONANZEN

Wir machen von folgender Konvention Gebrauch:
Sei T abgeschlossener Operator,

$\sigma_d(T)$:= Menge der isolierten Eigenwerte von T mit endlicher algebraischer Vielfachheit,

$\sigma_{ess}(T) := \sigma(T) \setminus \sigma_d(T)$.

Satz(2,9):

Für die in (2.8) beschriebene Situation gilt:

(i) $\sigma(\mathbb{H}_u(\theta)) = \sigma(\mathbb{H}_u(\theta+x)) \quad (x \in R,\ \theta \in B_\alpha)$

(ii) $\sigma_{ess}(\mathbb{H}_u(\theta)) = e^{-2\theta}[\Sigma,\infty) \quad (\theta \in B_\alpha)$

(iii) $\sigma_d(\mathbb{H}_u(\theta)) = \sigma_d(H_D(\theta)) \cup \sigma_d(H_C) \setminus (\Sigma) \quad (\theta \in B_\alpha \setminus R)$

(iv) mit $\theta \in B_\alpha$ und $\mathrm{Im}\theta \in (0,\alpha)$ ist:

$\sigma_d(\mathbb{H}_u(\theta)) \subset [R \cup (E \in C/\ \arg(E-\Sigma) \in (-2\mathrm{Im}\theta, 0)\ )]$

$\sigma_d(\mathbb{H}_u(\theta)) \cap R = \sigma_{pp}(\mathbb{H}_u) \setminus (\Sigma)$

$\sigma_d(\mathbb{H}_u(\tau)) \subset \sigma_d(\mathbb{H}_u(\theta)) \quad (\mathrm{Im}\tau \in (0, \mathrm{Im}\theta)\ )$

(v) mit $\psi \in D(\mathbb{H}_u)$, E so, daß $\mathbb{H}_u \psi = E\psi$,

$\psi(\theta) := U(\theta)\psi$ hat analytische Fortsetzung von R nach B_α ,

$\psi(\theta) \in D(\mathbb{H}_u(\theta))$,

$\mathbb{H}_u(\theta)\psi(\theta) = E\psi(\theta) \quad (\theta \in B_\alpha)$.

Bew.:

(i) $\mathbb{H}_u(\theta)$ und $\mathbb{H}_u(\theta+x)$ sind unitär äquivalent für $x \in R$.

(ii) $\sigma(\mathbb{H}_u(\theta)) = \sigma(H_D(\theta)) \cup \sigma(H_C(\theta))$

$= \sigma_{ess}(H_D(\theta)) \cup \sigma_d(H_D(\theta)) \cup \sigma_d(H_C(\theta))$.

Die Aussage folgt dann mit der analogen für $H_D(\theta)$ [RSIV,Th.XIII.36] .

(iii) zu zeigen : $\sigma_d(H_C(\theta_1))=\sigma_d(H_C(\theta_2))$ $(\theta_1,\theta_2 \in B_\alpha)$.

Seien also $\theta_1, \theta_2 \in B_\alpha$, $E \in \sigma(H_C(\theta_1))$, dann existiert $\delta>0$ und n (möglicherweise mehrdeutige) Funktionen E_i in $U_\delta(\theta_1)$ mit $E_i(\theta)\in\sigma(H_C(\theta))$ $(\theta\in U_\delta(\theta_1))$

und $[U_\varepsilon(E) \cap \bigcup_{i=1}^{n}(E_i(\theta))] = \sigma(H_C(\theta)) \cap U_\varepsilon(E)$ ($\varepsilon>0$ geeignet).

Nun sind $H_C(\theta_1)$ und $H_C(\theta_1+x)$ $(x\in R)$ unitär äquivalent also $E_i(\theta_1) = E_i(\theta_1+x)$ $(\theta_1+x \in U_\delta(\theta_1))$.

Wegen $E_i(\theta) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m(\theta-\theta_1)^{m/p}$ (p geeignet) folgt mit dem Identitätssatz für Reihen:

$E_i(\theta) = E$ $(\theta \in U_\delta(\theta_1),\ i\in(1,..,n))$.

Sei nun $\gamma: [0,1] \to C$ stetig mit $\gamma(0)=\theta_1$, $\gamma(1) = \theta_2$.

Angenommen $E \notin \sigma(H_C(\theta_2))$ dann ist

$s[:= \sup(t\in[0,1]/\ E\in\sigma_d(H_C(\gamma(x)))$ für $x\leq t\ )]<1$.

$(H_C(.)-z)^{-1}$ ist analytisch für $z\in\rho(H_C(\gamma(s))$ in Umgeb$(\gamma(s))$

$\Rightarrow z\in\rho(H_C(\gamma(t)))$ für $|\gamma(t)-\gamma(s)|<\varepsilon$ ($\varepsilon>0$ geeignet) und

$\|(H_C(\gamma(t))-z)^{-1}-(H_C(\gamma(s))-z)^{-1}\| \to 0$ $(t \to s)$

$\Rightarrow E\in\sigma(H_C(\gamma(s)))= \sigma_d(H_C(\gamma(s)))$

$\Rightarrow E\in\sigma(H_C(\gamma(s+r)))$ ($r\in(0,1)$ geeignet) $\lightning$.

(iv) Die Aussagen folgen aus (iii) und den bekannten Eigenschaften von $H_D(\theta)$ [RSIV,Th.XIII.36] .

(v) Folgt aus dem Lemma von O' connor [RSIV,XIII.11 p.196] .

Um derartige Aussagen auch über das Spektrum von $\mathbb{H}(\theta)$ machen zu können , brauchen wir genaue Informationen über $\sigma_{ess}(\mathbb{H}(\sigma))$.

Lemma (2,10)

Seien A, B beschränkte Operatoren in einem Banachraum und A-B kompakt so, daß

(i) das offene Innere von $\sigma(A) = \emptyset$,

(ii) in jeder Zusammenhangskomponente von $\rho(A)$ existiert ein Punkt aus $\rho(B)$

dann gilt:

$$\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B) \quad .$$

Bew.: [RSIV,XIII.4 Lemma 3] .

Korrolar(2,11):

Für $\theta \in B_\alpha$ gilt:

$[(\mathbb{H}_u(\theta) - E_o)^{-1} - (\mathbb{H}(\theta) - E_o)^{-1}$ kompakt $(E_o \in \rho(\mathbb{H}_u(\theta) \cap \rho(\mathbb{H}(\theta))$ ge.

$\Rightarrow \sigma_{ess}(\mathbb{H}_u(\theta)) = \sigma_{ess}(\mathbb{H}(\theta))$.

Bew.:

Bezeichne $R_u := (\mathbb{H}_u(\theta) - E_o)^{-1}$, $R := (\mathbb{H}(\theta) - E_o)^{-1}$.

Nach dem Spektralabbildungssatz gilt:

$$E \in \sigma_{ess}(R_{[u]}) \Leftrightarrow (E_o + 1/E) \in \sigma_{ess}(\mathbb{H}_{[u]}(\theta))$$

und wegen Satz(2,1o):

$$\sigma_{ess}(R_u) = (E \in \mathbb{C} / \ E = (e^{-2\theta} t - E_o)^{-1} \quad (t \in [\Sigma, \infty))\ ).$$

Also ist das Innere von $\sigma(R_u) = \emptyset$, $\rho(R_u)$ ist zusammenhängend

$\mathbb{H}(\theta)$ sectoriell. Daraus folgt: $\sigma_{ess}(R_u) = \sigma_{ess}(R)$.

Damit ergibt sich die Behauptung durch nochmaliges Anwenden des Spektralabbildungssatzes.

Damit gilt nun folgender

Satz(2,12):

Die in (2,9) für $\mathbb{H}_u(\theta)$ getroffenen Aussagen (i),(ii),(iv),(v gelten auch für $\mathbb{H}(\theta)$.

Bew.:

Zu zeigen ist (ii), also $\sigma_{ess}(\mathbb{H}(\theta)) = e^{-2\theta}[\Sigma, \infty)$.

Die übrigen Aussagen folgen dann aus der Analytizität von $\mathbb{H}(.)$ analog wie in (2.9).

Wegen (2,11) bleibt zu zeigen:

$(\mathbb{H}_u(\theta) - E)^{-1} - (\mathbb{H}(\theta) - E)^{-1}$ ist kompakt $(E \in \rho(\mathbb{H}_u(\theta) \cap \rho(\mathbb{H}(\theta))$ ge.

Es gilt: $D(\mathbb{H}_u(\theta)) = D(\mathbb{H}(\theta))$.

$\mathbb{H}_u(\theta)$ ist sectoriell also:

$\|(\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1}\| \leq [\mathrm{dist}(E, \mathrm{NumRan}\,\mathbb{H}_u(\theta))]^{-1}$.

Wähle E so, daß $\|\mathbb{K}(\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1}\| < 1$, dann gilt:

$$(\mathbb{H}(\theta)-E)^{-1} - (\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1}$$

$$= (\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1} \, (\mathbb{H}_u(\theta)-E-\mathbb{H}(\theta)-E) \, (\mathbb{H}(\theta)-E)^{-1}$$

$$= (\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1} \, (-\mathbb{K}) \, (\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1} \, (\mathbb{1} + \mathbb{K}(\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1})^{-1}$$

$$= - \begin{pmatrix} 0 & (H_D(\theta)-E)^{-1} k^4 (H_C(\theta)-E)^{-1} \\ (H_C(\theta)-E)^{-1} k^4 (H_D(\theta)-E)^{-1} & 0 \end{pmatrix} (1+\mathbb{K}(\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1})^{-1}$$

Der linke Operator ist kompakt, womit alles gezeigt ist.

Bem.:

An dieser Stelle genau geht die (unphysikalische) Vorraussetzung der Kompaktheit der Resolvente von $H_C(\theta)$ ein (c.f. (2,5)) .
Um eine Theorie mit schwächeren Bedingungen an V_C zu machen, müßte ein Abfall der Kopplung im Ortsraum ausgenutzt werden.

In Analogie zu der üblichen Resonanzdefinition für atomare Schrödingeroperatoren mit dilatationsanalytischen Potentialen, und ohne hier die physikalische Relevanz dieser Methode zu diskutieren, charakterisieren wir nun die untersuchten Objekte wie folgt:

Def. (2,13):

Ein E, für das gilt:

$E \in \sigma_d(\mathbb{H}(\theta)) \setminus \mathbb{R}$ ($\theta \in B_\alpha$ mit $\mathrm{Im}\,\theta \in (0,\alpha)$ geeignet),

heißt Resonanz von $\mathbb{H}$ für die in (2,8) definierte Situation.

3. Analyische Störung einiger Eigenwerte von $\mathbb{H}_U$ durch $\mathbb{K}$

Durch Anwendung der analytischen Störungstheorie erhalten wir Aussagen über Elemente von

$$\sigma_d(\mathbb{H}(\theta)) \setminus \mathbb{R} \qquad (\theta \in B_\alpha,\ \operatorname{Im}\theta > 0) .$$

Eine "goldene Regel" kann für den Imaginärteil des ersten nichttrivialen koeffizienten der "Störungsreihe" für in $\sigma_{ess}(H_D)$ liegen Eigenwerte von H_C gezeigt und damit die heuristische Konzeption des Zerfalls (c.f. 1.2) erläutert werden.

An einem expliziten Beispiel wird der Einfluß des wesentlichen Spektrums auf die Abhängigkeit der Resonanzen, die durch die Kopplung mit $\mathbb{K}$ entstehen, vom Parameter k deutlich.

3.1 Qualität der Störungsreihe und die "goldene Regel"

Satz(3.1):

Sei $E_c \in \sigma_d(H_C)$ nicht entartet,

$E_C \notin \sigma_{pp}(H_D)$, $E_C \neq \Sigma$,

$\psi_c \in D(H_C)$, $\psi_c = \overline{\psi_c}$, $\|\psi_c\| = 1$, $H_C\psi_C = E_C\psi_C$,

dann ist für

$\theta \in B_\alpha$, $\mathrm{Im}\theta > 0$

$E_c \in \sigma_d(\mathbb{H}_u(\theta))$ nicht entarteter Eigenwert mit Eigenvektor

$$\Psi_c(\theta) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_c(\theta) \end{pmatrix} .$$

Sei B eine Kreislinie, die E_c vom Rest von $\sigma(\mathbb{H}_u(\theta))$ trennt

$$\varepsilon := [\sup_{E \in B} k^4 \max(\|(H_D(\theta)-E)^{-1}\|, \|(H_C(\theta)-E)^{-1}\|)]^{-1}.$$

Dann gilt:

(i) Es existiert

$E(.) : U_\varepsilon(0) \to C$ analytisch so, daß

$E(\beta) \in \sigma_d(\mathbb{H}_u(\theta)+\beta\,\mathbb{K} =: \mathbb{H}(\theta,\beta))$

$$E(\beta) = E_C + \sum_{n=1}^{\infty} a_n\beta^n \quad (a_n \in C \text{ geeignet}, \beta \in U_\varepsilon(0))$$

(ii) Für die Koeffizienten der Störungsreihe gilt:

$a_n = 0$ (n ungerade)

$$a_2 = \frac{k^8}{2\pi i} \oint_B \frac{(\overline{\psi_C(\theta)}, (H_D(\theta)-E)^{-1}\psi_C(\theta))}{E_c - E}\, dE$$

Bew.:

$\mathbb{K}$ ist beschränkt

$\Rightarrow$ $\mathbb{H}(\theta,.)$ ist analytisch vom Typ(A) in C [K,VII Th.2.6] , woraus die Existenz von E(.) mit dem Kato-Rellich Theorem folgt.

Für $\beta < [\sup_{E\in B} k^4 \|(\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1}\|]^{-1}$ wird durch B auch $\sigma(\mathbb{H}(\theta,\beta))$ getrennt. Dann ist der Projektor von $\mathbb{H}(\theta,\beta)$ auf den gestörten Eigenraum gegeben durch:

$$\mathbb{P}(\theta,\beta) := -\frac{1}{2\pi i}\oint_B (\mathbb{H}(\theta,\beta)-E)^{-1}\, dE \qquad (\beta\in U_\varepsilon(0)).$$

Wegen $E(\beta) = \mathrm{tr}(\mathbb{H}(\theta,\beta)\mathbb{P}(\theta,\beta))$ ist das Analytizitätsgebiet von $E(.)$ in $U_\varepsilon(0)$ enthalten .

Mit $\|(\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1}\| = \max(\|(H_D(\theta)-E)^{-1}\|, \|(H_C(\theta)-E)^{-1}\|)$ folgt (i).

Für die Berechnung der Koeffizienten der Störungsreihe benötigen wir folgendes

<u>Lemma:</u>

Sei $\mathbb{P}_u(\theta)$ der Projektor auf den Eigenraum zu E_C i.e.

$$\mathbb{P}_u(x) = \mathbb{P}^{\mathbb{H}_u(x)}_{(E_C)} \qquad (x\in R)$$

$$\mathbb{P}_u(\theta) = -\frac{1}{2\pi i}\oint_{B_\theta} (\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1} dE \qquad (\theta\in B_\alpha\setminus(R)).$$

Dann gilt:

(i) $\mathbb{P}_u(\theta) = |\psi_C(\theta)\rangle\langle\overline{\psi_C(\theta)}| \qquad (\theta\in B_\alpha)$.

(ii) $\overline{\psi_C(\theta)} \in D(\mathbb{H}^*_u(\theta))$ und $\mathbb{H}^*_u(\theta)\overline{\psi_C(\theta)} = \overline{E}_C\, \overline{\psi_C(\theta)}$.

Bew.:

Für $x\in R$ ist $\mathbb{H}_u(x)$ selbstadjungiert also ist $\mathbb{P}_u(x)$ orthogonal, damit $\mathbb{P}_u(x) = |\psi_C(x)\rangle\langle\psi_C(x)| = |\psi_C(x)\rangle\langle\overline{\psi_C(x)}|$

$\psi_C(.)$ ist wegen Satz(2.9 (v)) analytisch also auch $|\psi_C(.)\rangle\langle\overline{\psi_C(.)}|$. Mit der Analytizität von $\mathbb{P}_u(.)$ folgt (i) aus dem Identitätssatz.

(ii) ergibt sich dann aus

$\mathbb{P}^*_u(\theta) = |\overline{\psi_C(\theta)}\rangle\langle\psi_C(\theta)|$ und $(\psi_C(\theta), \overline{\psi_C(\theta)}) = 1 \quad (\theta\in B_\alpha)$. ∎

Damit erhalten wir eine leicht zu entwickelnde Formel für $E(\beta)$:

$$(\overline{\psi_c(\theta)}, \mathbb{H}(\theta,\beta)\, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta))$$

$$= E(\beta)\ (\overline{\psi_c(\theta)}, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta))$$

$$=(\overline{\psi_c(\theta)}, (\mathbb{H}_u(\theta)+\beta\, \mathbb{K})\, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta))$$

$$= E_c(\overline{\psi_c(\theta)}, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta)) + (\overline{\psi_c(\theta)},\beta\, \mathbb{K}\, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta)) .$$

$$\Rightarrow E(\beta) = E_c + \frac{(\overline{\psi_c(\theta)},\beta\, \mathbb{K}\, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta))}{(\overline{\psi_c(\theta)}, \mathbb{P}(\theta,\beta)\, \psi_c(\theta))} .$$

Für $|\beta| < \varepsilon$ ist:

$$\mathbb{P}(\theta,\beta) = - \frac{1}{2\pi i} \oint_B \mathbb{R}_u(\theta,E) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (\beta\, \mathbb{K}\, \mathbb{R}_u(\theta,E))^n \, dE$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint_B \sum_{m=0}^{\infty} [\beta^{2m-1} \begin{pmatrix} 0 & k^{4(2m-1)}(DC)^m \\ k^{4(2m-1)}(CD)^m & 0 \end{pmatrix} - \beta^{2m} \begin{pmatrix} k^{8m}D(CD)^m & 0 \\ 0 & k^{8m}C(DC)^m \end{pmatrix}] dE$$

mit: $\mathbb{R}_u(\theta,E) := (\mathbb{H}_u(\theta)-E)^{-1}$; der Term mit β^{-1} sei 0;

$D := (H_D(\theta)-E)^{-1}$, $C := (H_C(\theta)-E)^{-1}$;

$$\beta\, \mathbb{K}\, \mathbb{P}(\theta,\beta) =$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \sum_{m=0}^{\infty} [\beta^{2m} \begin{pmatrix} k^{8m}(CD)^m & 0 \\ 0 & k^{8m}(DC)^m \end{pmatrix} - \beta^{2m+1} \begin{pmatrix} 0 & k^{4(2m+1)}D(CD)^m \\ k^{4(2m+1)}C(DC)^m & 0 \end{pmatrix}] dE$$

Damit ergibtsich mit der gleichmäßigen konvergenz:

$$(\overline{\psi_c(\theta)},\beta\, \mathbb{K}\, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta)) = \sum_m \frac{1}{2\pi i} \oint k^{8m} (\overline{\psi_c(\theta)}, (DC)^m \psi_c(\theta))\, \beta^{2m}\, dE$$

$$=: \sum_m c_m \beta^{2m}$$

und:

$$(\overline{\psi_c(\theta)}, \mathbb{P}(\theta,\beta)\psi_c(\theta))$$

$$= \sum_{m=o}^{\infty} - \frac{1}{2\pi i} \oint_B k^{8m} (\overline{\psi_c(\theta)}, C(DC)^m \psi_c(\theta)) \beta^{2m} dE$$

$$=: \sum_{m=o}^{\infty} b_m \beta^{2m}.$$

Nach Konstruktion ist dann:

$$\sum_{m=1}^{\infty} a_m \beta^m = \frac{\sum_{m=o}^{\infty} c_m \beta^{2m}}{\sum_{m=o}^{\infty} b_m \beta^{2m}} ,$$

womit sofort folgt: $a_m = 0$ (m ungerade).

Wegen der Analytizität von $E(.)$ in $U_\varepsilon(0)$ und $b_o \neq o$ konvergiert der Quotient in $U_\varepsilon(0)$.

Mit $c_1 = a_2 b_o$ und

$$b_o = - \frac{1}{2\pi i} \oint (\overline{\psi_c(\theta)}, (H_c(\theta) - E)^{-1} \psi_c(\theta)) dE$$

$$= - \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{(\overline{\psi_c(\theta)}, \psi_c(\theta))}{E_c - E} dE$$

$$= - \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{E_c - E} dE = 1 \quad \text{folgt:}$$

$$a_2 = c_1 = \frac{k^8}{2\pi i} \oint (\overline{\psi_c(\theta)}, (H_D(\theta) - E)^{-1} (H_c(\theta) - E)^{-1} \psi_c(\theta)) dE$$

$$= \frac{k^8}{2\pi i} \oint \frac{(\overline{\psi_c(\theta)}, (H_D(\theta) - E)^{-1} \psi_c(\theta))}{E_c - E} dE .$$

Damit ist alles nachgerechnet.

Bem.:

Um nun Aussagen über das Verhalten von $E(\beta)$ im Parameter k machen zu können, müßte man neben Information über die Abhängigkeit der dilatierten Eigenfunktionen von k auch Wissen über die Resolventen $(H_D(\theta)-E)^{-1}$ und $(H_C(\theta)-E)^{-1}$ erwerben.

Für den Imaginärteil von a_2 gibt es auch für die Situation von (3,1) eine Berechnungsformel ("Goldene Regel"). Hier treten nur noch mit selbstadjungierten Operatoren assoziierte Objekte auf.

Satz(3,2):

Mit den Vorraussetzungen von (3,1) gilt:

$$|\mathrm{Im}\, a_2| = \pi k^8 \frac{d}{dE}(\psi_c, P^{H_D}_{(-\infty,E)}\, \psi_c)\Big|_{E=E_c} .$$

Bew.:

$$a_2 = \frac{k^8}{2\pi i}\oint \frac{(\overline{\psi_c(\theta)}, (H_D(\theta)-E)^{-1}\psi_c(\theta))}{E_c - E}\, dE .$$

Nun ist $(\overline{\psi_c(\theta)}, (H_D(\theta)-.)^{-1}\psi_c(\theta))$ analytisch in dem von B begrenzten Kreis, woraus mit Cauchy's Formel folgt:

$$\begin{aligned} -a_2 &= k^8 (\overline{\psi_c(\theta)}, (H_D(\theta)-E)^{-1}\psi_c(\theta)) \\ &= \lim_{\varepsilon\searrow 0} k^8 (\overline{\psi_c(\theta)}, (H_D(\theta)-(E_c+i\varepsilon))^{-1}\psi_c(\theta)) \\ &= \lim_{\varepsilon\searrow 0} k^8 (\psi_c, (H_D-(E_c+i\varepsilon))^{-1}\psi_c) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\mathrm{Im}\, a_2 = \lim_{\varepsilon\searrow 0} \frac{k^8}{2i}[(\psi_c, R_D(E_c+i\varepsilon)\psi_c) - (\psi_c, R_D(E_c-i\varepsilon)\psi_c)]$$

$$= |\mathrm{Im}\, a_2| \quad \text{wegen } (2,12\ (iv)).$$

Dabei ist $R_D(E) := (H_D-E)^{-1}$.

Andererseits gilt für $E>E_c$, $a>o$ mit der Stoneschen Formel für die Spektralschar:

$$(\psi_c, P^{H_D}_{(E_c-a,E)}\psi_c)$$

$$=\lim_{\delta \downarrow o} \lim_{\varepsilon \downarrow o} \frac{1}{2\pi i} \int_{E_c-a+\delta}^{E+\delta} (\psi_c, R_D(t+i\varepsilon)\psi_c)-(\psi_c, R_D(t-i\varepsilon)\psi_c) \, dt$$

$$=\lim_{\delta \downarrow o} \frac{1}{2\pi i} \int_{E_c+\delta-a}^{E+\delta} \lim_{\varepsilon \downarrow o} [(\psi_c, R_D(t+i\varepsilon)\psi_c) - (\psi_c, R_D(t-i\varepsilon)\psi_c)]dt$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{E_c-a}^{E} \lim_{\varepsilon \downarrow o} \ldots \quad ,$$

wobei (2,9 (v)) benutzt wurde, was die meromorphe Fortsetzbarkeit von $R_D(.)$ von C^+ nach C^- durch R und umgekehrt impliziert. ∎

Auf einer heuristischen Ebene besagt diese Formel, daß die Zerfallswahrscheinlichkeit des durch ψ_c repräsentierten Zustandes durch den Überlapp von ψ_c mit dem Kontinuum von H_D gegeben ist.

Aus der Konstruktion ist die Bedeutung der Kopplung $\mathbb{K}$ ersichtlich.

3.2 Ein explizites Beispiel

Zunächst zeigen wir ein Lemma, welches ermöglicht, Bekanntes über die eindimensionale Bewegung für Aussagen über Probleme auf der Halbachse zu nutzen.

Lemma (3.3)

Sei für $\psi \in L^2(R)$

$$(U\psi)(x) := \frac{\psi(x) - \psi(-x)}{2} \qquad (\text{ f.f.a. } x \in R \text{ })$$

die Projektion auf den abgeschlossenen Teilraum der ungeraden Funktionen.

Sei V ein Potential in $L^2(R)$ mit

(i) $V(x) = V(-x)$ (f.f.a. $x \in R$)

(ii) Entweder

V relativ formbeschränkt mit Schranke kleiner 1 zu $-k^4\Delta$ mit $Q(-k^4\Delta) := H^1(R)$

oder

$V \geq o$, $V \in L^1_{loc}(R)$

und sei $T: UL^2(R) \to L^2(R^+)$

$$\psi \to 2^{1/2}\psi\big|_{R^+} \quad .$$

Dann ist T unitär und es gilt:

$$H_o \dot{+} V\big|_{R^+} = T(\,-k^4\Delta \dot{+} V)\big|_{UD(-k^4\Delta\dot{+}V)} \; T^{-1} \; .$$

Bew.:

Beh.: $H^1_o(R^+) \cap Q(V\big|_{R^+}) = TU(H^1(R) \cap Q(V))$
$= TUH^1(R) \cap TUQ(V)$.

Bew.:

"$\subset$" $C^\infty_o(R^+) \subset TUC^\infty_o(R) \Rightarrow H^1_o(R^+) \subset \overline{TUC^\infty_o(R)}^{\|\cdot\|_{+1}} = TUH^1(R)$,

wobei $\|\phi\|^2_{+1} := (k^2 D\phi, k^2 D\phi) + (\phi,\phi) \quad (\phi \in C^\infty_o(R)\ )$.

Für $\phi \in Q(V|_{R^+})$ gilt:

$$\infty > \int_0^\infty |\overline{\phi} V\phi| = 2\int_0^\infty |\overline{T^{-1}\phi} VT^{-1}\phi| = \int_{-\infty}^\infty |\overline{T^{-1}\phi}\ VT^{-1}\phi|$$

Also ist $T^{-1}\phi \in Q(V)$.

"$\supset$" Sei $\phi \in TU(C_0^\infty(R))$,

$a := \max\ (x \in R^+ / \ x \in \operatorname{supp} \phi)$

$$\phi_n := \begin{cases} \phi((x-a/2)(1+1/n)+a/2) & |x-a/2| < a/2\ \frac{1}{1+1/n} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

dann ist ϕ_n stückweise $C^1(R^+)$ (n natürlich)

und $\phi_n \underset{+1}{\rightarrow} \phi\ (n \to \infty)$.

Sei $(j_\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ eine Glättungsschar, dann ist

$j_\varepsilon * \phi_n \in C_0^\infty(R^+)$

und es existiert eine geeignete Auswahlfolge

$\phi_{m_{n,\epsilon}}$ mit $\phi_m \underset{+1}{\rightarrow} \phi \quad (m \to \infty)$,

also ist $\phi \in H_0^1(R^+)$.

$TUQ(V) \subset Q(V|_{R^+})$ folgt wieder trivial. ∎

Betrachte nun $H_0 \dot{+} V|_{R^+}$, $T(-k^4\Delta \dot{+} V)|_{U(H^1(R) \cap Q(V))} T^{-1}$.

$H_0 \dot{+} V|_{R^+}$ ist selbstadjungiert und weil

$U(-k^4\Delta \dot{+} V) \subset (-k^4\Delta \dot{+} V)U$, T unitär,

auch $T(-k^4\Delta \dot{+} V)|_{U..} T^{-1}$. Die Operatoren sind gleich,

wenn die erzeugten Formen gleich sind.

$$Q(T(-k^4\Delta \dot{+} V)|_{U..} T^{-1})$$

$$= (\psi \in L^2(R^+) / \ \int_0^\infty |\overline{\psi} T(-k^4\Delta + V)T^{-1}\psi| < \infty)$$

$$= (\psi \in L^2(R^+) / \ \int_{-\infty}^\infty |\overline{T^{-1}\psi}(-k^4\Delta + V)T^{-1}\psi| < \infty\ ) = Q(H_0 \dot{+} V|_{R^+})$$

weil $T^{-1}(H_0^1(R^+) \cap Q(V|_{R^+})) = U(H^1(R) \cap Q(V))$.

Für $\phi,\psi \in H_o^1(R^+) \cap Q(V|_{R^+})$ gilt außerdem:

$$[\phi,H_o\dot{+}V\psi] = \int_0^\infty \overline{\Phi}\ (-k^4\psi''+V\psi) = \frac{1}{2}\ 2\int_0^\infty \overline{\Phi}(-k^4\psi''+V\psi)$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty \ldots + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^0 \overline{\Phi}(-x)(-k^4\psi''(-x)+V(-x)\psi(-x))dx$$

$$=[\phi,T(-k^4\Delta+V)T^{-1}\psi] \quad .$$

Damit ist alles gezeigt.

Um explizit rechnen zu können, machen wir uns noch zwei bekannte Aussagen klar.
Bezeichne mit S(R) den Raum der Schwarzfunktionen, mit $\wedge$ die Fouriertransformation.

Lemma(3,4):

(i) Für die Eigenfunktionen des Harmonischen Oszillators $-k^4\Delta\dot{+}\ x^2$ in $L^2(R)$

$$\psi_n(x) = \pi^{-\frac{1}{4}}(n!)^{-\frac{1}{2}}k^{-\frac{1}{2}}P_n(2^{1/2}x/k)\exp(-\tfrac{1}{2}(x/k)^2)$$

gilt:

$$\hat{\psi}_n(p) = (-i)^n\pi^{-\frac{1}{4}}(n!)^{-\frac{1}{2}}k^{\frac{1}{2}}P_n(2^{1/2}pk)\exp(-\tfrac{1}{2}(pk)^2).$$

Dabei sind:

$$P_n(x) := \sum_{j=o}^{[n/2]}(-1)^j c_{n,j}x^{n-2j}\ ;\quad c_{n,j} := \frac{n!}{(n-2j)!\,2^j j!} \quad .$$

(ii) Mit $\Sigma \in R$; $a,b > \Sigma$ gilt:

$$(\psi,P_{[a,b]}^{-k^4\Delta+\Sigma}\psi) = k^{-2}\int_{|p|\in[(a-\Sigma)^{1/2},(b-\Sigma)^{1/2}]}|\hat{\psi}(p/k^2)|^2\,dp \qquad (\psi\in S(R))$$

Bew.:

(i) Sei $A^*: S(R) \to S(R)$

$$A^*\psi(x) := 2^{-1/2}(x-D_x)\,\psi(x),$$

dann ist $\psi_n(x) = \pi^{-\frac{1}{4}}(n!)^{-\frac{1}{2}}k^{-\frac{1}{2}}(A^{*n}\exp(-\frac{1}{2}(.)^2)(x/k)$.

Nun gilt aber:

$$\widehat{\psi(./k)}(p) = k\,\hat{\psi}(kp) \quad \text{und}$$

$$\widehat{(A^*\psi)}(p) = (2\pi)^{-1/2}\, 2^{-1/2} \int_R e^{-ipx}(x\psi(x) - D_x\psi(x))\, dx$$

$$= (2\pi)^{-1/2}(-i)\ (p-D_p)\psi(p) = (-i)(A^*\hat{\psi})(p).$$

(ii) $(\psi, P_{[a,b]}^{-k^4\Delta+\Sigma}\psi)$

$$= \frac{1}{2\pi i} \lim_{\delta\to o} \lim_{\varepsilon\to o} \int_{a+\delta}^{b+\delta} (\psi, (-k^4\Delta+\Sigma-(E+i\varepsilon))^{-1} - \overline{\ldots}\quad dE$$

$$= \pi^{-1} \lim_{\delta\to o} \lim_{\varepsilon\to o} \int_R \int_R \chi_{[a+\delta,b+\delta]}(E)\ |\hat{\psi}(p)|^2 \frac{\varepsilon}{(k^4p^2+(\Sigma-E))^2+\varepsilon^2}\, dpdE$$

$$= \lim_{\delta\to o} \int_R dp|\hat{\psi}(p)|^2 \pi^{-1} \lim_{\varepsilon\to o} \int_R dF\ \chi_{[a+\delta,b+\delta]}(F+k^4p^2+\Sigma)\ \frac{\varepsilon}{F^2+\varepsilon^2}$$

$$= \lim_{\delta\to o} \int_R dp|\hat{\psi}(p)|^2\ \chi_{[a+\delta,b+\delta]}(k^4p^2+\Sigma)$$

$$= k^{-2} \int_R dp|\hat{\psi}(p/k^2)|^2 \chi_{[a,b]}(p^2+\Sigma)$$

χ_M bezeichnet die charakteristische Funktion einer Menge M. ∎

Satz(3,5):

Sei $\Sigma \in R\setminus(k^2(2n+1))_n$ ungerade ;

$$\mathbb{H}(\beta) := \begin{pmatrix} H_o+\Sigma & \beta k^4 \\ \beta k^4 & H_o+x^2 \end{pmatrix} D(\mathbb{H}(\beta)) = D(H_o) \oplus [D(H_o)\cap D(x^2)] \quad (\beta\in R)$$

Für $k^2(2n+1) > \Sigma$ existiert dann nach (3.1) $\varepsilon > o$ und eine reellanalytische Funktion $E_n(.)$ in $U_\varepsilon(o)$ mit

$E_n(\beta) \in \sigma_d(\mathbb{H}(\theta,\beta)) \quad (\theta\in B_{\pi/4}, \mathrm{Im}\theta > o)$

$E_n(\beta) = k^2(2n+1) + a_2\beta^2 + O(\beta^4)$.

Es gilt:

$$|\mathrm{Im}\, a_2| = \frac{\pi^{1/2}}{n!} k^6 \frac{1}{\tau} P_n^2(2^{1/2}\tau)\, e^{-\tau^2}$$

dabei ist $\tau = \left(\frac{k^2(2n+1) - \Sigma}{k^2}\right)^{1/2}$.

Für β klein genug ist also $E(\beta)$ Resonanz von $\mathbb{H}(\beta)$.

(P_n sind die Hermite Polynome .)

Bew.:

Wegen (2,7 (i)) ist x^2 c-analytisch in $B_{\pi/4}$ und damit (3,1) anwendbar.

$k^2(2n+1)$ ist für n ungerade nach (3,3) Eigenwert von $H_o \dot{+} x^2 =: H_c$ mit Eigenvektor $\psi_{c,n} := T\psi_n$;

T, ψ_n sind dabei wie in (3,4 (i)) definiert.

Anwendung von (3,2) ergibt:

$$|\mathrm{Im}\, a_2| = \pi k^8 \frac{d}{dE} \left(\psi_{c,n}, P^{H_o+\Sigma}_{(-\infty,E)} \psi_{c,n} \right)\Big|_{E=k^2(2n+1)}$$

$$= \pi k^8 \frac{d}{dE} \left(\psi_n, T^{-1} P^{H_o+\Sigma}_{(-\infty,E)} T\psi_n \right)\Big|_{E=k^2(2n+1)}$$

$$= \pi k^8 \frac{d}{dE} \left(\psi_n, P^{-k^4\Delta+\Sigma}_{(-\infty,E)} \psi_n \right)\Big|_{E=k^2(2n+1)} \qquad \text{wegen (3,3)}$$

$$= \pi k^8 \frac{d}{dE} \left(\psi_n, P^{-k^4\Delta+\Sigma}_{(\Sigma,E)} \psi_n \right)\Big|_{E=k^2(2n+1)}$$

$$= \pi k^6 \frac{d}{dE}\, 2 \int_o^{(E-\Sigma)^{1/2}} |\hat{\psi}_n(p/k^2)|^2 dp \qquad \text{wegen (3,4 (ii))}$$

$$= \frac{\pi^{1/2}}{n!} k^6\, 2k\, P_n^2(2^{1/2}\tau) \exp(-\tau^2) \frac{1}{2(k^2(2n+1)-\Sigma)^{1/2}}$$

$$= \frac{\pi^{1/2}}{n!} k^6 \frac{1}{\tau} P_n^2(2^{1/2}\tau) \exp(-\tau^2) .$$

∎

Zu diesem Befund machen wir noch die folgende

Bem.:

Offenbar ist die relative Lage des Nullpunktes des Oszillatorpotentials zum Boden des wesentlichen Spektrums von $H_o+\Sigma$ für das Verhalten dieser Prädissoziationsresonanzen im Parameter k von Bedeutung.

Für $\Sigma=0$ ist $\tau = (2n+1)^{1/2}$ und

$|\mathrm{Im}\, a_2| = O(k^6) \quad (k \to o)$.

Für $\Sigma < o$ ist $\tau = (2n+1+\frac{|\Sigma|}{k^2})^{1/2}$ und

$|\mathrm{Im}\, a_2| = o(e^{-\lambda|\Sigma|k^{-2}}) \quad (k \to o) \quad (\lambda \in (o,1)$ geeignet).

[Für n=1 und n=3 kann $\lambda=1$ zugelassen werden].

Das Verhalten für $\Sigma = o$ weicht von dem erwarteten der "shape" Resonanzen [CDS,84] deutlich ab.

ANHANG

Sei H ein Hilbertraum.
Wir zitieren einige Aussagen und Definitionen aus Kato's Buch [K] .

Def.:

(i) Sei T abgeschlossener Operator in H.
T heißt maximal accretiv falls gilt:

(1) NumRan $T \subset (E \in C/\ \ \mathrm{Re}E > a,\ a \in R$ geeignet)

(2) $\|(T-E)^{-1}\| \leq \frac{1}{|\mathrm{Re}E-a|}$ $\quad (E \in C/\ \mathrm{Re}E < a)$.

(ii) T heißt maximal sectoriell wenn
T maximal accretiv und
NumRan $T \subset (E \in C/\ |\arg(E-v)| \leq \theta < \pi/2, \theta$ geeignet, $v \in C$ geeignet)

(iii) Eine quadratische Form q heißt sectoriell falls:

NumRan $q \subset (E \in C/\ |\arg(E-v)| \leq \theta < \pi/2,\ \theta, v$ geeignet)

Satz:

Sei q eine dicht definierte, abgeschlossene, sectorielle Sesquilinearform in H.
Dann existiert ein eindeutiger maximal sectorieller Operator T mit:

(i) $D(T) \subset Q(q)$
$q(\phi,\psi) = (\phi, T\psi) \quad (\psi \in D(T), \phi \in Q(q))$

(ii) D(T) ist ein Formcore von q

(iii) Wenn für $\psi \in Q(q)$ ein $\chi \in H$ existiert mit
$q(\phi,\psi) = (\phi,\chi) \quad (\phi \in \mathrm{core}Q(q))$
dann gilt: $\psi \in D(T)$ und $T\psi = \chi$.

Def.:

(i) Eine Familie von abgeschlossenen Operatoren im Hilbertraum $T(.)$ in $G \subset C$ heißt analytisch vom Typ(A) falls gilt:

(1) $D(T(\beta)) = D \quad (\beta \in G)$

(2) $T(.)\psi$ ist analytisch in $G \quad (\psi \in D)$.

(ii) Eine Familie von Sesquilinearformen $q(.)$ in $G \subset C$ heißt analytisch vom Typ(a) falls gilt:

(1) $q(\beta)$ ist dicht definiert, sectoriell, abgeschlossen,

$$Q(q(\beta)) = Q \quad (\beta \in G)$$

(2) $q(.)(\phi,\psi)$ ist analytisch in $G \quad (\phi,\psi \in G)$

(iii) Ist $q(.)$ analytisch vom Typ(a) in G, dann heißt die durch das Repräsentationstheorem assoziierte Familie von maximal sectoriellen Operatoren $T(.)$ analytisch vom Typ(B).

Abkürzungen und Bezeichnungen

($\psi \in M$ geeignet)	: Es gibt ein Element ψ aus der M(enge).
($\psi \in M$)	: Für alle ψ aus M.
(a,b,c)	: Menge der Elemente a,b,c.
f.f.a.$x \in M$	: Für fast alle x aus einem Maßraum M.
$f(.)$	: Funktion von einer Variablen.
$f(x)$	: Wert von f für ein x.
$f\|_M$	: f eingeschränkt auf eine Teilmenge.
$P^H_{(a,b)}$	: Spektralprojektor eines selbstadjungierten Operators auf (a,b).
$A \dot{+} B$	: Formsumme zweier maximal sectorieller Operatoren A,B.
R	: Reelle Zahlen.
R^+	: Positive reelle Zahlen.
C	: Komplexe Zahlen.
C^+	: $(z \in C /\ \mathrm{Im} z > o)$.
$D(A)$	: Definitionsbereich eines Operators A.
$Q(A)$	: Formdefinitionbereich von A (c.f.p.7).
$Q(q)$	: Definitionsbereich einer Sesquilinearform.
$H^1(R)$	: $(\psi \in L^2(R) /\ D\psi \in L^2(R))$.
$H^1_o(R^+)$	: C.f. p.7 .
$\mathbb{L}(R^+)$	: $L^2(R^+) \oplus L^2(R^+)$ im Hilbertraumsinn.
$\sigma_d(A)$	: C.f. p.12 .
$\sigma_{ess}(A)$	: " .
$\sigma_{pp}(A)$	: Menge der Eigenwerte von A.
∎	: Ende eines Beweises.

LITERATUR

[LL], L.Landau, E.Lifschitz: Lehrbuch der theoretischen Physik;B.d.III; Berlin 1966 .

[H], G.Herzberg:Molecular Spektra and Molecular Structure, 1.Spektra of Diatomic Molecules; Van Nostrand, 1950.

[RSIV], M.Reed, B.Simon: Methods of Modern Mathematical Physics;Vol.IV;Academic Press, New York 1978.

[AC,71], J. Aguilar, J.M. Combes:CMP, 22 (1971).

[S,72], B.Simon: CMP, 27 (1972).

[CDS,84], J.M.Combes,P.Duclos,R.Seiler in:Springer Lecture Notes in Physics, 211 , 64 (1984).

[CDS,81], CDS in: Rigorous Atomic and Molecular Physics eds. Velo, Wightman ; Plenum Press, New York 1981.

[E,85], C.Erdmann: Dissertation; TUB 1985.

[S,73], B.Simon: Ann.Math., 63 (1973).

und:

[K], T.Kato: Perturbation Theory for Linear Operators; Springer, 1976.