Analytisk perturbationsteori
for lineære operatorer

JUNI 2009

Speciale af

Mette Kristensen

AALBORG UNIVERSITET
INSTITUT FOR MATEMATISKE FAG
FREDRIK BAYERS VEJ 7 G, 9220 AALBORG ØST

AALBORG UNIVERSITET
INSTITUT FOR MATEMATISKE FAG

Titel:

Analytisk perturbationsteori for lineære operatorer

Semester:

MAT6 – Speciale

Projektperiode:

2. feb. - 5. jun. 2009

Skrevet af:

Mette Kristensen

Vejleder:

Horia Cornean

Oplagstal: 7

Sidetal: 71

Synopsis:
I kvantemekanik beskrives energien i et fysisk system ved spektret af Hamiltonoperatoren hørende til systemet. Hamiltonoperatoren er en lineær selvadjungeret operator, og spektret er dermed reelt. I denne rapport betragtes kun kompakte operatorer, og spektret består således kun af egenværdier. Dermed tilsvarer Hamiltonoperatoren et system, som kun har diskrete energiniveauer. Ofte er det ikke muligt eksplicit at bestemme egenværdierne hørende til en Hamiltonoperator, som tilsvarer et virkeligt system, og derfor kan perturbationsteori anvendes til at approksimere spektret.
I denne rapport betragtes, hvordan perturbationsteori kan anvendes til at approksimere ikke-degenererede egenværdier for en kompakt Hamiltonoperator. I rapporten tages der udgangspunkt i en Hamiltonoperator, hvis egenværdier og egenvektorer er kendte. Denne Hamiltonoperator perturberes ved at lægge en kompakt selvadjungeret operator V til den oprindelige, og det vises i rapporten, at hvis normen af V er lille nok, vil den perturberede operator have egenværdier tæt på de oprindelige egenværdier, og disse egenværdier kan bestemmes ved anvendelse af Feshbachs formel, som også indføres i rapporten.

Summary

In quantum mechanics the energy of a system is described by means of the Hamiltonian of the particular system. A Hamiltonian is a linear self-adjoint operator and therefore the spectrum of the Hamiltonian is real. The physical interpretation of the spectrum of the Hamiltonian is that the spectrum is the energy levels of the system. A Hamiltonian can be a compact operator, but it can also be an unbounded operator. If it is a compact operator the spectrum consists only of eigenvalues and therefore the physical interpretation is that the system only have discrete energy levels and this correspond to a system only containing bounded states. If the operator is bounded the spectrum can consist of both discrete eigenvalues and a continuous spectrum which correspond to a system of both bounded states and scattered states.

In order to find the eigenvalues and the eigenstates of the system it is necessary to solve the eigenvalue equation. This is often impossible to do explicitly for a Hamiltonian that reflects reality, and this is the reason why perturbation theory is used to approximate the eigenvalues and eigenstates. The main idea in perturbation theory is to observe how the eigenvalues and eigenstates of a known operator changes when a small potential in the form of a self-adjoint operator is added to the original operator. In this report only compact operators are studied, and it will be shown that when the solvable Hamiltonian has a nondegenerate eigenvalue the perturbed Hamiltonian has nondegenerate eigenvalue close to the known eigenvalue if the perturbation is small enough.

The perturbed Hamiltonian will be written as

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V,$$

where H_0 is the solvable Hamiltonian, V is a selfadjoint operator and $\lambda \in \mathbb{R}$. In the report it will be proved that a nondegenerate eigenvalue of $H(\lambda)$ is analytic as a function of λ in an open ball centered at $\lambda = 0$. This means that the eigenvalue can be written as a Taylor series when $|\lambda|$ is small enough and through the report the first five coefficients of the Taylor series will be determined. This will be done by means of the Feshbach Formula and therefore this formula will be stated and proved.

Forord

Denne rapport er et speciale inden for hovedretningen *Anvendt matematisk analyse*, og er udarbejdet i perioden 2. februar til 5. juni 2009. Det overordnede emne er analytisk perturbationsteori, og der forudsættes kendskab til lineær algebra og matematisk analyse, herunder kompleks funktionsanalyse.

Igennem rapporten er skalarer hovedsageligt noteret med ζ eller z, mens vektorer er noteret med fed skrift, eksempelvis $\boldsymbol{\psi}$. Blokbogstaver er notationen for operatorer, dog gælder der, at E ikke noterer en operator, men derimod en egenværdi for en operator.

Litteraturhenvisninger noteres [Forfatter(e), udgivelsesår, evt. placering i kilden], og i starten af hvert kapitel anføres hvilke kilder, kapitlet hovedsageligt er baseret på. Anvendes et specifikt resultat fra en kilde, vil dette være anført i teksten. Litteraturhenvisningerne henviser til litteraturlisten, som findes bagerst i rapporten.

Til slut vil jeg gerne takke min vejleder Horia Cornean for god faglig bistand.

Aalborg den 5. juni 2009.

Mette Kristensen

Indhold

INDLEDNING

Denne indledning er baseret på [Agrawal, 2002].

I den klassiske mekanik betragtes partikler. Disse partikler kan lokaliseres til et helt bestemt sted i rummet til et givet tidspunkt. Hvis de kræfter, som virker på partiklen, er kendt, kan det forudsiges præcist, hvor i rummet partiklen vil befinde sig på et givet tidspunkt, og hvilken hastighed og energi partiklen vil have. Partiklens samlede energi vil således være givet ved summen af bevægelsesenergien og den potentielle energi,

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m} + E_{\text{pot}},$$

hvor m er partiklens masse, og p er størrelsen af partiklens impuls, som er givet ved $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, hvor $\mathbf{v}$ er partiklens hastighed, og E_{pot} er den potentielle energi. Det bemærkes således, at en klassisk partikel kan have en hvilken som helst energi.

Grundstenene til den klassiske mekanik blev lagt i sidste halvdel af 1600-tallet med Newton som en af de drivende kræfter. De mest essentielle resultater er opsummeret i de tre bevægelseslove, kaldet Newtons love, og med udgangspunkt i disse er det eksempelvis muligt at beskrive planeternes bevægelse om solen. I en lang årrække blev det antaget, at Newtons love og den klassiske mekanik fuldt ud afspejler naturen, idet de resultater, der kunne forudsiges med denne teori, stemte overens med de resultater, der fremkom ved eksperimenter. I slutningen af 1800-tallet og starten af 1900-tallet blev der dog foretaget en del eksperimenter, som ikke kunne forklares med den på dette tidspunkt kendte teori.

Derfor blev en ny teori, der afspejlede disse resultater, udledt; denne teori kaldes kvantemekanik. Hvis der betragtes ikke-relativistiske partikler – det vil sige partikler, som bevæger sig med en hastighed, der ikke er sammenlignelig med lysets hastighed – kan teorien opfattes som byggende på fem aksiomer. Disse fem aksiomer er givet ved

- Alle fysiske observable kan repræsenteres af lineære operatorer på et lineært indre produktrum. Tilstande i et system er repræsenteret af en vektor i det lineære indre produktrum.
- Kvadratet på absolutværdien af det indre produkt af en tilstandsvektor for systemet og en egenvektor for en fysisk observabel re-

præsenterer sandsynligheden for, at den fysiske observabel i denne tilstand er lig egenværdien hørende til egenvektoren for den fysiske observabel.

- Tilstandsrummet for identiske partikler med halvtalligt eller heltalligt spin er henholdsvis et antisymmetrisk og symmetrisk underrum af hele det direkte produktrum. Alle flerpartikeloperatorer hørende til fysisk observable skal bevare symmetrien af tilstandsrummet.

- Tidsudviklingen af en tilstand $\boldsymbol{\psi}$ i et lukket system er givet ved

  $$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial t} = H\boldsymbol{\psi},$$

  hvor H er en selvadjungeret operator, der kaldes Hamiltonoperatoren, og $\hbar$ er Plancks reducerede konstant. Hvis H ikke er tidsafhængig, repræsenter H energien i systemet. Dette er ikke tilfældet, hvis H er tidsafhængig.

- For alle typer af interaktioner mellem ikke-relativistiske partikler kræves en ny Hamiltonoperator for systemet. Eksempelvis er Hamiltonoperatoren for en ikke-relativistisk partikel i et klassisk, tidsuafhængigt potential $V(\mathbf{r})$ givet ved

  $$H = \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

  hvor P og V er operatorer og m er partiklens masse.

Således angiver spektret for en tidsuafhængig Hamiltonoperator energien i systemet, og i den forbindelse bemærkes det, at potentialet $V(\mathbf{r})$ har stor betydning for, om det er muligt at løse egenværdiligningen eksplicit. Hvis der opstilles en model, hvor der i potentialet er taget højde for alle de kræfter, der påvirker partiklen, vil det ofte i praksis være umuligt at løse egenværdiligningen og dermed finde energiniveauerne for partiklen. Derfor opstilles ofte en forsimplet model, som er mulig at løse, og denne simplere operator perturberes efterfølgende, idet egenværdier og egenvektorer således også perturberes.

I fysikkens verden bestemmes en ikke-degenereret perturberet egenværdi på følgende måde. Den perturberede operator kan udtrykkes som

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V,$$

hvor H_0 er en Hamiltonoperator, til hvilken egenværdier og egenvektorer er kendte, V er en selvadjungeret operator og $\lambda \in \mathbb{R}$. Det antages, at den ikke-degenererede egenværdi $E_1(\lambda)$ og den tilhørende normerede egenvektor $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$ er analytiske funktioner om $\lambda = 0$. Det vil sige, at

$$\begin{aligned} E_1(\lambda) &= \sum_{k\geq 0} \varepsilon_k \lambda^k \\ \boldsymbol{\psi}_1(\lambda) &= \boldsymbol{\psi}_1(0) + \sum_{k\geq 1} \lambda^k \mathbf{f}_k, \end{aligned}$$

hvor $\varepsilon_k \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{\psi}_1(0)$ er den normerede egnevektor hørende til egenværdien $E_1(0)$ for operatoren H_0, og $\mathbf{f}_k$ er vektorer. Da $E_1(\lambda)$ og $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$ er henholdsvis egenværdi og egenvektor hørende til $H(\lambda)$, skal ligningen

$$H(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda) = E_1(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$$

være opfyldt. Venstresiden i denne ligning kan også skrives som

$$\begin{aligned} H(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda) &= (H_0 + \lambda V)\left(\boldsymbol{\psi}_1(0) + \sum_{k\geq 1} \lambda^k \mathbf{f}_k\right) \\ &= E_1(0)\boldsymbol{\psi}_1(0) + \lambda V \boldsymbol{\psi}_1(0) + \sum_{k\geq 1} \lambda^k H_0 \mathbf{f}_k + \sum_{k\geq 1} \lambda^{k+1} V \mathbf{f}_k. \end{aligned}$$

Højresiden kan udtrykkes som

$$\begin{aligned} E_1(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda) &= \sum_{k\geq 0} \varepsilon_k \lambda^k \left(\boldsymbol{\psi}_1(0) + \sum_{k\geq 1} \lambda^k \mathbf{f}_k\right) \\ &= \varepsilon_0 \boldsymbol{\psi}_1(0) + \lambda(\varepsilon_1 \boldsymbol{\psi}_1(0) + \varepsilon_0 \mathbf{f}_1) + \dots. \end{aligned}$$

Idet højresiden er lig med venstresiden, gælder der, at

$$\varepsilon_0 = E_1(0),$$

da disse er de eneste led på henholdsvis højre- og venstresiden, som ikke afhænger af λ. Ligeledes må der gælde, at

$$V\boldsymbol{\psi}_1(0) + H_0 \mathbf{f}_1 = \varepsilon_1 \boldsymbol{\psi}_1(0) + E_1(0)\mathbf{f}_1. \tag{1}$$

Det bemærkes nu, at $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$ kan udtrykkes som $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda) = \boldsymbol{\psi}_1(0) + \lambda\mathbf{f}_1 + \mathcal{O}(\lambda^2)$, hvor $\mathcal{O}(\lambda^2)$ er et restled. Idet $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$ er normeret, gælder der, at

$$\begin{aligned}
1 &= \|\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)\|^2 \\
&= \langle \boldsymbol{\psi}_1(0) + \lambda\mathbf{f}_1 + \mathcal{O}(\lambda^2), \boldsymbol{\psi}_1(0) + \lambda\mathbf{f}_1 + \mathcal{O}(\lambda^2)\rangle \\
&= 1 + \lambda\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle + \lambda\langle \mathbf{f}_1, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \\
&= 1 + 2\lambda\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2).
\end{aligned}$$

Dette er ensbetydende med, at

$$0 = \lambda\left(2\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle + \mathcal{O}(\lambda)\right),$$

og dermed er

$$0 = (2\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle + \mathcal{O}(\lambda).$$

Dette skal også gælde for $\lambda = 0$, og dermed haves $\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle = 0$. Tages det indre produkt af $\boldsymbol{\psi}_1(0)$ og højre- og venstresiden i udtryk (1), fås

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle + \langle \boldsymbol{\psi}_1(0), H_0\mathbf{f}_1\rangle &= \varepsilon_1 + E_1(0)\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle \Leftrightarrow \\
\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle + \langle H_0\boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle &= \varepsilon_1 + E_1(0)\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle \Leftrightarrow \\
\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle + E_1(0)\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle &= \varepsilon_1 + E_1(0)\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle \Leftrightarrow \\
\varepsilon_1 &= \langle \boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle.
\end{aligned}$$

Og således gælder der også, at

$$(H_0 - E_1(0)I)\mathbf{f}_1 = \varepsilon_1\boldsymbol{\psi}_1(0) - V\boldsymbol{\psi}_1(0).$$

Umiddelbart kan $\mathbf{f}_1$ ikke bestemmes, idet operatoren $H_0 - E_1(0)I$ ikke er invertibel. Det vides, at $\mathrm{Re}\langle \boldsymbol{\psi}_1(0), \mathbf{f}_1\rangle = 0$, og det antages nu, at $\mathbf{f}_1$ er ortogonal på $\boldsymbol{\psi}_1(0)$. Dermed kan $\mathbf{f}_1$ udtrykkes som

$$\mathbf{f}_1 = \sum_{k\geq 2} c_k\boldsymbol{\psi}_k(0).$$

Defineres en ortogonalprojektion $P_\perp$ på underrummet udspændt af $\boldsymbol{\psi}_k(0)$ for $k \geq 2$, vil der gælde, at $P_\perp\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_1$ og $P_\perp\boldsymbol{\psi}_1(0) = \mathbf{0}$, og dermed fås

$$P_\perp(H_0 - E_1(0)I)P_\perp\mathbf{f}_1 = -P_\perp V\boldsymbol{\psi}_1(0).$$

Det bemærkes, at operatoren $P_\perp(H_0 - E_1(0)I)P_\perp$ er invertibel på underrummet defineret af ortogonalprojektionen $P_\perp$, og dermed er $\mathbf{f}_1$ givet ved

$$\mathbf{f}_1 = -\left(P_\perp(H_0 - E_1(0))P_\perp\right)^{-1} V \boldsymbol{\psi}_1(0).$$

På tilsvarende vis kan de øvrige koefficienter til $E_1(\lambda)$ og $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$ bestemmes.

I det ovenstående er det blot antaget, at $E_1(\lambda)$ og $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)$ er analytiske om $\lambda = 0$, og der er ikke angivet nogen grænse, for hvor stor absolutværdien af λ kan være, for at egenværdien og egenvektoren kan udtrykkes som potensrækker. Det er således ikke sikkert, at perturbationsproblemet kan løses, men metoden angiver, hvordan løsningen vil være, såfremt der eksisterer en løsning.

I denne rapport undersøges det, hvordan en ikke-degenereret egenværdi og dermed et energiniveau for en lineær kompakt og selvadjungeret operator ændres, hvis operatoren perturberes. Denne perturbation svarer til, at potentialet i Hamiltonoperatoren ændres en smule. Det undersøges også, hvor stor perturbation kan være, når metoden, som introduceres i rapporten, anvendes. Det vises, at for tilpas små værdier af λ kan egenværdierne og egenvektorerne for den perturberede operator udtrykkes som potensrækker, og de første fem koefficienter til potensrækken for egenværdien bestemmes ved hjælp af Feshbachs formel, som også indføres i rapporten.

Der betragtes kun lineære kompakte og selvadjungerede operatorer, idet kompakte operatorer blot har et punktspektrum, mens ubegrænsede selvadjungerede operatorer kan have både et punktspektrum og et kontinuert spektrum. Punktspektret svarer til energiniveauerne for bundne tilstande, mens det kontinuerte spektrum svarer til energien i spredningstilstande.

Kapitel 1

Indledende resultater

I dette kapitel indføres en række resultater omhandlende normen af begrænsede operatorer samt et resultat omhandlende mængden af de begrænsede operatorer på et Hilbertrum $\mathcal{H}$. Disse resultater skal anvendes i de følgende kapitler, og der vil således blive refereret til resultaterne senere i rapporten. Kapitlet er baseret på [Reed og Simon, 1972a, Kapitel II], [Cohen, 2003, Kapitel 7] og [Axler, 1997, Kapitel 6].

1.1 Egenskaber ved operatornormen

I de følgende kapitler vil der blive gjort brug af en række resultater omhandlende operatornormen. Derfor defineres denne i dette afsnit, og de resultater, som der gøres brug af, vil blive udledt.

Sætning 1.1 *Lad T være en operator på et Hilbertrum $\mathcal{H}$, og lad*

$$\begin{aligned} a &= \inf\{k \in \mathbb{R}_+ : \ \|T\mathbf{x}\| \leq k\,\|\mathbf{x}\|\,, \mathbf{x} \in \mathcal{H}\}, \\ b &= \sup\left\{\frac{\|T\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}\right\}, \\ c &= \sup\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| = 1\}, \\ d &= \sup\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| \leq 1\}. \end{aligned}$$

Hvis $\dim \mathcal{H} = 0$ *sættes $b = c = 0$. Der gælder så, at*

$$a = b = c = d.$$

Bevis:
Sætningen vil blive vist ved at vise, at $a \leq b \leq c \leq d \leq a$. For enhver vektor $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$, hvor $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, gælder der, at

$$b \geq \frac{\|T\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \Leftrightarrow \|T\mathbf{x}\| \leq b\,\|\mathbf{x}\|\,.$$

Dermed gælder der således, at

$$b \in \{k \in \mathbb{R}_+ : \ \|T\mathbf{x}\| \leq k\,\|\mathbf{x}\|\,, \mathbf{x} \in \mathcal{H}\},$$

og da a er defineret til at være infimum af denne mængde, må der gælde, at $a \leq b$.

For alle $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$, hvor $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, gælder der, at

$$\begin{aligned} \frac{\|T\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} &= \left|\frac{1}{\|\mathbf{x}\|}\right| \|T\mathbf{x}\| = \left\|\frac{T\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}\right\| = \left\|T\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}\right\| \\ &\leq \sup\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| = 1\} = c. \end{aligned}$$

Idet ovenstående ulighed gælder for alle $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$, er det således vist, at $b \leq c$.

Det bemærkes, at der gælder, at

$$\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| = 1\} \subset \{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| \leq 1\},$$

og dermed er

$$\sup\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| = 1\} \leq \sup\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| \leq 1\},$$

og det er således vist, at $c \leq d$.

Lad $\|\mathbf{x}\| \leq 1$, da gælder der jf. definitionen af a, at $\|T\mathbf{x}\| \leq a\|\mathbf{x}\| \leq a$, og da $d = \sup\{\|T\mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \|\mathbf{x}\| \leq 1\}$ haves der, at $d \leq a$. $\square$

Normen af en operator defineres nu på følgende måde.

Definition 1.2 *For enhver operator T på Hilbertrummet $\mathcal{H}$ defines normen af T, betegnet $\|T\|$, som tallet*

$$\|T\| = \inf\{k \in \mathbb{R}_+ : \ \|T\mathbf{x}\| \leq k\|\mathbf{x}\|, \mathbf{x} \in \mathcal{H}\}.$$

Det bemærkes, at de fire udtryk i Sætning 1.1 er ækvivalente, og de er således alle udtryk for operatornormen.

Sætning 1.3 *For to operatorer S og T på et Hilbertrum $\mathcal{H}$ gælder der, at*

$$\|ST\| \leq \|S\|\|T\|.$$

Bevis:
Der gælder, i henhold til definitionen af operatornormen, for alle $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$, at

$$\|ST\mathbf{x}\| = \|S(T\mathbf{x})\| \leq \|S\|\|T\mathbf{x}\| \leq \|S\|\|T\|\|\mathbf{x}\|.$$

Hvis $\|\mathbf{x}\| = 0$ haves $0 \leq 0$ og i dette tilfælde gælder således ligheden. Hvis $\|\mathbf{x}\| > 0$ kan uligheden omskrives til

$$\frac{\|ST\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|S\| \, \|T\| \, .$$

Idet denne ulighed gælder for alle $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$, hvor $\|\mathbf{x}\| > 0$, gælder den også, når der tages supremum over $\frac{\|ST\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$. Dermed haves i henhold til Sætning 1.1, at

$$\begin{aligned} \|ST\| &= \sup \left\{ \frac{\|ST\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \mathbf{x} \neq 0 \right\} \\ &\leq \sup\{\|S\| \, \|T\| : \mathbf{x} \in \mathcal{H}, \mathbf{x} \neq 0\} \\ &= \|S\| \, \|T\| \, . \end{aligned}$$

□

Beviset for den følgende sætning følger direkte af Sætning 1.3.

Sætning 1.4 *For en operator T på et Hilbertrum $\mathcal{H}$ gælder der, for $n \in \mathbb{N}$, at*

$$\|T^n\| \leq \|T\|^n \, .$$

Bevis:
Sætningen vises ved induktion. Ved $n = 1$ gælder $\left\|T^1\right\| = \|T\| = \|T\|^1$, og uligheden er således opfyldt med lighed. Ved $n = 2$ gælder $\left\|T^2\right\| = \|TT\| \leq \|T\| \, \|T\| = \|T\|^2$, hvor uligheden følger af Sætning 1.3. Antag nu, at $\|T^n\| \leq \|T\|^n$ for $n \geq 2$, så gælder

$$\left\|T^{n+1}\right\| = \|T^nT\| \leq \|T^n\| \, \|T\| \leq \|T\|^n \, \|T\| = \|T\|^{n+1} \, ,$$

og sætningen er dermed bevist. □

I den følgende sætning indføres Cauchy-Schwarz' ulighed.

Sætning 1.5 *For alle vektorer $\mathbf{x}$ og $\mathbf{y}$ i et Hilbertrum $\mathcal{H}$ gælder uligheden,*

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \leq \|\mathbf{x}\| \, \|\mathbf{y}\| \, .$$

Bevis:
Hvis $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ gælder udtrykket klart med lighed. Det ønskes således vist, at uligheden også gælder for $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$. Det antages, at $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$, og dermed gælder, at $\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle \neq 0$. Lad $\lambda \in \mathbb{C}$, så gælder der, at

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|\mathbf{x} - \lambda \mathbf{y}\| \\ &= \langle \mathbf{x} - \lambda \mathbf{y}, \mathbf{x} - \lambda \mathbf{y} \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - \overline{\lambda} \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle - \lambda \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle + |\lambda|^2 \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle. \end{aligned}$$

Denne ulighed gælder for alle $\lambda \in \mathbb{C}$, og dermed kan λ vælges som $\lambda = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1}$. Så haves

$$\begin{aligned} 0 \leq{} & \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1} - \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1} \\ & + \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-2} \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle \\ ={} & \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - 2 \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1} + \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1} \\ ={} & \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1} \\ ={} & \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - |\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|^2 \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle^{-1}. \end{aligned}$$

Dette kan også udtrykkes som

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle|^2 \leq \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle = \|\mathbf{x}\|^2 \|\mathbf{y}\|^2,$$

og dermed haves

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \leq \|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|.$$

$\square$

Et resultat, som følger af Cauchy-Schwarz' ulighed, er trekantsuligheden, som indføres i den følgende sætning.

Sætning 1.6 *For alle vektorer* $\mathbf{x}$ *og* $\mathbf{y}$ *i et Hilbertrum* $\mathcal{H}$ *gælder uligheden,*

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|.$$

Bevis:
Der gælder, at

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\|^2 &= \langle \mathbf{x}+\mathbf{y}, \mathbf{x}+\mathbf{y}\rangle \\
&= \langle \mathbf{x},\mathbf{x}\rangle + \langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle + \langle \mathbf{y},\mathbf{x}\rangle + \langle \mathbf{y},\mathbf{y}\rangle \\
&= \langle \mathbf{x},\mathbf{x}\rangle + 2\mathrm{Re}\langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle + \langle \mathbf{y},\mathbf{y}\rangle \\
&\le \|\mathbf{x}\|^2 + 2\left|\langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle\right| + \|\mathbf{y}\|^2 \\
&\le \|\mathbf{x}\|^2 + 2\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\| + \|\mathbf{y}\|^2 \\
&= (\|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|)^2,
\end{aligned}$$

hvor første ulighed åbenlyst gælder, og anden ulighed følger af Cauchy-Schwarz' ulighed. Dermed følger trekantsuligheden $\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\| \le \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$.
□

Beviset for den følgende sætning følger af trekantsuligheden.

Sætning 1.7 *For en række af operatorer på et Hilbertrum $\mathcal{H}$ gælder der, at*

$$\left\|\sum_{k\ge 1} A_k\right\| \le \sum_{k\ge 1} \|A_k\|.$$

Bevis:
I henhold til definitionen af operatornormen samt Sætning 1.1 gælder der, at

$$\left\|\sum_{k\ge 1} A_k\right\| = \sup_{\|\mathbf{x}\|=1} \left\|\sum_{k\ge 1} A_k\mathbf{x}\right\|.$$

Samtidig gælder der jf. trekantsuligheden, Sætning 1.6, for alle vektorer $\mathbf{x}$ med $\|\mathbf{x}\| = 1$, at

$$\begin{aligned}
\left\|\sum_{k\ge 1} A_k\mathbf{x}\right\| &\le \|A_1\mathbf{x}\| + \left\|\sum_{k\ge 2} A_k\mathbf{x}\right\| \le \dots \\
&\le \sum_{k\ge 1} \|A_k\mathbf{x}\| \\
&\le \sum_{k\ge 1} \|A_k\|.
\end{aligned}$$

Idet dette gælder for alle $\mathbf{x}$ med $\|\mathbf{x}\| = 1$, gælder der således, at

$$\left\| \sum_{k\geq 1} A_k \right\| \leq \sum_{k\geq 1} \|A_k\|,$$

og sætningen er således vist. □

Beviset for den følgende sætning følger af Sætning 1.7.

Sætning 1.8 *Lad $A(z)$ være en integrabel operator på et Hilbertrum $\mathcal{H}$. Så gælder der, at*

$$\left\| \int_\Gamma A(z) dz \right\| \leq \int_\Gamma \|A(z)\| \, |dz|.$$

Bevis:
Det bemærkes, at integralet er grænseværdien af Riemann-summen, og dermed gælder der, at

$$\left\| \int_\Gamma A(z) \mathrm{d}z - \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} A(z_k)(z_{k+1} - z_k) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2}. \tag{1.1}$$

Samtidig gælder der i henhold til Sætning 1.7, at

$$\left\| \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} A(z_k)(z_{k+1} - z_k) \right\| \leq \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} \|A(z_k)\| \, |z_{k+1} - z_k|.$$

Idet integralet er grænseværdien af Riemann-summen gælder der også, at

$$\left| \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} \|A(z_k)\| \, |z_{k+1} - z_k| - \int_\Gamma \|A(z)\| \, |\mathrm{d}z| \right| \leq \frac{\varepsilon}{2}. \tag{1.2}$$

Det bemærkes, at $N_{\frac{\varepsilon}{2}}$ ikke nødvendigvis er det samme i udtryk (1.1) og (1.2), men vælges det største af dem i begge udtryk, gælder begge uligheder klart. Dermed haves således, at

$$\begin{aligned}
&\left\|\int_\Gamma A(z)\mathrm{d}z\right\| \\
&= \left\|\int_\Gamma A(z)\mathrm{d}z - \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} A(z_k)(z_{k+1}-z_k) + \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} A(z_k)(z_{k+1}-z_k)\right\| \\
&\leq \left\|\int_\Gamma A(z)\mathrm{d}z - \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} A(z_k)(z_{k+1}-z_k)\right\| + \left\|\sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} A(z_k)(z_{k+1}-z_k)\right\| \\
&\leq \frac{\varepsilon}{2} + \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} \|A(z_k)\| \, |z_{k+1}-z_k| \\
&\leq \frac{\varepsilon}{2} + \sum_{k=1}^{N_{\frac{\varepsilon}{2}}} \|A(z_k)\| \, |z_{k+1}-z_k| - \int_\Gamma \|A(z)\| \, |\mathrm{d}z| + \int_\Gamma \|A(z)\| \, |\mathrm{d}z| \\
&\leq \varepsilon + \int_\Gamma \|A(z)\| \, |\mathrm{d}z| .
\end{aligned}$$

Da ε er arbitrær, gælder der således, at

$$\left\|\int_\Gamma A(z)\mathrm{d}z\right\| \leq \int_\Gamma \|A(z)\| \, |\mathrm{d}z| ,$$

og sætningen er således bevist. □

Også Parsevals ligning anvendes i de følgende kapitler.

Sætning 1.9 *Lad $\mathcal{H}$ være et Hilbertrum, og lad $\boldsymbol{\psi}_k$, hvor $k = 1, 2, \ldots, N$, hvor $N \leq \infty$, udgøre en ortonormal basis for Hilbertrummet. Så gælder for enhver vektor $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$, at*

$$\|\mathbf{f}\|^2 = \sum_{k=1}^{N} |\langle \boldsymbol{\psi}_k, \mathbf{f}\rangle|^2 .$$

Bevis:
Det bemærkes, at idet $\boldsymbol{\psi}_k$'erne udgør en ortonormal basis, gælder der, at

$$\langle \boldsymbol{\psi}_k, \boldsymbol{\psi}_j\rangle = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad k = j, \\ 0 & \text{for} \quad k \neq j. \end{cases}$$

Ydermere bemærkes det, at udfra de ortonormale basisvektorer kan der dannes ortogonalprojektioner, som indbyrdes er ortogonale på hinanden. Den k'te ortogonalprojektion er givet ved

$$P_k\mathbf{f} = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k \rangle \boldsymbol{\psi}_k.$$

Det bemærkes, at $\mathbf{f}$ kan udtrykkes som en linearkombination af basisvektorerne; det vil sige, at

$$\mathbf{f} = \sum_{k=1}^{N} c_k \boldsymbol{\psi}_k,$$

hvor c_k er komplekse konstanter. Idet $\boldsymbol{\psi}_k$'erne er ortonormale, gælder der, at

$$\begin{aligned} P_j\mathbf{f} &= \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_j \rangle \boldsymbol{\psi}_j \\ &= \left\langle \sum_{k=1}^{N} c_k \boldsymbol{\psi}_k, \boldsymbol{\psi}_j \right\rangle \boldsymbol{\psi}_j \\ &= \sum_{k=1}^{N} c_k \langle \boldsymbol{\psi}_k, \boldsymbol{\psi}_j \rangle \boldsymbol{\psi}_j \\ &= c_j \boldsymbol{\psi}_j. \end{aligned}$$

Dermed gælder der, at $\mathbf{f} = \sum_{k=1}^{N} P_k\mathbf{f}$, og det betyder, at $\sum_{k=1}^{N} P_k = I$. Således kan $\|\mathbf{f}\|^2$ udtrykkes ved

$$\begin{aligned} \|\mathbf{f}\|^2 &= \langle \mathbf{f}, \mathbf{f} \rangle \\ &= \left\langle \sum_{k=1}^{N} \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k \rangle \boldsymbol{\psi}_k, \sum_{j=1}^{N} \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_j \rangle \boldsymbol{\psi}_j \right\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k \rangle \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_j \rangle^* \langle \boldsymbol{\psi}_k, \boldsymbol{\psi}_j \rangle \\ &= \sum_{k=1}^{N} \left| \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k \rangle \right|^2, \end{aligned}$$

hvor sidste lighedstegn følger af, at $\langle \boldsymbol{\psi}_k, \boldsymbol{\psi}_j \rangle = 0$ for $k \neq j$, og sætningen er dermed bevist. $\square$

Også den følgende sætning anvendes senere i rapporten.

Sætning 1.10 *Lad T være en selvadjungeret og kompakt operator på et Hilbertrum $\mathcal{H}$, og lad $\zeta \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, så gælder der, at*

$$\left\|(T-\zeta I)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{|Im(\zeta)|}.$$

Bevis:
Idet T er en selvadjungeret og kompakt operator, gælder der i henhold til [Kato, 1980, Theorem III.6.26], at spektret for T består af reelle egenværdier. Idet $\zeta \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, gælder der således, at ζ er indeholdt i resolventmængden for T, og operatoren $T-\zeta I$ er således invertibel.

Det bemærkes, at idet T er selvadjungeret, gælder der, at

$$\langle T\mathbf{f}, \mathbf{f}\rangle = \langle \mathbf{f}, T\mathbf{f}\rangle = \overline{\langle T\mathbf{f}, \mathbf{f}\rangle}.$$

Dermed må værdien af det indre produkt være reel. Således gælder der i henhold til Cauchy-Schwarts' ulighed, Sætning 1.5, at

$$\begin{aligned}\|\mathbf{f}\| \, \|(T-\zeta I)\mathbf{f}\| &\geq |\langle (T-\zeta I)\mathbf{f}, \mathbf{f}\rangle| \\ &= |\langle (T-\mathrm{Re}(\zeta))\mathbf{f}, \mathbf{f}\rangle - \mathrm{i}\mathrm{Im}(\zeta)\langle \mathbf{f}, \mathbf{f}\rangle| \\ &\geq |\mathrm{Im}(\zeta)| \, \|\mathbf{f}\|^2 .\end{aligned}$$

Dermed haves også, at

$$\|(T-\zeta I)\mathbf{f}\| \geq |\mathrm{Im}(\zeta)| \, \|\mathbf{f}\| .$$

Da $T-\zeta I$ er invertibel, kan alle vektorer $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$ udtrykkes som $\mathbf{f} = (T-\zeta I)^{-1}\mathbf{g}$, hvor $\mathbf{g} \in \mathcal{H}$. Så haves

$$\begin{aligned}\|\mathbf{g}\| = \left\|(T-\zeta I)(T-\zeta I)^{-1}\mathbf{g}\right\| &= \|(T-\zeta I)\mathbf{f}\| \\ \geq |\mathrm{Im}(\zeta)| \, \|\mathbf{f}\| &= |\mathrm{Im}(\zeta)| \left\|(T-\zeta I)^{-1}\mathbf{g}\right\| .\end{aligned}$$

Dette kan også udtrykkes som

$$\left\|(T-\zeta I)^{-1}\mathbf{g}\right\| \leq \frac{\|\mathbf{g}\|}{|\mathrm{Im}(\zeta)|},$$

og da dette udtryk gælder for et vilkårligt $\mathbf{g} \in \mathcal{H}$, må der i henhold til Definition 1.2 gælde, at

$$\left\|(T-\zeta I)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta)|},$$

og sætningen er dermed bevist. □

1.2 Egenskab ved begrænsede operatorer

Senere i rapporten gøres der brug af følgende sætning, og den vises derfor her.

Sætning 1.11 *Mængden af begrænsede lineære operatorer på Hilbertrummet $\mathcal{H}$, $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ er et fuldstændigt metrisk rum.*

Bevis:
Hvis $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ er et fuldstændigt metrisk rum, skal der gælde, at enhver Cauchyfølge i $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ er konvergent og har en grænse i $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Lad $\{A_n\}_{n\geq 0}$ være en Cauchyfølge i $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Det bemærkes, at da A_n er en begrænset operator, gælder der, at der eksisterer et $k < \infty$, så $\|A_n\| \leq k$ for alle n. Da $\{A_n\}$ er en Cauchyfølge, gælder der, at

$$\|A_{n+p} - A_n\| < \varepsilon,$$

for alle $p \geq 0$ og $n \geq N_\varepsilon$. Nu defineres $\boldsymbol{\psi}_n = A_n\mathbf{f}$, hvor $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$. Dermed gælder også, at $\boldsymbol{\psi}_n \in \mathcal{H}$, og der haves, at

$$\|\boldsymbol{\psi}_{n+p} - \boldsymbol{\psi}_n\| = \|(A_{n+p} - A_n)\mathbf{f}\| \leq \|A_{n+p} - A_n\| \|\mathbf{f}\| < \varepsilon \|\mathbf{f}\|,$$

for alle $p \geq 0$ og $n \geq N_\varepsilon$. Således er følgen $\{\boldsymbol{\psi}_n\}_{n\geq 0}$ en Cauchyfølge i Hilbertrummet $\mathcal{H}$, og da et Hilbertrum er et fuldstændigt metrisk rum, har denne følge en grænseværdi i $\mathcal{H}$. Denne grænse defineres som

$$\boldsymbol{\psi}_\infty = A_\infty\mathbf{f} = \lim_{n\to\infty} A_n\mathbf{f}.$$

For at vise at $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ udgør et fuldstændigt metrisk rum, skal det vises, at operatoren A_∞ er begrænset, og at A_n i norm konvergerer mod A_∞.

Det ønskes først vist, at A_∞ er begrænset. Der gælder, at $\{\boldsymbol{\psi}_n\}_{n\geq 0} = \{A_n\mathbf{f}\}_{n\geq 0}$ konvergerer mod $A_\infty\mathbf{f}$, og dermed eksisterer et n, så

$$\|A_\infty\mathbf{f} - A_n\mathbf{f}\| < \|\mathbf{f}\|.$$

Så haves der jf. trekantsuligheden, Sætning 1.6, at

$$\begin{aligned}\|A_\infty\mathbf{f}\| &= \|A_n\mathbf{f} + A_\infty\mathbf{f} - A_n\mathbf{f}\| \leq \|A_n\mathbf{f}\| + \|A_\infty\mathbf{f} - A_n\mathbf{f}\| \\ &< k\|\mathbf{f}\| + \|\mathbf{f}\| = (k+1)\|\mathbf{f}\|.\end{aligned}$$

Idet dette gælder for alle $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$, gælder der i henhold til Definition 1.2, at $\|A_\infty\| < k+1$, og A_∞ er således begrænset.

Nu ønskes konvergens i normen vist. Der gælder, at

$$\begin{aligned}\|A_\infty \mathbf{f} - A_n \mathbf{f}\| &= \|A_\infty \mathbf{f} - A_{n+p}\mathbf{f} + A_{n+p}\mathbf{f} - A_n \mathbf{f}\| \\ &\leq \|A_\infty \mathbf{f} - A_{n+p}\mathbf{f}\| + \|A_{n+p}\mathbf{f} - A_n \mathbf{f}\|.\end{aligned}$$

Hvis $n \geq N_{\frac{\varepsilon}{2}}$, gælder der, at $\|A_{n+p}\mathbf{f} - A_n\mathbf{f}\| < \frac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{f}\|$, og dermed haves

$$\|(A_\infty - A_n)\mathbf{f}\| < \frac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{f}\| + \|A_\infty \mathbf{f} - A_{n+p}\mathbf{f}\|,$$

for alle $p \geq 0$ og $n \geq N_{\frac{\varepsilon}{2}}$. Da denne ulighed gælder for alle p, må der for alle $n \geq N_{\frac{\varepsilon}{2}}$ gælde, at

$$\|(A_\infty - A_n)\mathbf{f}\| \leq \frac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{f}\| < \varepsilon\|\mathbf{f}\|.$$

Da denne ulighed gælder for alle $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$, gælder der i henhold til Definition 1.2, at

$$\|A_\infty - A_n\| \leq \varepsilon,$$

og der er således konvergens i normen. □

I dette kapitel er en række resultater omhandlende normen af operatorer og et resultat omhandlende mængden af de begrænsede lineære operatorer på et Hilbertrum $\mathcal{H}$ blevet indført. Disse resultater anvendes i de følgende kapitler, og der vil derfor blive referet til sætningerne indført i dette kapitel.

Kapitel 2

Feshbachs formel

I dette kapitel indføres Feshbachs formel. Denne formel angiver, hvordan resolventen for en kompakt og selvadjungeret lineær operator kan udtrykkes. Resolventen indeholder information om spektret for operatoren, idet resolventen er singulær for værdier i spektret. Før Feshbachs formel formuleres og bevises, indføres noget teori om ortogonalprojektioner, og notationen, som anvendes i resten af rapporten, præsenteres. Kapitlet er baseret på [Cornean, 2008], [Reed og Simon, 1972a, Kapitel VI] og [Wade, 2004, Kapitel 6].

Lad $\mathcal{H}$ være et Hilbertrum, og lad $H : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ være en selvadjungeret og kompakt Hamiltonoperator givet ved

$$H = H_0 + V,$$

hvor H_0 er en kompakt og selvadjungeret operator, for hvilken egenværdier og egenvektorer er kendte, og V er en kompakt og selvadjungeret perturbation. Da H er en kompakt og selvadjungeret operator, består spektret for operatoren af reelle egenværdier.

Lad P_{eff} være en ortogonalprojektion, som kommuterer med H_0; det vil sige at $P_{\text{eff}} H_0 = H_0 P_{\text{eff}}$. At P_{eff} er en ortogonalprojektion, betyder, at kravene

$$\begin{aligned} P_{\text{eff}} &= P_{\text{eff}}^*, \\ P_{\text{eff}} &= P_{\text{eff}}^2 \end{aligned}$$

er opfyldt. Ydermere defineres operatoren $P_\perp$ ved

$$P_\perp = I - P_{\text{eff}},$$

hvor I er identitetsoperatoren. Operatoren $P_\perp$ er en ortogonalprojektion, idet der gælder, at

$$P_\perp^* = (I - P_{\text{eff}})^* = I^* - P_{\text{eff}}^* = I - P_{\text{eff}} = P_\perp,$$

og

$$\begin{aligned} P_\perp^2 = (I - P_\perp)^2 = I^2 + P_{\text{eff}}^2 - I P_{\text{eff}} - P_{\text{eff}} I = I + P_{\text{eff}} - 2P_{\text{eff}} = I - P_{\text{eff}} \\ = P_\perp. \end{aligned}$$

Det bemærkes, at der gælder, at

$$P_{\text{eff}} + P_{\perp} = P_{\text{eff}} + I - P_{\text{eff}} = I$$

og

$$P_{\text{eff}}P_{\perp} = P_{\perp}P_{\text{eff}} = P_{\text{eff}} - P_{\text{eff}}^2 = P_{\text{eff}} - P_{\text{eff}} = 0.$$

De to projektioner er således ortogonale på hinanden, og dermed er følgende dekomposition af Hilbertrummet $\mathcal{H}$ mulig, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{eff}} \oplus \mathcal{H}_{\perp}$. Det betyder, at enhver vektor $\mathbf{x} \in \mathcal{H}$ kan udtrykkes som

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix},$$

hvor $\boldsymbol{\alpha} = P_{\text{eff}}\mathbf{x}$ og $\boldsymbol{\beta} = P_{\perp}\mathbf{x}$.

Nu betragtes operatoren H virkende på vektoren $\mathbf{x}$,

$$\begin{aligned} H\mathbf{x} &= IHI\mathbf{x} \\ &= (P_{\text{eff}} + P_{\perp})H(P_{\text{eff}} + P_{\perp})\mathbf{x} \\ &= (P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}} + P_{\text{eff}}HP_{\perp} + P_{\perp}HP_{\text{eff}} + P_{\perp}HP_{\perp})\mathbf{x} \\ &= P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}}^2\mathbf{x} + P_{\text{eff}}HP_{\perp}^2\mathbf{x} + P_{\perp}HP_{\text{eff}}^2\mathbf{x} + P_{\perp}HP_{\perp}^2\mathbf{x} \\ &= P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\text{eff}}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta} + P_{\perp}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\perp}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta}. \end{aligned}$$

Det bemærkes således, at $H\mathbf{x}$ kan udtrykkes som $(P_{\text{eff}} + P_{\perp})H\mathbf{x}$, hvor

$$\begin{aligned} P_{\text{eff}}H\mathbf{x} &= P_{\text{eff}}(P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\text{eff}}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta} + P_{\perp}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\perp}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta}) \\ &= P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\text{eff}}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta} \end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned} P_{\perp}H\mathbf{x} &= P_{\perp}(P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\text{eff}}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta} + P_{\perp}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\perp}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta}) \\ &= P_{\perp}HP_{\text{eff}}\boldsymbol{\alpha} + P_{\perp}HP_{\perp}\boldsymbol{\beta}. \end{aligned}$$

Dermed kan $H\mathbf{x}$ udtrykkes som en matrix virkende på vektoren $\mathbf{x}$ udtrykt ved $\boldsymbol{\alpha}$ og $\boldsymbol{\beta}$,

$$\begin{aligned} H\begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} P_{\text{eff}}HP_{\text{eff}} & P_{\text{eff}}HP_{\perp} \\ P_{\perp}HP_{\text{eff}} & P_{\perp}HP_{\perp} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} H_{\text{eff}} & H_{\text{eff},\perp} \\ H_{\perp,\text{eff}} & H_{\perp} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

og operatoren H kan således udtrykkes som matricen

$$H = \begin{bmatrix} H_{\text{eff}} & H_{\text{eff},\perp} \\ H_{\perp,\text{eff}} & H_{\perp} \end{bmatrix}.$$

Da P_{eff} er valgt, så den kommuterer med H_0, gælder der, at

$$\begin{aligned} H_{\text{eff},\perp} &= P_{\text{eff}}(H_0 + V)P_{\perp} = P_{\text{eff}}H_0P_{\perp} + P_{\text{eff}}VP_{\perp} \\ &= H_0P_{\text{eff}}P_{\perp} + V_{\text{eff},\perp} = V_{\text{eff},\perp}. \end{aligned}$$

Tilsvarende kan det vises, at $H_{\perp,\text{eff}} = V_{\perp,\text{eff}}$. Dermed kan matricen for H udtrykkes ved

$$H = \begin{bmatrix} H_{\text{eff}} & V_{\text{eff},\perp} \\ V_{\perp,\text{eff}} & H_{\perp} \end{bmatrix}.$$

Operatoren H er blevet udtrykt ved hjælp af ortogonalprojektionerne P_{eff} og $P_{\perp}$, og Feshbachs formel kan nu formuleres.

2.1 Feshbachs formel

Feshbachs formel angiver, hvordan resolventen kan udtrykkes. Det er vigtigt, idet resolventen af en operator indeholder al information om operatoren og dermed det system, den repræsenterer. De værdier af ζ, for hvilke resolventen er singulær, må være indholdt i spektret for operatoren H. I sætningen og beviset er konventionen, at H kan udtrykkes som $H = H_0 + V$, hvor H_0 er en kompakt selvadjungeret Hamiltonoperator, hvortil egenværdier og egenvektorer er kendte, og V er en perturbation i form af en kompakt selvadjungeret operator. Ydermere gælder, at ortogonalprojektionen P_{eff} kommuterer med H_0.

Sætning 2.1 *Lad $H = H_0 + V$ være en selvadjungeret og kompakt operator. Hvis ζ er indeholdt i resolventmængden for H, er resolventen af H givet ved*

$$(H - \zeta I)^{-1} = \begin{bmatrix} S_W & -S_WVR \\ -RVS_W & R + RVS_WVR \end{bmatrix},$$

hvor

$$\begin{aligned} &R(\zeta) = (P_{\perp}(H - \zeta I)P_{\perp})^{-1}, \\ &W(\zeta) = -P_{\text{eff}}VR(\zeta)VP_{\text{eff}}, \\ &S_W(\zeta) = (H_{\text{eff}} + W(\zeta) - P_{\text{eff}}\zeta IP_{\text{eff}})^{-1}. \end{aligned}$$

Bevis:
Operatoren H er kompakt og selvadjungeret, og derfor består spektret for H jf. [Kato, 1980, Theorem III.6.26] kun af reelle egenværdier.

Det ønskes først vist, at operatoren $(H-\zeta I)^{-1}$ er en analytisk funktion af ζ på et domæne D, som udgøres af den øvre komplekse halvplan. Det betyder, at det ønskes vist, at for

$$\zeta \in \mathbb{C}_+ = \{\zeta \in \mathbb{C} : \mathrm{Im}(\zeta) > 0\}$$

kan $(H-\zeta I)^{-1}$ udtrykkes som

$$(H-\zeta I)^{-1} = \sum_{k\geq 0} A_k(\zeta-\zeta_0)^k,$$

hvor $\zeta_0 \in \mathbb{C}_+$, $A_k \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ og $\sum_{k\geq 0} |\zeta-\zeta_0|^k \|A_k\| < \infty$.

Det bemærkes, at $\zeta_0 \in \mathbb{C}_+$ og derfor er operatoren $H-\zeta_0 I$ invertibel, idet egenværdierne for H er reelle. Operatoren $H-\zeta I$ kan udtrykkes som

$$\begin{aligned} H-\zeta I &= H-\zeta_0 I - (\zeta I - \zeta_0 I) \\ &= \left(I-(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)(H-\zeta_0 I). \end{aligned} \tag{2.1}$$

Denne operator er invertibel, hvis operatorerne $I-(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}$ og $H-\zeta_0 I$ er det. Operatoren $H-\zeta_0 I$ er invertibel og $I-(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}$ er invertibel, hvis $\left\|(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\| < 1$, idet der så gælder, at

$$\left(I-(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^{-1} = \sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^k.$$

At dette er tilfældet ses af, at

$$\begin{aligned} &\left(I-(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)\sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^k \\ &\quad= \sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^k - \sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^{k+1} \\ &\quad= I + \sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^{k+1} - \sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^{k+1} \\ &\quad= I. \end{aligned}$$

På tilsvarende måde kan det vises, at

$$I = \sum_{k\geq 0}\left((\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^k\left(I-(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right).$$

Det ønskes nu vist, at $\left\|(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\| < 1$. Der gælder, at

$$\left\|(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\| = |\zeta-\zeta_0| \left\|(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\|.$$

I henhold til Sætning 1.10, gælder der, idet H er selvadjungeret og kompakt, og $\zeta_0 \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, at

$$\left\|(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|},$$

og dermed er kravet $\left\|(\zeta-\zeta_0)(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\| < 1$ opfyldt, hvis $|\zeta-\zeta_0| < |\mathrm{Im}(\zeta_0)|$. Hvis dette er tilfældet, kan resolventen jf. udtryk (2.1) udtrykkes ved

$$\begin{aligned}(H-\zeta I)^{-1} &= (H-\zeta_0 I)^{-1}\sum_{k\geq 0}(\zeta-\zeta_0)^k\left((H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^k \\ &= \sum_{k\geq 0} A_k(\zeta-\zeta_0)^k,\end{aligned}$$

hvor $A_k = \left((H-\zeta_0 I)^{-}\right)^{k+1}$. Det bemærkes, at der jf. Sætning 1.4 og Sætning 1.10 gælder, at

$$\|A_k\| = \left\|\left((H-\zeta_0 I)^{-1}\right)^{k+1}\right\| \leq \left\|(H-\zeta_0 I)^{-1}\right\|^{k+1} \leq \frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|^{k+1}},$$

og dermed haves, at

$$|\zeta-\zeta_0|^k \|A_k\| \leq |\zeta-\zeta_0|^k \frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|^{k+1}} = \frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|}\left(\frac{|\zeta-\zeta_0|}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|}\right)^k.$$

Idet der gælder, at $\frac{|\zeta-\zeta_0|}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|} < 1$, er rækken

$$\sum_{k\geq 0}\frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|}\left(\frac{|\zeta-\zeta_0|}{|\mathrm{Im}(\zeta_0)|}\right)^k$$

således absolut og uniformt konvergent, og det er således vist, at resolventen $(H-\zeta I)^{-1}$ er en analytisk funktion af ζ for $\zeta \in \mathbb{C}_+$.

På tilsvarende måde, kan det vises, at resolventen er en analytisk funktion af ζ for $\zeta \in \mathbb{C}_-$. At en funktion er analytisk i et punkt, betyder, at funktionen også er analytisk i en åben kugle om dette punkt. Derfor er resolventen også analytisk for reelle værdier af ζ, så længe ζ ikke er en egenværdi for H.

Det ønskes nu vist, at resolventen kan udtrykkes som i sætningen på hele resolventmængden.

Lad de to operatorer A og B være givet ved

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} H_{\text{eff}} & 0 \\ 0 & H_{\perp} \end{bmatrix}, \\ B &= \begin{bmatrix} 0 & H_{\text{eff},\perp} \\ H_{\perp,\text{eff}} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & V_{\text{eff},\perp} \\ V_{\perp,\text{eff}} & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Det bemærkes, at der gælder, at $H = A + B$. Det ses, at A og B kan udtrykkes som

$$\begin{aligned} A &= P_{\text{eff}} H P_{\text{eff}} + P_{\perp} H P_{\perp}, \\ B &= P_{\text{eff}} H P_{\perp} + P_{\perp} H P_{\text{eff}}, \end{aligned}$$

og dermed er A og B selvadjungerede, idet

$$\begin{aligned} A^* &= P_{\text{eff}}^* H^* P_{\text{eff}}^* + P_{\perp}^* H^* P_{\perp}^* \\ &= P_{\text{eff}} H P_{\text{eff}} + P_{\perp} H P_{\perp} = A, \\ B^* &= P_{\text{eff}}^* H^* P_{\perp}^* + P_{\perp}^* H^* P_{\text{eff}}^* \\ &= P_{\perp} H P_{\text{eff}} + P_{\text{eff}} H P_{\perp} = B. \end{aligned}$$

Operatoren $A - \zeta I$ kan udtrykkes som

$$A - \zeta I = \begin{bmatrix} H_{\text{eff}} - P_{\text{eff}} \zeta I P_{\text{eff}} & 0 \\ 0 & H_{\perp} - P_{\perp} \zeta I P_{\perp} \end{bmatrix}.$$

Da A er selvadjungeret og kompakt, er $A - \zeta I$ invertibel for et givet ζ, hvor $\mathrm{Im}(\zeta) > 0$ (eller $\mathrm{Im}(\zeta) < 0$). Således er operatoren $(A - \zeta I)^{-1}$ givet ved

$$\begin{aligned} (A - \zeta I)^{-1} &= \begin{bmatrix} (H_{\text{eff}} - P_{\text{eff}} \zeta I P_{\text{eff}})^{-1} & 0 \\ 0 & (H_{\perp} - P_{\perp} \zeta I P_{\perp})^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A_{\text{eff}} & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

hvor

$$A_{\text{eff}} = (H_{\text{eff}} - P_{\text{eff}}\zeta I P_{\text{eff}})^{-1} = (P_{\text{eff}}(H - \zeta I)P_{\text{eff}})^{-1},$$
$$R = (H_{\perp} - P_{\perp}\zeta I P_{\perp})^{-1} = (P_{\perp}(H - \zeta I)P_{\perp})^{-1}.$$

At $(A - \zeta I)^{-1}$ må være givet på denne måde, ses af, at der med dette udtryk for $(A - \zeta I)^{-1}$ gælder, at

$$(A - \zeta I)(A - \zeta I)^{-1} = (A - \zeta I)^{-1}(A - \zeta I) = I.$$

Det bemærkes nu, at operatoren $H - \zeta I$ kan udtrykkes som

$$H - \zeta I = A - \zeta I + B = (I + B(A - \zeta I)^{-1})(A - \zeta I),$$

idet $A - \zeta I$ er invertibel for et givet ζ, hvor $|\mathrm{Im}(\zeta)| > 0$. Nu betragtes rækken

$$\begin{aligned} &\sum_{k\geq 0}(-1)^k(A - \zeta I)^{-1}(B(A - \zeta I)^{-1})^k \\ &\qquad = (A - \zeta I)^{-1}\sum_{k\geq 0}(-B(A - \zeta I)^{-1})^k. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Dette er en Neumannrække, og den er absolut og uniformt konvergent for alle ζ, som opfylder, at

$$\left\|-B(A - \zeta I)^{-1}\right\| = \left\|B(A - \zeta I)^{-1}\right\| < 1.$$

Da A er selvadjungeret og kompakt, og $\zeta \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, gælder der i henhold til Sætning 1.10, at

$$\left\|(A - \zeta I)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta)|},$$

og idet B er begrænset, haves således, at

$$\left\|B(A - \zeta I)^{-1}\right\| \leq \|B\| \left\|(A - \zeta I)^{-1}\right\| \leq \frac{\|B\|}{|\mathrm{Im}(\zeta)|} < 1,$$

hvis ζ er valgt, så $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|B\|$. Det antages nu, at ζ er valgt så $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|B\|$, og rækken i udtryk (2.2) er derfor absolut og uniformt konvergent.

Idet $H-\zeta I$ kan udtrykkes som $\left(I+B(A-\zeta I)^{-1}\right)(A-\zeta I)$, gælder der, at

$$\begin{aligned}
(H-\zeta I)&\left((A-\zeta I)^{-1}\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k\right)\\
&=\left(I+B(A-\zeta I)^{-1}\right)(A-\zeta I)(A-\zeta I)^{-1}\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k\\
&=\left(I+B(A-\zeta I)^{-1}\right)\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k\\
&=\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k+\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^{k+1}\\
&=I+\sum_{k\geq 0}(-1)^{k+1}\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^{k+1}+\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^{k+1}\\
&=I+\sum_{k\geq 0}\left((-1)^{k+1}+(-1)^k\right)\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^{k+1}\\
&=I.
\end{aligned}$$

Tilsvarende gælder der, at

$$\begin{aligned}
&\left((A-\zeta I)^{-1}\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k\right)(H-\zeta I)\\
&=(A-\zeta I)^{-1}\sum_{k\geq 0}(-1)^k\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k\left(I+B(A-\zeta I)^{-1}\right)(A-\zeta I)\\
&=(A-\zeta I)^{-1}I(A-\zeta I)\\
&=I,
\end{aligned}$$

og dermed må der gælde, at

$$\begin{aligned}
(H-\zeta I)^{-1}&=\sum_{k\geq 0}(-1)^k(A-\zeta I)^{-1}\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^k\\
&=\sum_{k\geq 0}(A-\zeta I)^{-1}\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^{2k}\\
&\qquad-\sum_{k\geq 0}(A-\zeta I)^{-1}\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right)^{2k}\left(B(A-\zeta I)^{-1}\right).
\end{aligned}\tag{2.3}$$

Det ønskes nu vist, at den første række i (2.3) kun bidrager til diagonalen, mens den anden række ikke bidrager til diagonalen. Det betyder, at det skal vises, at operatoren $B(A-\zeta I)^{-1}$ opløftet i en ulige potens ikke bidrager til diagonalen, mens den opløftet i en lige potens kun bidrager til diagonalen. Det ses, at der gælder, at

$$\begin{aligned} B(A-\zeta I)^{-1} &= \begin{bmatrix} 0 & V_{\mathrm{eff},\perp} \\ V_{\perp,\mathrm{eff}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{\mathrm{eff}} & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & V_{\mathrm{eff},\perp} R \\ V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Opløftes denne i anden potens fås

$$\begin{aligned} (B(A-\zeta I)^{-1})^2 &= \begin{bmatrix} 0 & V_{\mathrm{eff},\perp} R \\ V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & V_{\mathrm{eff},\perp} R \\ V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} V_{\mathrm{eff},\perp} R V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} & 0 \\ 0 & V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} V_{\mathrm{eff},\perp} R \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Således gælder der klart for ethvert heltal $k \geq 0$, at

$$\big(B(A-\zeta I)^{-1}\big)^{2k} = \begin{bmatrix} (V_{\mathrm{eff},\perp} R V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}})^k & 0 \\ 0 & (V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} V_{\mathrm{eff},\perp} R)^k \end{bmatrix}.$$

Når dette udtryk for $\big(B(A-\zeta I)^{-1}\big)^{2k}$ indsættes i den første række i (2.3) fås

$$\begin{aligned} &\sum_{k\geq 0} (A-\zeta I)^{-1} (B(A-\zeta I)^{-1})^{2k} \\ &= \begin{bmatrix} A_{\mathrm{eff}} & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_{k\geq 0} (V_{\mathrm{eff},\perp} R V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}})^k & 0 \\ 0 & \sum_{k\geq 0} (V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} V_{\mathrm{eff},\perp} R)^k \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sum_{k\geq 0} A_{\mathrm{eff}} (V_{\mathrm{eff},\perp} R V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}})^k & 0 \\ 0 & \sum_{k\geq 0} R\, (V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}} V_{\mathrm{eff},\perp} R)^k \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{2.4}$$

I det følgende betragtes de to summer, som indgår i matricen i udtryk (2.4) enkeltvis. Den første række er absolut og uniformt konvergent for de ζ, som opfylder $\|V_{\mathrm{eff},\perp} R V_{\perp,\mathrm{eff}} A_{\mathrm{eff}}\| < 1$, og summen er i dette tilfælde givet ved

$$\begin{aligned}
\sum_{k\geq 0} A_{\text{eff}}\left(V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}}\right)^k &= A_{\text{eff}} \sum_{k\geq 0} \left(V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}}\right)^k \\
&= \left(A_{\text{eff}}^{-1}\right)^{-1} \left(I - V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}}\right)^{-1} \\
&= \left((I - V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}}) A_{\text{eff}}^{-1}\right)^{-1} \\
&= \left(A_{\text{eff}}^{-1} - V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}}\right)^{-1} \\
&= (H_{\text{eff}} - P_{\text{eff}}\zeta I P_{\text{eff}} - P_{\text{eff}} V P_\perp R P_\perp V P_{\text{eff}})^{-1}.
\end{aligned}$$

Det bemærkes, at $R = (P_\perp(H-\zeta I)P_\perp)^{-1}$ er en operator i Hilbertrummet $\mathcal{H}_\perp$, og derfor gælder der, at $P_\perp R P_\perp = R$, og dermed fås, hvis rækken er konvergent, at

$$\begin{aligned}
\sum_{k\geq 0} A_{\text{eff}}(V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}})^k &= (H_{\text{eff}} - P_{\text{eff}}\zeta I P_{\text{eff}} - P_{\text{eff}} V R V P_{\text{eff}})^{-1} \\
&= (H_{\text{eff}} - P_{\text{eff}}\zeta I P_{\text{eff}} + W)^{-1} \\
&= S_W.
\end{aligned}$$

Det ønskes nu vist, at der findes et ζ, for hvilket $\|V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}}\| < 1$, så rækken vil være absolut og uniformt konvergent for dette ζ. Der gælder, at

$$\begin{aligned}
\|V_{\text{eff},\perp} R V_{\perp,\text{eff}} A_{\text{eff}}\| &= \|P_{\text{eff}} V P_\perp R P_\perp V P_{\text{eff}} A_{\text{eff}}\| \\
&\leq \|V\|^2 \|R\| \|A_{\text{eff}}\|,
\end{aligned}$$

hvor der er gjort brug af, at $P_\perp R P_\perp = R$ og $P_{\text{eff}} A_{\text{eff}} = A_{\text{eff}}$, da R er en operator i Hilbertrummet $\mathcal{H}_\perp$, og A_{eff} er en operator i Hilbertrummet $\mathcal{H}_{\text{eff}}$, samt af at $\|P_{\text{eff}}\| = 1$. Nu ønskes $\|R\| = \left\|(P_\perp(H-\zeta I)P_\perp)^{-1}\right\|$ og $\|A_{\text{eff}}\| = \left\|(P_{\text{eff}}(H-\zeta I)P_{\text{eff}})^{-1}\right\|$ bestemt.

Der gælder, at henholdsvis $H_\perp = P_\perp H P_\perp$ og $H_{\text{eff}} = P_{\text{eff}} H P_{\text{eff}}$ er selvadjungerede og kompakte operatorer i Hilbertrummene $\mathcal{H}_\perp$ og $\mathcal{H}_{\text{eff}}$. Således har $H_\perp$ og H_{eff} reelle egenværdier, og der gælder, at $H_\perp - \zeta P_\perp$ og $H_{\text{eff}} - \zeta P_{\text{eff}}$ er invertible operatorer på $\mathcal{H}_\perp$ og $\mathcal{H}_{\text{eff}}$, hvis $|\text{Im}(\zeta)| > 0$. Dermed gælder der i henhold til Sætning 1.10, at

$$\begin{aligned}
\|R\| = \left\|(H_\perp - \zeta P_\perp)^{-1}\right\| &\leq \frac{1}{|\text{Im}(\zeta)|}, \\
\|A_{\text{eff}}\| = \left\|(H_{\text{eff}} - \zeta P_{\text{eff}})^{-1}\right\| &\leq \frac{1}{|\text{Im}(\zeta)|}.
\end{aligned}$$

Dermed haves, at

$$\begin{aligned}\|V_{\mathrm{eff},\perp}RV_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}}\| &\le \|V\|^2\,\|R\|\,\|A_{\mathrm{eff}}\| \\ &\le \|V\|^2\,\frac{1}{|\mathrm{Im}(\zeta)|^2}.\end{aligned}$$

Det betyder, at hvis ζ er valgt så $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|V\|$, er den første række i matricen i udtryk (2.4) absolut og uniformt konvergent.

Nu betragtes den anden række i udtryk (2.4); der gælder at,

$$\begin{aligned}&\sum_{k\ge 0} R(V_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}}V_{\mathrm{eff},\perp}R)^k \\ &= R + \sum_{k\ge 1} R\,\underbrace{(V_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}}V_{\mathrm{eff},\perp}R)(V_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}}V_{\mathrm{eff},\perp}R)\ldots(V_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}}V_{\mathrm{eff},\perp}R)}_{k \text{ faktorer}} \\ &= R + RV_{\perp,\mathrm{eff}}\sum_{k\ge 1} A_{\mathrm{eff}}\,\underbrace{(V_{\mathrm{eff},\perp}RV_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}})\ldots(V_{\mathrm{eff},\perp}RV_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}})}_{k-1 \text{ faktorer}}\,V_{\mathrm{eff},\perp}R \\ &= R + RV_{\perp,\mathrm{eff}}\sum_{k\ge 0} A_{\mathrm{eff}}(V_{\mathrm{eff},\perp}RV_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}})^k V_{\mathrm{eff},\perp}R \\ &= R + RV_{\perp,\mathrm{eff}}S_W V_{\mathrm{eff},\perp}R.\end{aligned}$$

Denne række er således også absolut og uniformt konvergent, hvis $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|V\|$. Det bemærkes, at der gælder, at

$$RV_{\perp,\mathrm{eff}}S_W V_{\mathrm{eff},\perp}R = RP_\perp V P_{\mathrm{eff}} S_W P_{\mathrm{eff}} V P_\perp R.$$

Da $S_W = (P_{\mathrm{eff}}(H-\zeta I+W)P_{\mathrm{eff}})^{-1}$ er en operator i Hilbertrummet $\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}$, gælder der, at $P_{\mathrm{eff}}S_W P_{\mathrm{eff}} = S_W$, og da R er en operator i Hilbertrummet $\mathcal{H}_\perp$, gælder der, at $RP_\perp = P_\perp R = R$, og dermed haves, at

$$RV_{\perp,\mathrm{eff}}S_W V_{\mathrm{eff},\perp}R = RVS_W VR.$$

Således gælder der, at

$$\sum_{k\ge 0} R(V_{\perp,\mathrm{eff}}A_{\mathrm{eff}}V_{\mathrm{eff},\perp}R)^k = R + RVS_W VR.$$

Når $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|V\|$ giver den første række i udtrykket for $(H-\zeta I)^{-1}$, udtryk (2.3), følgende matrix

$$\begin{bmatrix} S_W & 0 \\ 0 & R + RVS_W VR \end{bmatrix}.$$

Det bemærkes nu, at den anden række i udtryk (2.3) opnås ved at gange den første række med $-B(A-\zeta I)^{-1}$ fra højre. Det vil sige, at

$$\begin{aligned}
&-\sum_{k\geq 0}(A-\zeta I)^{-1}(B(A-\zeta I)^{-1})^{2k+1} \\
&\quad = \begin{bmatrix} S_W & 0 \\ 0 & R+RV_{\perp,\text{eff}}S_W V_{\text{eff},\perp}R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -V_{\text{eff},\perp}R \\ -V_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}} & 0 \end{bmatrix} \\
&\quad = \begin{bmatrix} 0 & -S_W V_{\text{eff},\perp}R \\ -RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}} - RV_{\perp,\text{eff}}S_W V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}} & 0 \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

hvor $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|V\|$. Det bemærkes, at der gælder, at

$$-S_W V_{\text{eff},\perp}R = -S_W P_{\text{eff}} V P_\perp R = -S_W V R.$$

Ydermere gælder der, at

$$\begin{aligned}
&-RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}} - RV_{\perp,\text{eff}}S_W V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}} \\
&\quad = -RV_{\perp,\text{eff}}(A_{\text{eff}} + S_W V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}}) \\
&\quad = -RV_{\perp,\text{eff}}\left(A_{\text{eff}} + \sum_{k\geq 0} A_{\text{eff}}(V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}})^k V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}}\right) \\
&\quad = -RV_{\perp,\text{eff}}\left(A_{\text{eff}} + \sum_{k\geq 0} A_{\text{eff}}(V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}})^{k+1}\right) \\
&\quad - RV_{\perp,\text{eff}}\sum_{k\geq 0} A_{\text{eff}}(V_{\text{eff},\perp}RV_{\perp,\text{eff}}A_{\text{eff}})^k \\
&\quad = -RP_\perp V P_{\text{eff}} S_W \\
&\quad = -RVS_W,
\end{aligned}$$

idet der ved det sidste lighedstegn er anvendt, at $RP_\perp = R$ og $P_{\text{eff}}S_W = S_W$. Dermed kan den sidste række i udtryk (2.3) udtrykkes ved matricen

$$\begin{bmatrix} 0 & -S_W V R \\ -RVS_W & 0 \end{bmatrix},$$

når $|\mathrm{Im}(\zeta)| > \|V\|$. Det er således vist, at resolventen $(H-\zeta I)^{-1}$ kan udtrykkes ved

$$(H-\zeta I)^{-1} = \begin{bmatrix} S_W & -S_W V R \\ -RVS_W & R+RVS_W V R \end{bmatrix}, \tag{2.5}$$

når ζ er valgt så $|\mathrm{Im}(\zeta)|$ er så stor, at de rækker, som er blevet betragtet, alle er absolut og uniformt konvergente.

Det vides således, at $(H - \zeta I)^{-1}$ eksisterer og er analytisk for alle ζ i resolventmængden. Samtidig vides det, at når ζ har en imaginærdel, der numerisk er tilpas stor, kan $(H - \zeta I)^{-1}$ udtrykkes som (2.5). Dermed gælder der jf. [Jensen, 2005, Theorem 6.3], at $(H - \zeta I)^{-1}$ kan udtrykkes på denne måde for alle ζ i resolventmængden. $\square$

Feshbachs formel er således blev bevist, og af sætningen fremgår det, at resolventen eksisterer såfremt $S_W(\zeta)$ og $R(\zeta)$ eksisterer. Hvis $R(\zeta)$ er regulær i et område, kan egenværdierne af H kun være de punkter, hvor $S_W(\zeta)$ er singulær. Dermed kan egenværdierne for H findes ved at finde de værdier af ζ, for hvilke $S_W(\zeta)$ er singulær. I det følgende kapitel vises, hvordan egenværdierne af en perturberet operator kan bestemmes, såfremt perturbationen ikke er for stor.

Kapitel 3

Perturberede egenværdier

I det forrige kapitel blev Feshbachs formel for en kompakt og selvadjungeret operator vist. I dette kapitel, som er baseret på [Cornean, 2008] og [Reed og Simon, 1972b, Kapitel XII], ønskes Feshbachs formel anvendt til at finde egenværdierne for en selvadjungeret og kompakt operator. Der tages udgangspunkt i en selvadjungeret operator H_0, hvor egenværdierne og egenvektorerne er kendte. Denne operator perturberes, således at der haves en ny selvadjungeret og kompakt operator H, der kan udtrykkes som

$$H = H_0 + V,$$

hvor V er en selvadjungeret og kompakt operator.

Der gælder, at operatoren H_0 kan skrives som

$$H_0 = \sum_{k=1}^{N} E_k(0)P_k(0),$$

hvor $E_k(0)$ er en reel egenværdi, og $P_k(0)$ er en projektion, hvorom der gælder, at $P_k(0)\mathbf{f} = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_k(0)$, hvor $\boldsymbol{\psi}_k(0)$'erne opfylder

$$\langle \boldsymbol{\psi}_k(0), \boldsymbol{\psi}_j(0)\rangle = \begin{cases} 1 & \text{for } k = j, \\ 0 & \text{for } k \neq j. \end{cases}$$

Vektorerne $\boldsymbol{\psi}_k(0)$ udgør således en ortonormal basis for Hilbertrummet, og samtidig er $\boldsymbol{\psi}_k(0)$ egenvektoren hørende til egenværdien $E_k(0)$. Det vil sige, at der gælder, at

$$H_0\boldsymbol{\psi}_k(0) = E_k(0)\boldsymbol{\psi}_k(0).$$

Rækkefølgen k er ordnet således, at $E_1(0) \geq E_2(0) \geq E_3(0) \geq \ldots$. Det antages nu, at $E_1(0)$ ikke er degenereret; det vil sige, at der gælder, at $E_1(0) > E_2(0)$.

Indføres den ovennævnte perturbation af operatoren, kan den nye operator udtrykkes som

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V,$$

hvor $\lambda \in \mathbb{R}$, og V er en selvadjungeret og kompakt operator. I det følgende afsnit ønskes det vist, at operatoren $H(\lambda)$ har en egenværdi $E_1(\lambda)$ nær egenværdien $E_1(0)$ for operatoren H_0.

3.1 Eksistens af egenværdi $E_1(\lambda)$ nær $E_1(0)$

I dette afsnit ønskes den følgende sætning bevist. Denne sætning udtrykker det væsentlige resultat, at hvis en operator perturberes lidt, vil egenværdien også kun blive perturberet lidt.

Sætning 3.1 *Lad $E_1(0)$ være en ikke-degenereret egenværdi for H_0, så gælder der, at hvis $|\lambda|$ er lille nok, har $H(\lambda)$ præcis en ikke-degenereret egenværdi $E_1(\lambda)$ nær $E_1(0)$ og $E_1(\lambda) \to E_1(0)$, når $\lambda \to 0$.*

For at bevise denne sætning er det nødvendigt først at vise en række andre resultater. Derfor indføres først følgende sætning.

Sætning 3.2 *Lad $J = [a, b]$ være et lukket interval fuldstændig indeholdt i det åbne interval $]E_2(0), E_1(0)[$. Så findes et $\lambda_0 > 0$, så der for alle λ, hvor $|\lambda| < \lambda_0$, gælder, at J er indeholdt i resolventmængden for $H(\lambda)$.*

Bevis:
Idet $I = \sum_{k=1}^{N} P_k(0)$, hvor $N \in \mathbb{N}$ og $N \leq \infty$, gælder der, at

$$H_0 = H_0 I = \sum_{k=1}^{N} H_0 P_k(0) = \sum_{k=1}^{N} E_k(0) P_k(0).$$

Således gælder der, at

$$H_0 - \zeta I = \sum_{k=1}^{N} (E_k(0) - \zeta) P_k(0),$$

og såfremt $\zeta \neq E_k(0)$ for alle k, haves der, at

$$(H_0 - \zeta I)^{-1} = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0),$$

idet det dermed er opfyldt, at

$$\begin{aligned}(H_0-\zeta I)^{-1}(H_0-\zeta I) &= \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{E_j(0)-\zeta}{E_k(0)-\zeta}P_k(0)P_j(0)\\ &= \sum_{k=1}^{N}\frac{E_k(0)-\zeta}{E_k(0)-\zeta}P_k^2(0)\\ &= \sum_{k=1}^{N}P_k(0)\\ &= I.\end{aligned}$$

Det bemærkes, at andet lighedstegn følger af, at $P_k(0)P_j(0)=0$ for $j\neq k$. På tilsvarende vis gælder, at $(H_0-\zeta I)(H_0-\zeta I)^{-1}=I$.

Der gælder for en vilkårlig vektor $\mathbf{f}\in\mathcal{H}$, at

$$(H_0-\zeta I)^{-1}\mathbf{f}=\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{E_k(0)-\zeta}P_k(0)\mathbf{f}=\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{E_k(0)-\zeta}\langle\mathbf{f},\boldsymbol{\psi}_k(0)\rangle\boldsymbol{\psi}_k(0).$$

Idet $\boldsymbol{\psi}_k(0)$'erne udgør en ortonormal basis, gælder der jf. Parsevals ligning, Sætning 1.9, for ζ i resolventmængden, at

$$\begin{aligned}\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\mathbf{f}\right\|^2 &= \sum_{k=1}^{N}\frac{1}{|E_k(0)-\zeta|^2}\,|\langle\mathbf{f},\boldsymbol{\psi}_k(0)\rangle|^2\\ &\leq \left(\sup_{j\geq1}\frac{1}{|E_j(0)-\zeta|^2}\right)\sum_{k=1}^{N}|\langle\mathbf{f},\boldsymbol{\psi}_k(0)\rangle|^2\\ &= \left(\sup_{j\geq1}\frac{1}{|E_j(0)-\zeta|^2}\right)\|\mathbf{f}\|^2.\end{aligned}$$

Dette resultat gælder for et vilkårligt $\mathbf{f}\in\mathcal{H}$, og dermed gælder der, at

$$\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\|\leq\sup_{j\geq1}\frac{1}{|E_j(0)-\zeta|}. \tag{3.1}$$

Der betragtes et vilkårligt $\zeta\in J$. Det ønskes nu vist, at for dette ζ eksisterer $(H(\lambda)-\zeta I)^{-1}$. Der gælder, at

$$H(\lambda)-\zeta I=H_0-\zeta I+\lambda V=\left(I+\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}\right)(H_0-\zeta I).$$

Denne opskrivning er mulig, idet ζ er indeholdt i resolventmængden for H_0, og $(H_0-\zeta I)^{-1}$ derfor eksisterer. Der gælder, at operatoren $H(\lambda)-\zeta I$ er invertibel, hvis de to operatorer $I+\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}$ og $H_0-\zeta I$ begge er det. Den sidste er invertibel for alle $\zeta \in J$, og den første er invertibel, hvis

$$\left\|\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| \leq |\lambda|\,\|V\|\,\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| < 1,$$

og i dette tilfælde gælder der, at

$$\left(I+\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}\right)^{-1} = \sum_{k\geq 0}(-1)^k\lambda^k(V(H_0-\zeta I))^k,$$

idet

$$\begin{aligned}
&\left(I+\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}\right)\sum_{k\geq 0}(-1)^k\lambda^k(V(H_0-\zeta I))^k\\
&=\sum_{k\geq 0}(-1)^k\lambda^k(V(H_0-\zeta I))^k+\sum_{k\geq 0}(-1)^k\lambda^{k+1}(V(H_0-\zeta I))^{k+1}\\
&=I+\sum_{k\geq 0}\left((-1)^{k+1}+(-1)^k\right)\lambda^{k+1}(V(H_0-\zeta I))^{k+1}\\
&=I.
\end{aligned}$$

Tilsvarende gælder, at

$$\sum_{k\geq 0}(-1)^k\lambda^k(V(H_0-\zeta I))^k\left(I+\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}\right)=I.$$

For at $H(\lambda)-\zeta I$ er invertibel, skal der således gælde, at

$$|\lambda| < \frac{1}{\|V\|\,\|(H_0-\zeta I)^{-1}\|}$$

for alle $\zeta \in J$. Derfor defineres størrelsen λ_0 som

$$\lambda_0 = \frac{1}{\|V\|\max_{\zeta\in J}\|(H_0-\zeta I)^{-1}\|}.$$

Fra udtryk (3.1) vides, at

$$\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| \leq \sup_{k\geq 1}\frac{1}{|\zeta - E_k(0)|} \leq \frac{1}{\min\{|a-E_2(0)|\,,|b-E_1(0)|\}}.$$

Dermed kan λ_0 udtrykkes som

$$\lambda_0 = \frac{\min\{|a - E_2(0)|\,, |b - E_1(0)|\}}{\|V\|}.$$

Dermed gælder der for alle λ, hvor $|\lambda| < \lambda_0$, at $(H(\lambda) - \zeta I)^{-1}$ eksisterer for alle $\zeta \in J$ og er givet ved

$$(H(\lambda) - \zeta I)^{-1} = (H_0 - \zeta I)^{-1} \sum_{k \geq 0} (-1)^k \lambda^k (V(H_0 - \zeta I)^{-1})^k. \tag{3.2}$$

□

Det bemærkes, at jo tættere intervallet er på egenværdierne, jo mindre er λ_0.

Et tilsvarende resultat gælder naturligvis for intervaller mellem de øvrige egenværdier for H_0, og beviset tilsvarer det ovenstående bevis.

Det bemærkes det, at der gælder, at

$$P_1(0) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma (H_0 - \zeta I)^{-1} \mathrm{d}\zeta, \tag{3.3}$$

hvor Γ er en positivt orienteret cirkel, som omkranser egenværdien $E_1(0)$. Cirklen er så lille, at ingen af de øvrige egenværdier for H_0 er omkranset cirklen. At ovenstående udtryk gælder, ses ved at indsætte udtrykket for $(H_0 - \zeta I)^{-1}$ i integralet, dermed fås

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma (H_0 - \zeta I)^{-1} \mathrm{d}\zeta &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0) \mathrm{d}\zeta \\
&= \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma \frac{1}{E_k(0) - \zeta} \mathrm{d}\zeta \right) P_k(0) \\
&= P_1(0),
\end{aligned}$$

idet integralet jf. Cauchys integralsætning og Cauchys integralformel, [Jensen, 2005, Theorem 4.3 og Theorem 4.7], giver nul for alle egenværdier forskellige fra $E_1(0)$ og $-2\pi\mathrm{i}$ for egenværdien $E_1(0)$. Ved andet lighedstegn er der byttet rundt på summations- og integrationsrækkefølgen. Hvis $N < \infty$ er dette uproblematisk, men hvis $N = \infty$ kræves yderligere argumentation. I det følgende antages derfor, at $N = \infty$. Nu defineres vektoren $\mathbf{\Phi}_n$, hvor $n < \infty$, for et vilkårligt $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$ ved

$$\mathbf{\Phi}_n = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0)\mathbf{f}.$$

Så gælder der, at

$$\mathbf{\Phi}_{n+p} - \mathbf{\Phi}_n = \sum_{k=n+1}^{n+p} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0)\mathbf{f},$$

og dermed haves, at

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{\Phi}_{n+p} - \mathbf{\Phi}_n\|^2 &= \left\| \sum_{k=n+1}^{n+p} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0)\mathbf{f} \right\|^2 \\
&= \left\langle \sum_{k=n+1}^{n+p} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0)\mathbf{f}, \sum_{j=n+1}^{n+p} \frac{1}{E_j(0) - \zeta} P_j(0)\mathbf{f} \right\rangle \\
&= \sum_{k=n+1}^{n+p} \frac{1}{|E_k(0) - \zeta|^2} \|P_k(0)\mathbf{f}\|^2 \\
&\leq c \sum_{k=n+1}^{n+p} \|P_k(0)\mathbf{f}\|^2 \\
&\leq c \sum_{k \geq n+1} \|P_k(0)\mathbf{f}\|^2,
\end{aligned}$$

hvor c er en konstant. Det bemærkes, at $P_k(0)\mathbf{f} = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k(0) \rangle \boldsymbol{\psi}_k(0)$, og dermed haves

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|P_k(0)\mathbf{f}\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k(0) \rangle|^2 \|\boldsymbol{\psi}_k(0)\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k(0) \rangle|^2 = \|\mathbf{f}\|^2.$$

Dermed gælder der, hvis n er tilstrækkelig stor, at $\sum_{k \geq n+1} \|P_k(0)\mathbf{f}\|^2 < \frac{\varepsilon}{c}$, og dermed haves, at

$$\|\mathbf{\Phi}_{n+p} - \mathbf{\Phi}_n\|^2 < \varepsilon.$$

Således er følgen $\{\mathbf{\Phi}_n\}$ en Cauchyfølge, og idet $\mathcal{H}$ er et fuldstændigt metrisk rum, har $\{\mathbf{\Phi}_n\}$ en grænse i $\mathcal{H}$. Denne grænse er givet ved $\mathbf{\Phi}_\infty = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0)\mathbf{f}$. Der gælder, at cirklen Γ omkranser egenværdien

$E_1(0)$, men ingen af de øvrige egenværdier for operatoren H_0. Derfor gælder der, at

$$\begin{aligned} P_1(0)\mathbf{f} &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{E_k(0)-\zeta} P_k(0)\mathbf{f}\mathrm{d}\zeta \\ &= \sum_{k=1}^{n} \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \frac{1}{E_k(0)-\zeta}\mathrm{d}\zeta P_k(0)\mathbf{f}. \end{aligned}$$

Det sidste lighedstegn følger af, at $n < \infty$. Så gælder der, at

$$\begin{aligned} &\left\| P_1(0)\mathbf{f} - \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{E_k(0)-\zeta} P_k(0)\mathbf{f}\mathrm{d}\zeta \right\| \\ &= \left\| \sum_{k=1}^{n} \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \frac{1}{E_k(0)-\zeta}\mathrm{d}\zeta P_k(0)\mathbf{f} - \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{E_k(0)-\zeta} P_k(0)\mathbf{f}\mathrm{d}\zeta \right\| \\ &= \left\| \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \left(\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{E_k(0)-\zeta} P_k(0)\mathbf{f} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{E_k(0)-\zeta} P_k(0)\mathbf{f} \right) \mathrm{d}\zeta \right\| \\ &= \left\| \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma (\mathbf{\Phi}_n - \mathbf{\Phi}_\infty)\mathrm{d}\zeta \right\| \\ &\le \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma |\mathrm{d}\zeta| \, \|\mathbf{\Phi}_n - \mathbf{\Phi}_\infty\| \\ &< \varepsilon, \end{aligned}$$

hvis n er tilstrækkelig stor. Dermed gælder der, at udtrykket går mod 0 for n gående mod uendelig. Det betyder, at

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \frac{1}{E_k(0)-\zeta}\mathrm{d}\zeta P_k(0)\mathbf{f} = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{E_k(0)-\zeta} P_k(0)\mathbf{f}\mathrm{d}\zeta,$$

og ombytning af summations- og integrationsrækkefølgen er således mulig for $N \le \infty$.

En projektion hørende til operatoren $H(\lambda)$, som tilsvarer udtryk (3.3), kan defineres ved

$$P_1(\lambda) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma (H(\lambda)-\zeta I)^{-1}\mathrm{d}\zeta, \tag{3.4}$$

hvor den positivt orienterede cirkel Γ skærer de tidligere omtalte intervaller på begge sider af egenværdien $E_1(0)$ for H_0, således at $(H(\lambda)-\zeta I)^{-1}$

eksisterer for alle $\zeta \in \Gamma$. Dimensionen af denne projektion afhænger af hvor mange egenværdier for $H(\lambda)$, der er omkranset af cirklen Γ; hvis ingen egenværdier er omkranset, er dimensionen af $P_1(\lambda)$ nul, og hvis en ikke-degenereret egenværdi er omkranset, er dimensionen en, hvis to ikke-degenererede egenværdier eller en egenværdi med degenerationsgrad to er omkranset, er dimensionen to og så fremdeles. For projektionerne $P_1(0)$ og $P_1(\lambda)$ gælder følgende sætning.

Sætning 3.3 *For $P_1(0)$ og $P_1(\lambda)$ defineret som i udtrykkene* (3.3) *og* (3.4)*, gælder der, at*

$$\lim_{\lambda \to 0} \|P_1(\lambda) - P_1(0)\| = 0.$$

Bevis:
I henhold til udtryk (3.3) og udtryk (3.4) gælder der, at

$$P_1(\lambda) - P_1(0) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma \left((H(\lambda) - \zeta I)^{-1} - (H_0 - \zeta I)^{-1} \right) \mathrm{d}\zeta.$$

Det bemærkes, at

$$\lambda V = H(\lambda) - \zeta I - (H_0 - \zeta I).$$

Ganges dette udtryk med $(H_0 - \zeta I)^{-1}$ fra venstre og $(H(\lambda) - \zeta I)^{-1}$ fra højre, fås

$$\lambda (H_0 - \zeta I)^{-1} V (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} = (H_0 - \zeta I)^{-1} - (H(\lambda) - \zeta I)^{-1}.$$

Indsættes dette ovenfor, fås

$$P_1(\lambda) - P_1(0) = \frac{-\lambda \mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma (H_0 - \zeta I)^{-1} V (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \mathrm{d}\zeta.$$

Dermed gælder der jf. Sætning 1.8, at

$$\begin{aligned}
\|P_1(\lambda) - P_1(0)\| &= \left\| \frac{-\lambda \mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma (H_0 - \zeta I)^{-1} V (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \mathrm{d}\zeta \right\| \\
&\leq \frac{1}{2\pi} |\lambda| \int_\Gamma \left\| (H_0 - \zeta I)^{-1} V (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \right\| |\mathrm{d}\zeta| \\
&\leq \frac{1}{2\pi} |\lambda| \int_\Gamma \left\| (H_0 - \zeta I)^{-1} \right\| \|V\| \left\| (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \right\| |\mathrm{d}\zeta| \\
&\leq \frac{1}{2\pi} |\lambda| \, k 2\pi r \\
&= |\lambda| \, kr,
\end{aligned}$$

hvor r er radius af cirklen Γ, k er en konstant, og det tredje ulighedstegn følger af, at alle de indgående operatorer er begrænsede. Operatoren $(H_0 - \zeta I)^{-1}$ er i henhold til udtryk (3.1) begrænset ved

$$\left\|(H_0 - \zeta I)^{-1}\right\| \leq \sup_{k \geq 1} \frac{1}{|E_k(0) - \zeta|}$$

for alle $\zeta \in \Gamma$. Cirklen Γ er konstrueret således, at der for alle $\zeta \in \Gamma$ gælder, at $|E_1(0) - \zeta| < |E_k(0) - \zeta|$ for $k \neq 1$, og dermed gælder, at

$$\left\|(H_0 - \zeta I)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{|E_1(0) - \zeta|}.$$

På tilsvarende vis gælder der, at $(H(\lambda) - \zeta I)^{-1}$ er begrænset. Dermed gælder, at $\|P_1(\lambda) - P_1(0)\| \to 0$ for $\lambda \to 0$. $\square$
Det bemærkes, at der eksisterer et λ' så $\|P_1(\lambda) - P_1(0)\| < 1$ for $|\lambda| < \lambda'$.

Den følgende sætning udtrykker, at $P_1(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$.

Sætning 3.4 *Der gælder, at operatoren $P_1(\lambda)$ kan udtrykkes som*

$$P_1(\lambda) = \sum_{k \geq 0} \lambda^k \Pi_k,$$

hvor Π_k er en begrænset operator for alle λ, hvor $|\lambda| < \lambda_0$.

Bevis:
I henhold til udtryk (3.2) gælder der for $\|\lambda\| < \lambda_0$, at

$$\begin{aligned}(H(\lambda) - \zeta I)^{-1} &= (H_0 - \zeta I)^{-1} \left(I + \lambda V (H_0 - \zeta I)^{-1}\right)^{-1} \\ &= (H_0 - \zeta I)^{-1} \sum_{k \geq 0} (-1)^k \lambda^k \left(V(H_0 - \zeta I)^{-1}\right)^k.\end{aligned}$$

Indsættes dette i (3.4) fås

$$\begin{aligned}P_1(\lambda) &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \,\mathrm{d}\zeta \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma \sum_{k \geq 0} (-1)^k \lambda^k (H_0 - \zeta I)^{-1} \left(V(H_0 - \zeta I)^{-1}\right)^k \mathrm{d}\zeta \\ &= \sum_{k \geq 0} \lambda^k \frac{\mathrm{i}(-1)^k}{2\pi} \int_\Gamma (H_0 - \zeta I)^{-1} \left(V(H_0 - \zeta I)^{-1}\right)^k \mathrm{d}\zeta \\ &= \sum_{k \geq 0} \lambda^k \Pi_k,\end{aligned}$$

hvor Π_k er givet ved $\Pi_k = \frac{\mathrm{i}(-1)^k}{2\pi}\int_\Gamma (H_0 - \zeta I)^{-1}\left(V(H_0-\zeta I)^{-1}\right)^k \mathrm{d}\zeta$. Ved tredje lighedstegn er der byttet rundt på integrations- og summationsrækkefølgen. Dette er jf. Fubinis sætning, [Berg og Madsen, 2001, Sætning 6.12], muligt, hvis der gælder, at

$$\sum_{k\geq 0}\left\|\lambda^k \Pi_k\right\| = \sum_{k\geq 0}|\lambda|^k\|\Pi_k\| < \infty.$$

Det antages, at Γ har centrum i $E_1(0)$, og radius r, så gælder der jf. Sætning 1.8 og Sætning 1.4, at

$$\begin{aligned}
\|\Pi_k\| &\leq \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma \left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\|\left(\|V\|\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\|\right)^k |\mathrm{d}\zeta| \\
&\leq \frac{1}{2\pi}2\pi r \max_{\zeta\in\Gamma}\left(\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\|\left(\|V\|\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\|\right)^k\right) \\
&\leq r\frac{1}{r}\frac{1}{\lambda_0^k} \\
&= \frac{1}{\lambda_0^k},
\end{aligned}$$

idet der gælder, at $\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{r}$, og

$$\left\|\lambda V(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| \leq \lambda_0\|V\|\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| < 1,$$

hvilket er ensbetydende med, at

$$\|V\|\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\| < \frac{1}{\lambda_0} \Leftrightarrow \left(\|V\|\left\|(H_0-\zeta I)^{-1}\right\|\right)^k < \frac{1}{\lambda_0^k}.$$

Således gælder altså, at

$$|\lambda|^k\|\Pi_k\| < \frac{|\lambda|^k}{\lambda_0^k} < \frac{\lambda_0^k}{\lambda_0^k} = 1.$$

Dermed gælder der, at

$$\sum_{k\geq 0}|\lambda|^k\|\Pi_k\| < \sum_{k\geq 0}\left(\frac{|\lambda|}{\lambda_0}\right)^k < \infty,$$

idet den geometriske række, $\sum_{k\geq 0} z^k$, er absolut og uniformt konvergent for $|z| < 1$. Således er det vist, at der i ovenstående tilfælde kan byttes rundt på integrations- og summationsrækkefølgen, og sætningen er således vist. $\square$

De følgende sætninger angiver, at $P_1(\lambda)$ er en ortogonalprojektion, og at den kommuterer med $H(\lambda)$.

Sætning 3.5 *Projektionen $P_1(\lambda)$ kommuterer med den selvadjungerede operator $H(\lambda)$; det vil sige, at*

$$H(\lambda)P_1(\lambda) = P_1(\lambda)H(\lambda).$$

Bevis:
Operatoren $P_1(\lambda)$ kan udtrykkes med (3.4), hvormed der gælder, at

$$\begin{aligned} H(\lambda)P_1(\lambda) &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma H(\lambda)(H(\lambda)-\zeta I)^{-1}\mathrm{d}\zeta, \\ P_1(\lambda)H(\lambda) &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma (H(\lambda)-\zeta I)^{-1}H(\lambda)\mathrm{d}\zeta. \end{aligned}$$

Der haves, at

$$\begin{aligned} H(\lambda)(H(\lambda)-\zeta I)^{-1} &= (H(\lambda)-\zeta I+\zeta I)(H(\lambda)-\zeta I)^{-1} \\ &= I + \zeta(H(\lambda)-\zeta I)^{-1} \\ &= I + (H(\lambda)-\zeta I)^{-1}\zeta \\ &= (H(\lambda)-\zeta I)^{-1}(H(\lambda)-\zeta I+\zeta I) \\ &= (H(\lambda)-\zeta I)^{-1}H(\lambda). \end{aligned}$$

Dermed gælder der, at

$$\begin{aligned} H(\lambda)P_1(\lambda) &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma H(\lambda)(H(\lambda)-\zeta I)^{-1}\mathrm{d}\zeta \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_\Gamma (H(\lambda)-\zeta I)^{-1}H(\lambda)\mathrm{d}\zeta \\ &= P_1(\lambda)H(\lambda), \end{aligned}$$

og sætningen er således vist. $\square$

Sætning 3.6 *Operatoren $P_1(\lambda)$ er en ortogonalprojektion, hvilket betyder, at følgende krav er opfyldt*

$$P_1^2(\lambda) = P_1(\lambda),$$
$$P_1^*(\lambda) = P_1(\lambda).$$

Bevis:
Det ønskes først vist, at $P_1^2(\lambda) = P_1(\lambda)$. Der gælder, at

$$P_1^2(\lambda) = \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\right)^2 \left(\int_\Gamma (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \mathrm{d}\zeta\right) \left(\int_{\Gamma'} (H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \mathrm{d}\zeta'\right),$$

hvor Γ' er en positivt orienteret cirkel, som omkranser den positivt orienterede cirkel Γ. Produktet af de to integraler kan opskrives som et dobbeltintegrale, hvor det er ligegyldigt hvilken cirkel, der integreres over først. Det vil sige, at

$$P_1^2(\lambda) = \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\right)^2 \int_\Gamma \int_{\Gamma'} (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} (H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \mathrm{d}\zeta' \mathrm{d}\zeta.$$

Der gælder, at

$$\begin{aligned}
&(H(\lambda) - \zeta I)^{-1} - (H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \\
&\quad = (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} I - I (H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \\
&\quad = (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} (H(\lambda) - \zeta' I)(H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \\
&\qquad - (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} (H(\lambda) - \zeta I)(H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \\
&\quad = (\zeta - \zeta')(H(\lambda) - \zeta I)^{-1} (H(\lambda) - \zeta' I)^{-1}.
\end{aligned}$$

Indsættes dette ovenfor, fås

$$\begin{aligned}
P_1^2(\lambda) &= \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\right)^2 \int_\Gamma (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \int_{\Gamma'} (\zeta - \zeta')^{-1} \mathrm{d}\zeta' \mathrm{d}\zeta \\
&\quad - \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\right)^2 \int_{\Gamma'} (H(\lambda) - \zeta' I)^{-1} \int_\Gamma (\zeta - \zeta')^{-1} \mathrm{d}\zeta \mathrm{d}\zeta' \\
&= \left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\right)^2 \int_\Gamma (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \frac{2\pi}{\mathrm{i}} \mathrm{d}\zeta - 0 \\
&= P_1(\lambda).
\end{aligned}$$

Det bemærkes, at andet led jf. Cauchys integralsætning, [Jensen, 2005, Theorem 4.3], giver nul, da $(\zeta - \zeta')^{-1}$ ingen singularitet har indenfor cirklen Γ.

Det ønskes nu vist, at $P_1^*(\lambda) = P_1(\lambda)$. Projektionen $P_1(\lambda)$ kan i henhold til [Jensen, 2005, Definition 3.9] udtrykkes som

$$\begin{aligned} P_1(\lambda) &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_\Gamma (H(\lambda) - \zeta I)^{-1} \mathrm{d}\zeta \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_0^{2\pi} (H(\lambda) - \gamma(t) I)^{-1} \gamma'(t) \mathrm{d}t, \end{aligned}$$

hvor $\gamma(t) = E_1(0) + re^{\mathrm{i}t}$ og $\gamma'(t) = \mathrm{i}re^{\mathrm{i}t}$. Det betyder, at

$$\begin{aligned} P_1^*(\lambda) &= \frac{-\mathrm{i}}{2\pi} \int_0^{2\pi} (H(\lambda) - \overline{\gamma}(t) I)^{-1} \left(-\mathrm{i}re^{-\mathrm{i}t}\right) \mathrm{d}t \\ &= \frac{-\mathrm{i}}{2\pi} \int_0^{-2\pi} \left(H(\lambda) - E_1(0) - re^{\mathrm{i}t}\right)^{-1} \left(\mathrm{i}re^{\mathrm{i}t}\right) \mathrm{d}t \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_{-2\pi}^0 \left(H(\lambda) - E_1(0) - re^{\mathrm{i}t}\right)^{-1} \left(\mathrm{i}re^{\mathrm{i}t}\right) \mathrm{d}t \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(H(\lambda) - E_1(0) - re^{\mathrm{i}t}\right)^{-1} \left(\mathrm{i}re^{\mathrm{i}t}\right) \mathrm{d}t \\ &= P_1(\lambda). \end{aligned}$$

Andet lighedstegn følger af at substituere t med $-t$, tredje lighedstegn følger af at ombytte integrationsgrænserne, og fjerde lighedstegn følger af at substituere t med $t + 2\pi$. Dermed er det vist, at $P_1(\lambda)$ er en ortogonalprojektion. □

Nu indføres en sætning, som skal anvendes efterfølgende.

Sætning 3.7 *Hvis en funktion er holomorf på en åben mængde, gælder der, at funktionen også er analytisk på den åbne mængde.*

Bevis:
Lad en funktion $f(\zeta)$ være holomorf på en åben mængde G, og lad $\zeta \in B_r(z_0)$, hvor $\overline{B}_r(z_0) \subset G$, så gælder der i henhold til Cauchys integralformel, [Jensen, 2005, Theorem 4.7], at $f(\zeta)$ kan udtrykkes som

$$f(\zeta) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_\Gamma \frac{f(z)}{z - \zeta} \mathrm{d}z,$$

hvor $\Gamma = \partial B_r(z_0)$. Dette udtryk kan omskrives til

$$\begin{aligned} f(\zeta) &= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_\Gamma \frac{f(z)}{z - z_0 - (\zeta - z_0)} \mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_\Gamma \frac{f(z)}{z - z_0} \frac{1}{1 - \frac{\zeta - z_0}{z - z_0}} \mathrm{d}z. \end{aligned}$$

Det bemærkes, at $\left|\frac{\zeta - z_0}{z - z_0}\right| < 1$, idet $|\zeta - z_0| < |z - z_0|$, og dermed gælder, at

$$\begin{aligned} f(\zeta) &= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_\Gamma \frac{f(z)}{z - z_0} \sum_{k\geq 0} \left(\frac{\zeta - z_0}{z - z_0}\right)^k \mathrm{d}z \qquad (3.5) \\ &= \sum_{k\geq 0} \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_\Gamma \frac{f(z)}{(z - z_0)^{k+1}} \mathrm{d}z (\zeta - z_0)^k \\ &= \sum_{k\geq 0} a_k (\zeta - z_0)^k. \end{aligned}$$

Det sidste lighedstegn følger af [Jensen, 2005, Theorem 5.4]. Ved andet lighedstegn er integrations- og summationsrækkefølgen ændret. Dette er muligt, idet rækken i udtryk (3.5) er absolut og uniformt konvergent, når $\zeta \in \Gamma$, og sætningen er dermed bevist. □

I beviset for den følgende sætning anvendes en operator på formen $(I - (P_1 - P_2)^2)^{-\frac{1}{2}}$. Derfor vil det nu blive indført, hvad der menes med denne notation. Lad $\zeta \in \mathbb{C}$ opfylde, at $|\zeta| < 1$, så gælder der, at

$$(1 - \zeta)^\alpha = e^{\alpha \mathrm{Ln}(1-\zeta)},$$

hvor $\mathrm{Ln}(z)$ er den komplekse logaritmefunktion defineret ved

$$\mathrm{Ln}(z) = \ln(|z|) + \mathrm{i}\mathrm{Arg}(z),$$

for $z \in \mathbb{C}\backslash(-\infty, 0]$. Det bemærkes, at hvis $|\zeta| < 1$, er $1 - \zeta \in \mathbb{C}\backslash(-\infty, 0]$. Nu defineres funktionen

$$F(\zeta) = e^{\alpha \mathrm{Ln}(1-\zeta)},$$

for $|\zeta| < 1$, og det ønskes nu vist, at denne funktion er holomorf på hele definitionsmængden. For at vise dette, er det tilstrækkeligt at vise, at funktionen $\mathrm{Ln}(\zeta)$ er holomorf. Dette er tilstrækkeligt, idet det vides, at sammensætningen af to holomorfe funktioner er holomorf, og det vides, at $e^{\alpha\zeta}$ er holomorf for alle $\zeta \in \mathbb{C}$. Dermed ønskes det i henhold til [Jensen, 2005, Theorem 2.4] vist, at Cauchy-Riemann-ligningerne er opfyldte for $\mathrm{Ln}(1-\zeta)$, når $|\zeta| < 1$. Det komplekse tal ζ kan ved hjælp af reelle tal x og y udtrykkes som $\zeta = x + \mathrm{i}y$, og dermed kan $\mathrm{Ln}(1-\zeta)$ ved hjælp af x og y udtrykkes som

$$\begin{aligned}\mathrm{Ln}(1-\zeta) &= \ln\left(\sqrt{(1-x)^2+y^2}\right) - \mathrm{i}\arctan\left(\frac{y}{1-x}\right) \\ &= u(x,y) + iv(x,y).\end{aligned}$$

Dermed er de partielle afledede af $u(x,y)$ givet ved

$$\begin{aligned}\frac{\partial u(x,y)}{\partial x} &= \frac{1}{\sqrt{(1-x)^2+y^2}}\frac{1}{2\sqrt{(1-x)^2+y^2}}2(1-x)(-1) \\ &= \left((1-x)^2+y^2\right)^{-1}(x-1), \\ \frac{\partial u(x,y)}{\partial y} &= \frac{1}{\sqrt{(1-x)^2+y^2}}\frac{1}{2\sqrt{(1-x)^2+y^2}}2y \\ &= \left((1-x)^2+y^2\right)^{-1}y,\end{aligned}$$

og de partielle afledede af $v(x,y)$ er givet ved

$$\begin{aligned}\frac{\partial v(x,y)}{\partial x} &= -\frac{1}{1+\frac{y^2}{(1-x)^2}}\frac{-y}{(1-x)^2}(-1) \\ &= -\left((1-x)^2+y^2\right)^{-1}y, \\ \frac{\partial v(x,y)}{\partial y} &= -\frac{1}{1+\frac{y^2}{(1-x)^2}}\frac{1}{1-x} = -\frac{1-x}{(1-x)^2+y^2} \\ &= \left((1-x)^2+y^2\right)^{-1}(x-1).\end{aligned}$$

Dermed ses, at der gælder, at $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}$ og $\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}$, og Cauchy-Riemann-ligningerne er således opfyldt, og $F(\zeta)$ er holomorf. Idet $F(\zeta)$ er holomorf for $|\zeta| < 1$, er $F(\zeta)$ i henhold til Sætning 3.7 også analytisk for $|\zeta| < 1$. Dermed kan $F(\zeta)$ for tilstrækkeligt små $|\zeta|$ udtrykkes som en potensrække om $\zeta = 0$,

$$F(\zeta) = \sum_{k\geq 0}\gamma_k\zeta^k, \tag{3.6}$$

hvor $\gamma_k = \frac{F^{(k)}(0)}{k!}$. I henhold til udtryk (3.5) kan $F(\zeta)$ også udtrykkes som

$$F(\zeta) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} \frac{F(z)}{z} \sum_{k\geq 0} \left(\frac{\zeta}{z}\right)^k \mathrm{d}z,$$

hvor $\Gamma_\rho = \partial B_\rho(0)$. Ovenstående gælder på en åben mængde, hvor $F(\zeta)$ er holomorf. Idet $F(\zeta)$ er holomorf for $|\zeta| < 1$, må der gælde, at $\rho < 1$. Da $|z| = \rho$ gælder dermed også, at $|\zeta| < \rho$, og konvergensradius for rækken i det ovenstående udtryk er således 1, idet $|\zeta| < 1$. Da dette udtryk kan omskrives til udtryk (3.6), må potensrækken i udtryk (3.6) derfor også have konvergensradius 1.

Lades $\alpha = -\frac{1}{2}$ gælder der, at $F(\zeta)$ er kvadratroden af $(1-\zeta)^{-1}$, og idet $(1-\zeta)^{-1}$ kan udtrykkes ved potensrækken $\sum_{k\geq 0} \zeta^k$ for $|\zeta| < 1$, er rækken i udtryk (3.6) kvadratroden af denne række, når $|\zeta| < 1$.

Dette resultat ønskes generaliseret til operatorer. Derfor defineres operatorfunktionen

$$F(T) = \sum_{k\geq 0} \gamma_k T^k,$$

hvor $\|T\| < 1$, og γ_k er givet som ovenfor. Det ønskes vist, at denne række er konvergent. Afsnitsfølgen S_N defineres ved $S_N = \sum_{k=0}^{N} \gamma_k T^k$. Operatorerne S_N er lineære begrænsede operatorer på Hilbertrummet $\mathcal{H}$, og da de lineære begrænsede operatorer på et Hilbertrum jf. Sætning 1.11 udgør et fuldstændig metrisk rum, er det nok at vise, at følgen $\{S_N\}$ er en Cauchyfølge. Det bemærkes, at $|\gamma_k| \leq 1$, og idet $\|T\| < 1$, gælder der i henhold til Sætning 1.7, at

$$\begin{aligned}
\|S_{N+P} - S_N\| = \left\| \sum_{k=N+1}^{N+P} \gamma_k T^k \right\| &\leq \sum_{k=N+1}^{N+P} |\gamma_k| \, \|T\|^k \\
&\leq \sum_{k\geq N+1} |\gamma_k| \, \|T\|^k \leq \sum_{k\geq N+1} \|T\|^k < \varepsilon,
\end{aligned}$$

hvis N er stor nok. Dermed er følgen en Cauchyfølge, og rækken konvergerer derfor absolut. På grund af konstruktionen af $F(T)$, gælder der, at

$$F(T)F(T) = (I-T)^{-1} = \sum_{k\geq 0} T^k,$$

og dermed er $F(T) = (I - T)^{-\frac{1}{2}}$. Dette resultat anvendes i beviset for Sætning 3.8, som følger.

Sætning 3.8 *Lad Π_1 og Π_2 være to ortogonalprojektioner, som opfylder, at $\|\Pi_1 - \Pi_2\| < 1$. Så findes en unitær operator U, så $\Pi_1 U = U\Pi_2$.*

Det bemærkes, at en unitær operator er en operator, som opfylder $U^*U = UU^* = I$, og der gælder således, at operatoren er normbevarende. Det vil sige, at

$$\|U\mathbf{f}\|^2 = \langle U\mathbf{f}, U\mathbf{f}\rangle = \langle \mathbf{f}, U^*U\mathbf{f}\rangle = \langle \mathbf{f}, \mathbf{f}\rangle = \|\mathbf{f}\|^2$$

Bevis:
Lad Π_1 og Π_2 være to ortogonalprojektioner, som opfylder $\|\Pi_1 - \Pi_2\| < 1$, og definer $Q_1 = I - \Pi_1$ og $Q_2 = I - \Pi_2$. Det bemærkes, at også Q_1 og Q_2 er ortogonalprojektioner, idet de ses at opfylde kravene

$$\begin{aligned} Q_1^2 &= Q_1, \qquad & Q_1^* &= Q_1, \\ Q_2^2 &= Q_2, \qquad & Q_2^* &= Q_2, \end{aligned}$$

når Π_1 og Π_2 opfylder de samme krav. Det bemærkes yderligere, at der gælder, at $\Pi_1 Q_1 = \Pi_2 Q_2 = 0$. Operatoren A defineres ved

$$A = \Pi_1\Pi_2 + Q_1Q_2 = \Pi_1\Pi_2 + (I - \Pi_1)(I - \Pi_2).$$

Så gælder der, at

$$\Pi_1 A = \Pi_1^2\Pi_2 + \Pi_1 Q_1 Q_2 = \Pi_1\Pi_2 = \Pi_1\Pi_2^2 + Q_1Q_2\Pi_2 = A\Pi_2.$$

Det ønskes vist, at operatoren A kommuterer med operatoren $(\Pi_1 - \Pi_2)^2$. Der haves

$$\begin{aligned} A(\Pi_1 - \Pi_2)^2 &= (2\Pi_1\Pi_2 + I - \Pi_1 - \Pi_2)(\Pi_1 - \Pi_1\Pi_2 - \Pi_2\Pi_1 + \Pi_2) \\ &= 2\Pi_1\Pi_2\Pi_1 + \Pi_1 - \Pi_1 - \Pi_2\Pi_1 - 2\Pi_1\Pi_2\Pi_1\Pi_2 - \Pi_1\Pi_2 \\ &\quad + \Pi_1\Pi_2 + \Pi_2\Pi_1\Pi_2 - 2\Pi_1\Pi_2\Pi_1 - \Pi_2\Pi_1 + \Pi_1\Pi_2\Pi_1 \\ &\quad + \Pi_2\Pi_1 + 2\Pi_1\Pi_2 + \Pi_2 - \Pi_1\Pi_2 - \Pi_2 \\ &= \Pi_1\Pi_2 - \Pi_2\Pi_1 + \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + \Pi_2\Pi_1\Pi_2 - 2\Pi_1\Pi_2\Pi_1\Pi_2. \end{aligned}$$

På tilsvarende måde kan det vises, at

$$(\Pi_1 - \Pi_2)^2 A = \Pi_1\Pi_2 - \Pi_2\Pi_1 + \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + \Pi_2\Pi_1\Pi_2 - 2\Pi_1\Pi_2\Pi_1\Pi_2,$$

og dermed kommuterer A og $(\Pi_1 - \Pi_2)^2$. Nu defineres operatoren U som

$$U = B^{-\frac{1}{2}} A,$$

hvor B er givet ved

$$B = I - (\Pi_1 - \Pi_2)^2.$$

Da $\|\Pi_1 - \Pi_2\| < 1$, gælder der, at $B^{-\frac{1}{2}}$ også kan udtrykkes som

$$B^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k \geq 0} \gamma_k \left((\Pi_1 - \Pi_2)^2\right)^k,$$

hvor γ_k er som tidligere beskrevet. Idet A kommuterer med $(\Pi_1 - \Pi_2)^2$, kommuterer A også med $\left((\Pi_1 - \Pi_2)^2\right)^k$ og dermed med $B^{-\frac{1}{2}}$. Det betyder, at

$$U = B^{-\frac{1}{2}} A = A B^{-\frac{1}{2}}.$$

Det ønskes vist, at U er en unitær operator. Den adjungerede af U er givet ved

$$U^* = A^* \left(\sum_{k \geq 0} \gamma_k \left((\Pi_1 - \Pi_2)^2\right)^k \right)^* = A^* \sum_{k \geq 0} \gamma_k \left((\Pi_1 - \Pi_2)^2\right)^k,$$

idet γ_k er reelle tal, og Π_1 og Π_2 er ortogonalprojektioner. Det kan på tilsvarende måde som ovenfor vises, at A^* kommuterer med $(\Pi_1 - \Pi_2)^2$ og dermed også med $B^{-\frac{1}{2}}$, og dermed gælder der, at

$$UU^* = B^{-\frac{1}{2}} A A^* B^{-\frac{1}{2}} = A A^* B^{-1}.$$

Det ønskes således vist, at $AA^* = B$. Der gælder, at

$$\begin{aligned}
AA^* &= (\Pi_1\Pi_2 + Q_1Q_2)(\Pi_2\Pi_1 + Q_2Q_1) \\
&= \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + Q_1Q_2Q_1 \\
&= \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + (I - \Pi_1)(I - \Pi_2)(I - \Pi_1) \\
&= \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + (I - \Pi_1 - \Pi_2 + \Pi_1\Pi_2)(I - \Pi_1) \\
&= \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + I - \Pi_1 - \Pi_1 + \Pi_1 - \Pi_2 + \Pi_2\Pi_1 + \Pi_1\Pi_2 - \Pi_1\Pi_2\Pi_1 \\
&= I - \Pi_1 - \Pi_2 + \Pi_1\Pi_2 + \Pi_2\Pi_1 \\
&= I - (\Pi_1 - \Pi_2)^2 \\
&= B.
\end{aligned}$$

På tilsvarende vis gælder, at $A^*A = B$. Dermed er $U^*U = UU^* = I$, og U er således en unitær operator. Der gælder, at

$$\begin{aligned}\Pi_1 A(\Pi_1 - \Pi_2)^2 &= \Pi_1\Pi_2(\Pi_1 + \Pi_2 - \Pi_1\Pi_2 - \Pi_2\Pi_1)\\ &= \Pi_1\Pi_2\Pi_1 + \Pi_1\Pi_2 - \Pi_1\Pi_2\Pi_1\Pi_2 - \Pi_1\Pi_2\Pi_1\\ &= \Pi_1\Pi_2 - \Pi_1\Pi_2\Pi_1\Pi_2\\ &= \Pi_1\Pi_2 + \Pi_2\Pi_1\Pi_2 - \Pi_1\Pi_2\Pi_1\Pi_2 - \Pi_2\Pi_1\Pi_2\\ &= (\Pi_1 + \Pi_2 - \Pi_1\Pi_2 - \Pi_2\Pi_1)\Pi_1\Pi_2\\ &= (\Pi_1 - \Pi_2)^2\Pi_1 A.\end{aligned}$$

Dermed kommuterer $\Pi_1 A$ også med $B^{-\frac{1}{2}}$, og der gælder, at

$$\Pi_1 U = \Pi_1 A B^{-\frac{1}{2}} = B^{-\frac{1}{2}}\Pi_1 A = B^{-\frac{1}{2}} A\Pi_2 = U\Pi_2,$$

og sætningen er dermed vist. □

Nu defineres λ_0 som $\lambda_0 = \min\{\lambda_0, \lambda'\}$, så gælder der jf. Sætning 3.3 for $|\lambda| < \lambda_0$, at $\|P_1(\lambda) - P_1(0)\| < 1$. Og idet $P_1(\lambda)$ i henhold til Sætning 3.6 er en ortogonalprojektion, kan en unitær operator jf. ovenstående sætning og bevis konstrueres ved

$$U(\lambda) = \left(I - (P_1(\lambda) - P_1(0))^2\right)^{-\frac{1}{2}} (P_1(\lambda)P_1(0) + (I - P_1(\lambda))(I - P_1(0))).$$

Denne unitære operator opfylder, at

$$P_1(\lambda)U(\lambda) = U(\lambda)P_1(0),$$

og dette er ensbetydende med, at

$$P_1(\lambda) = U(\lambda)P_1(0)U^*(\lambda).$$

Det ønskes vist, at $P_1(\lambda)$ har samme dimension som $P_1(0)$. Det bemærkes, at $P_1(0)\mathbf{f} = \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(0)$. Dermed gælder, at

$$\begin{aligned}P_1(\lambda)\mathbf{f} &= U(\lambda)P_1(0)U^*(\lambda)\mathbf{f}\\ &= \langle U^*(\lambda)\mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0)\\ &= \langle \mathbf{f}, U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0)\\ &= \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(\lambda)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(\lambda),\end{aligned}$$

hvor $\boldsymbol{\psi}_1(\lambda) = U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0)$. Dermed udspænder $P_1(\lambda)$ et underrum, som har samme dimension som $P_1(0)$. Det betyder, at idet den positivt orienterede cirkel Γ omkranser præcis en ikke-degenereret egenværdi for H_0, omkranser den også præcis en ikke-degenereret egenværdi for $H(\lambda)$, og dermed eksisterer der en ikke-degenereret egenværdi $E_1(\lambda)$ nær $E_1(0)$, hvis λ er lille nok, og således er Sætning 3.1 bevist.

3.2 Bestemmelse af egenværdien $E_1(\lambda)$

I dette afsnit ønskes egenværdien $E_1(\lambda)$ bestemt. Dette gøres ved først at vise, at $E_1(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$, og derefter bestemme de første fem koefficienter i potensrækken for $E_1(\lambda)$, således at det er muligt at approksimere $E_1(\lambda)$. Derfor ønskes følgende sætning bevist.

Sætning 3.9 *Lad den selvadjungerede kompakte operator $H(\lambda)$ være givet ved $H(\lambda) = H_0 + \lambda V$. Så gælder, hvis $|\lambda| < \lambda_0$, at egenværdien $E_1(\lambda)$ for $H(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$.*

Bevis:
Det ønskes vist, at $U(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$. Da funktionen

$$F(\zeta) = (1 - \zeta)^{-\frac{1}{2}}$$

blev indført, blev det vist, at $F(\zeta)$ er holomorf og dermed analytisk for $|\zeta| < 1$. Det betyder, at der gælder, at

$$F(\zeta) = \sum_{k \geq 0} \gamma_k \zeta^k,$$

hvor γ_k er som tidligere beskrevet. Det bemærkes, at $F(\zeta)$ i henhold til Cauchys integralformel, [Jensen, 2005, Theorem 4.7], også kan udtrykkes som

$$F(\zeta) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} \frac{F(z)}{z - \zeta} \mathrm{d}z,$$

hvor ζ er indeholdt i cirklen Γ_ρ, som har centrum i $\zeta = 0$ og radius $\rho < 1$. I henhold til [Jensen, 2005, Theorem 5.4] gælder der også, at

$$\gamma_k = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} \frac{F(z)}{z^{k+1}} \mathrm{d}z.$$

I forbindelse med dette blev det vist, at for $\|T\| < 1$, er funktionen $F(T)$ givet ved

$$F(T) = (I - T)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k\geq 0} \gamma_k T^k,$$

hvor γ_k er givet som i udtrykket for $F(\zeta)$. Nu indføres en funktion $\tilde{F}(T)$, som er givet ved

$$\tilde{F}(T) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} F(\zeta)(\zeta I - T)^{-1} \mathrm{d}\zeta,$$

og det ønskes således vist, at $\tilde{F}(T) = F(T)$. Det bemærkes, at hvis $\|T\| < \rho$, gælder der for $\zeta \in \Gamma_\rho$, at

$$\left\| \frac{1}{\zeta} T \right\| = \left| \frac{1}{\zeta} \right| \|T\| = \frac{1}{\rho} \|T\| < 1,$$

og idet der gælder, at

$$\zeta I - T = \zeta \left(I - \frac{1}{\zeta} T \right),$$

haves der således, at

$$(\zeta I - T)^{-1} = \frac{1}{\zeta} \left(I - \frac{1}{\zeta} T \right)^{-1} = \frac{1}{\zeta} \sum_{k\geq 0} \frac{1}{\zeta^k} T^k = \sum_{k\geq 0} \frac{1}{\zeta^{k+1}} T^k.$$

Dermed er $\tilde{F}(T)$ givet ved

$$\begin{aligned} \tilde{F}(T) &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} F(\zeta) \sum_{k\geq 0} \frac{1}{\zeta^{k+1}} T^k \mathrm{d}\zeta \\ &= \sum_{k\geq 0} \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} \frac{F(\zeta)}{\zeta^{k+1}} \mathrm{d}\zeta T^k \\ &= \sum_{k\geq 0} \gamma_k T^k \\ &= F(T). \end{aligned} \tag{3.7}$$

I det ovenstående er der byttet rundt på summations- og integrationsrækkefølgen. Dette er jf. Fubinis sætning, [Berg og Madsen, 2001, Sætning

6.12], muligt, hvis $\sum_{k\geq 0}\left\|\gamma_k T^k\right\| < \infty$. Det bemærkes, at $\gamma_k \leq 1$ for alle k, og dermed haves

$$\sum_{k\geq 0}\left\|\gamma_k T^k\right\| = \sum_{k\geq 0}|\gamma_k|\left\|T^k\right\| < \sum_{k\geq 0}\left\|T^k\right\| \leq \sum_{k\geq 0}\|T\|^k < \infty,$$

idet $\|T\| < 1$. Dermed kan der byttes rundt på integrations- og summationsrækkefølgen.

Nu lades

$$T = T(\lambda) = (P_1(\lambda) - P_1(0))^2 = (P_1(\lambda) - P_1(0))(P_1(\lambda) - P_1(0)).$$

Det bemærkes, at $P_1(\lambda)$ ifølge Sætning 3.4 er en analytisk funktion om $\lambda = 0$, og da $P_1(0)$ er en konstant operator, er $P_1(\lambda) - P_1(0)$ analytisk om $\lambda = 0$. Det betyder, at $T(\lambda)$ er et produkt af funktioner, der er analytiske om $\lambda = 0$, og dermed er $T(\lambda)$ også analytisk om $\lambda = 0$. Det betyder, at $T(\lambda)$, når $|\lambda| < \lambda_0$, kan udtrykkes som

$$T(\lambda) = \sum_{k\geq 0} T_k \lambda^k.$$

Nu defineres funktionen $M(\lambda)$ ved

$$M(\lambda) = (I - T(\lambda))^{-\frac{1}{2}}.$$

Det ønskes vist, at $M(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$. Dette vises ved at vise, at funktionen er holomorf. Fra udtryk (3.7) følger det, at $M(\lambda)$ kan udtrykkes som

$$M(\lambda) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} (1-\zeta)^{-\frac{1}{2}} (\zeta I - T(\lambda))^{-1} \mathrm{d}\zeta.$$

Dermed gælder der, at

$$\begin{aligned} &M(\lambda + \delta\lambda) - M(\lambda) \\ &\quad = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\Gamma_\rho} (1-\zeta)^{-\frac{1}{2}} \left((\zeta I - T(\lambda + \delta\lambda))^{-1} - (\zeta I - T(\lambda))^{-1}\right) \mathrm{d}\zeta. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Det bemærkes, at

$$\begin{aligned} &(\zeta I - T(\lambda + \delta\lambda))^{-1}(T(\lambda + \delta\lambda) - T(\lambda))(\zeta I - T(\lambda))^{-1} \\ &\quad = (\zeta I - T(\lambda + \delta\lambda))^{-1}(T(\lambda + \delta\lambda) - \zeta I + \zeta I - T(\lambda))(\zeta I - T(\lambda))^{-1} \\ &\quad = (\zeta I - T(\lambda + \delta\lambda))^{-1} - (\zeta I - T(\lambda))^{-1}. \end{aligned}$$

Dette indsættes i (3.8), udtrykket divideres med $\delta\lambda$ og grænseværdien tages, når $\delta\lambda \to 0$, og dermed fås

$$\begin{aligned}\lim_{\delta\lambda\to 0}\frac{M(\lambda+\delta\lambda)-M(\lambda)}{\delta\lambda} &= \lim_{\delta\lambda\to 0}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\Gamma_\rho}(1-\zeta)^{-\frac{1}{2}}(\zeta I - T(\lambda+\delta\lambda))^{-1}\\ &\qquad\cdot\frac{T(\lambda+\delta\lambda)-T(\lambda)}{\delta\lambda}(\zeta I - T(\lambda))^{-1}\mathrm{d}\zeta\\ &= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\Gamma_\rho}(1-\zeta)^{-\frac{1}{2}}(\zeta I - T(\lambda))^{-1}\\ &\qquad\cdot T'(\lambda)(\zeta I - T(\lambda))^{-1}\mathrm{d}\zeta,\end{aligned}$$

hvor det sidste lighedstegn følger af, at $T(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$. Idet grænseværdien eksisterer, er $M(\lambda)$ holomorf og således også analytisk om $\lambda = 0$. Der gælder så, at $U(\lambda)$ kan udtrykkes som

$$U(\lambda) = M(\lambda)(P_1(\lambda)P_1(0) + (I - P_1(\lambda))(I - P_1(0))).$$

Det bemærkes, at funktionerne $M(\lambda)$, $P_1(\lambda)P_1(0)$ og $(I - P_1(\lambda))(I - P_1(0))$ alle er analytiske om $\lambda = 0$. Dermed er $U(\lambda)$ produkt af analytiske funktioner, og således selv analytisk. Det betyder, at $U(\lambda)$ kan udtrykkes som

$$U(\lambda) = \sum_{k\geq 0} U_k\lambda^k$$

for $|\lambda| < \lambda_0$.

Nu ønskes egenværdien $E_1(\lambda)$ for $H(\lambda)$ bestemt. Der gælder, at

$$E_1(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda) = H(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda),$$

og således haves, at

$$\begin{aligned}E_1(\lambda) &= E_1(\lambda)\langle\boldsymbol{\psi}_1(\lambda),\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)\rangle = \langle E_1(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda),\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)\rangle\\ &= \langle H(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(\lambda),\boldsymbol{\psi}_1(\lambda)\rangle = \langle H(\lambda)U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0), U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\\ &= \langle U^*(\lambda)H(\lambda)U(\lambda)\boldsymbol{\psi}_1(0),\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle.\end{aligned}$$

Det bemærkes, at

$$U^*(\lambda)H(\lambda)U(\lambda) = U^*(\lambda)H_0U(\lambda) + \lambda U^*(\lambda)VU(\lambda).$$

Da både H_0 og V er begrænsede operatorer, som er uafhængige af λ, gælder der, at når $U(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$, er $H_0 U(\lambda)$ og $VU(\lambda)$ også analytiske om $\lambda = 0$. Dermed er $U^*(\lambda)H(\lambda)U(\lambda)$ produkt af analytiske funktioner, og således selv analytisk. Dette medfører, at også egenværdien er analytisk, således at

$$E_1(\lambda) = \sum_{k\geq 0} \varepsilon_k \lambda^k,$$

og sætningen er dermed bevist. □

Det bemærkes, at koefficienterne ε_k jf. [Jensen, 2005, Theorem 2.9] er givet ved

$$\varepsilon_k = \frac{1}{k!} E_1^{(k)}(0).$$

I det følgende ønskes koefficienterne ε_k bestemt. For at gøre dette anvendes Feshbachs formel.

Lad $P_1(0) = P_{\text{eff}}$ og $\sum_{k\neq 1} P_k(0) = I - P_1(0) = P_\perp$. Det bemærkes, at H_0 kommuterer med P_{eff}, idet

$$\begin{aligned}
H_0 P_1(0)\mathbf{f} &= \langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle H_0 \boldsymbol{\psi}_1(0) = E_1(0)\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(0)\\
&= E_1(0) P_1(0)\mathbf{f},\\
P_1(0) H_0 \mathbf{f} &= \langle H_0\mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(0) = \langle \mathbf{f}, H_0\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(0)\\
&= E_1(0)\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(0) = E_1(0) P_1(0)\mathbf{f}.
\end{aligned}$$

Dermed gælder der, at

$$\begin{aligned}
P_{\text{eff}} H(\lambda) P_\perp &= P_{\text{eff}} H_0 P_\perp + \lambda P_{\text{eff}} V P_\perp = H_0 P_{\text{eff}} P_\perp + \lambda P_{\text{eff}} V P_\perp\\
&= \lambda P_{\text{eff}} V P_\perp,\\
P_\perp H(\lambda) P_{\text{eff}} &= P_\perp H_0 P_{\text{eff}} + \lambda P_\perp V P_{\text{eff}} = H_0 P_\perp P_{\text{eff}} + \lambda P_\perp V P_{\text{eff}}\\
&= \lambda P_\perp V P_{\text{eff}}.
\end{aligned}$$

I henhold til Feshbachs formel, Sætning 2.1, gælder der, at resolventen, såfremt den eksisterer for et givet ζ, kan udtrykkes som

$$(H(\lambda) - \zeta I)^{-1} = \begin{bmatrix} S_W & -\lambda S_W V R \\ \lambda R V S_W & R + \lambda^2 R V S_W V R \end{bmatrix},$$

hvor

$$\begin{aligned}
R_\lambda(\zeta) &= (P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp)^{-1}, \\
W_\lambda(\zeta) &= -\lambda^2 P_{\text{eff}} V R_\lambda(\zeta) V P_{\text{eff}}, \\
S_{W,\lambda}(\zeta) &= (H_{\text{eff}}(\lambda) + W_\lambda(\zeta) - P_{\text{eff}}\zeta I P_{\text{eff}}).
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Det bemærkes således, at resolventen kun eksisterer, hvis $S_{W,\lambda}(\zeta)$, og dermed også $R_\lambda(\zeta)$ og $W_\lambda(\zeta)$, eksisterer. Dermed må der gælde, at de ζ, for hvilke $S_{W,\lambda}(\zeta)$ ikke eksisterer, må være egenværdier for $H(\lambda)$.

Det bemærkes, at hvis ζ ikke er i spektret for $H(\lambda)$, gælder der, at

$$\begin{aligned}
P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp &= P_\perp(H_0 - \zeta I + \lambda V)P_\perp \\
&= H_{0,\perp} - \zeta P_\perp + \lambda P_\perp V P_\perp \\
&= \left(I + \lambda P_\perp V P_\perp (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right)(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp) \\
&= \left(I + \lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right)(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp).
\end{aligned}$$

Ved det sidste lighedstegn er det udnyttet, at $(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}$ er en operator i Hilbertrummet $\mathcal{H}_\perp$, og dermed gælder, at $P_\perp(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1} = (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}$. Operatoren $P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp$ er invertibel, hvis de to indgående operatorer er det. Operatoren $H_{0,\perp} - \zeta P_\perp$ er klart invertibel, hvis ζ er i resolventmængden for $H_{0,\perp}$. Den anden operator er invertibel, hvis $\left\|-\lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right\| < 1$. Det bemærkes, at

$$\begin{aligned}
\left\|-\lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right\| &\le |\lambda| \, \|P_\perp\| \, \|V\| \, \left\|(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right\| \\
&= |\lambda| \, \|V\| \, \left\|(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right\|.
\end{aligned}$$

Dermed er operatoren invertibel, hvis det er opfyldt at

$$|\lambda| < \frac{1}{\|V\| \, \|(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\|}.$$

Nu ønskes $\left\|(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}\right\|$ bestemt. Det bemærkes, at idet $H_0 - \zeta I = \sum_{k=1}^{N}(E_k(0) - \zeta)P_k(0)$, gælder der, at

$$\begin{aligned}
P_\perp(H_0 - \zeta I)P_\perp &= \sum_{j=2}^{N}\sum_{k=1}^{N}\sum_{i=2}^{N} P_j(0)(E_k(0) - \zeta)P_k(0)P_i(0) \\
&= \sum_{k=2}^{N}(E_k(0) - \zeta)P_k(0),
\end{aligned}$$

idet $P_k P_j = 0$ for $k \neq j$. Således gælder der, at operatoren $(H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}$ i Hilbertrummet $\mathcal{H}_\perp$ kan udtrykkes ved

$$(P_\perp(H_0 - \zeta I)P_\perp)^{-1} = \sum_{k=2}^{N} \frac{1}{E_k(0) - \zeta} P_k(0).$$

I henhold til Parsevals lighed, Sætning 1.9, gælder der for et vilkårligt $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$, at

$$\begin{aligned}
\left\| (P_\perp(H_0 - \zeta I)P_\perp)^{-1} \mathbf{f} \right\|^2 &= \sum_{k=2}^{N} \frac{1}{|E_k(0) - \zeta|^2} |\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k(0) \rangle|^2 \\
&\leq \sup_{j \geq 2} \frac{1}{|E_j(0) - \zeta|^2} \sum_{k=2}^{N} |\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_k(0) \rangle|^2 \\
&\leq \sup_{j \geq 2} \frac{1}{|E_j(0) - \zeta|^2} \|\mathbf{f}\|^2 .
\end{aligned}$$

Da dette gælder for et vilkårligt $\mathbf{f} \in \mathcal{H}$, gælder der, at

$$\begin{aligned}
\left\| (P_\perp(H_0 - \zeta I)P_\perp)^{-1} \right\| &\leq \sup_{j \geq 2} \frac{1}{|E_j(0) - \zeta|} \\
&\leq \frac{2}{|E_2(0) - E_1(0)|},
\end{aligned} \tag{3.10}$$

hvis $|E_1(0) - \zeta| < |E_j(0) - \zeta|$ for $j \geq 2$. Hvis $|E_1(0) - \zeta| < \frac{|E_2(0) - E_1(0)|}{2}$ gælder der, at $\left\| (P_\perp(H_0 - \zeta I)P_\perp)^{-1} \right\| < \frac{2}{|E_2(0) - E_1(0)|}$, og dermed er $I + \lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1}$ invertibel, hvis $|\lambda| < \frac{|E_2(0) - E_1(0)|}{2\|V\|}$, og i så fald gælder, at

$$\left(I + \lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1} \right)^{-1} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k \left(\lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1} \right)^k .$$

Dermed kan operatoren $R_\lambda(\zeta)$ udtrykkes ved

$$\begin{aligned}
R_\lambda(\zeta) &= (P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp)^{-1} \\
&= (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1} \left(I + \lambda P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1} \right)^{-1} \\
&= R_0(\zeta) \sum_{k \geq 0} (-1)^k \lambda^k (P_\perp V (H_{0,\perp} - \zeta P_\perp)^{-1})^k.
\end{aligned}$$

Det bemærkes, at $S_{W,\lambda}(\zeta)$ er givet som i udtryk (3.9), og de indgående led ønskes således bestemt. Der gælder, at

$$H_{\text{eff}}(\lambda) = P_{\text{eff}}(H_0 + \lambda V)P_{\text{eff}} = P_{\text{eff}}H_0P_{\text{eff}} + \lambda P_{\text{eff}}VP_{\text{eff}}.$$

Der haves, at $H_0 = \sum_{k=1}^{N} E_k(0)P_k$, og dermed gælder, at

$$\begin{aligned} P_{\text{eff}}H_0P_{\text{eff}} &= P_{\text{eff}}\sum_{k=1}^{N} E_k(0)P_kP_{\text{eff}} \\ &= P_{\text{eff}}E_1(0)P_{\text{eff}}P_{\text{eff}} \\ &= E_1(0)P_{\text{eff}}. \end{aligned}$$

Ydermere ønskes $\lambda P_{\text{eff}}VP_{\text{eff}}$ bestemt. Der gælder

$$\begin{aligned} \lambda P_{\text{eff}}VP_{\text{eff}}\mathbf{f} &= \lambda P_{\text{eff}}V\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \boldsymbol{\psi}_1(0) \\ &= \lambda\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\boldsymbol{\psi}_1(0) \\ &= \lambda\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle P_{\text{eff}}\mathbf{f}. \end{aligned}$$

Dermed gælder, at $\lambda P_{\text{eff}}VP_{\text{eff}} = \lambda\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle P_{\text{eff}}$, og således haves

$$H_{\text{eff}}(\lambda) = \left(E_1(0) + \lambda\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\right) P_{\text{eff}}.$$

Operatoren $W_\lambda(\zeta)$ er givet ved

$$W_\lambda(\zeta) = -\lambda^2 P_{\text{eff}}VR_\lambda(\zeta)VP_{\text{eff}}.$$

Dermed gælder der, at

$$\begin{aligned} W_\lambda(\zeta)\mathbf{f} &= -\lambda^2 P_{\text{eff}}VR_\lambda(\zeta)VP_{\text{eff}}\mathbf{f} \\ &= -\lambda^2 P_{\text{eff}}\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle VR_\lambda(\zeta)V\boldsymbol{\psi}_1(0) \\ &= -\lambda^2\langle \mathbf{f}, \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\langle VR_\lambda(\zeta)V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\boldsymbol{\psi}_1(0) \\ &= -\lambda^2\langle R_\lambda(\zeta)V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle P_{\text{eff}}\mathbf{f}. \end{aligned}$$

Og dermed er $W_\lambda(\zeta) = -\lambda^2\langle R_\lambda(\zeta)V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle P_{\text{eff}}$. Det bemærkes yderligere, at $P_{\text{eff}}\zeta IP_{\text{eff}} = \zeta P_{\text{eff}}$. Således kan $S_{W,\lambda}(\zeta)$ udtrykkes som

$$\begin{aligned} S_{W,\lambda}(\zeta) &= \big((E_1(0) + \lambda\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\ &\qquad -\lambda^2\langle R_\lambda(\zeta)V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - \zeta\big) P_{\text{eff}}\big)^{-1} \\ &= \big(E_1(0) + \lambda\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\ &\qquad -\lambda^2\langle R_\lambda(\zeta)V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - \zeta\big)^{-1} P_{\text{eff}}. \end{aligned}$$

Dermed kan $S_{W,\lambda}(\zeta)$ udtrykkes som $S_{W,\lambda}(\zeta) = \Phi_\lambda^{-1}(\zeta) P_{\text{eff}}$, hvor

$$\Phi_\lambda(\zeta) = E_1(0) + \lambda \langle V \boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - \lambda^2 \langle R_\lambda(\zeta) V \boldsymbol{\psi}_1(0), V \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - \zeta.$$

Det bemærkes, at $S_{W,\lambda}(\zeta)$ ikke eksisterer, hvis $\Phi_\lambda(\zeta) = 0$. De ζ, for hvilke $S_{W,\lambda}(\zeta)$ ikke eksisterer, er egenværdier for $H(\lambda)$. Dermed gælder der, at

$$\Phi_\lambda(E_1(\lambda)) = 0,$$

og således haves, at

$$E_1(\lambda) = E_1(0) + \lambda \langle V \boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - \lambda^2 \langle R_\lambda(E_1(\lambda)) V \boldsymbol{\psi}_1(0), V \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle.$$

Fra Sætning 3.9 vides, at $E_1(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$. Det betyder, at $E_1(\lambda)$ også kan skrives som potensrækken

$$E_1(\lambda) = \sum_{k\geq 0} \frac{1}{k!} \frac{\mathrm{d}^k E_1(0)}{\mathrm{d}\lambda^k} \lambda^k = \sum_{k \geq 0} \varepsilon_k \lambda^k.$$

De første fem koefficienter til dette udtryk ønskes nu bestemt. For at kunne finde koefficienterne, er det nødvendigt at vide, hvordan operatoren $R_\lambda(\zeta)$ differentieres med hensyn til λ. Derfor indføres følgende sætning.

Sætning 3.10 *Den afledede af $R_\lambda(E_1(\lambda))$ med hensyn til λ er givet ved*

$$\frac{d}{d\lambda} R_\lambda(E_1(\lambda)) = E_1'(\lambda) R_\lambda^2(E_1(\lambda)) - R_\lambda(E_1(\lambda)) V R_\lambda(E_1(\lambda)).$$

Bevis:
Det bemærkes, at $R_\lambda(\zeta)$ er givet ved

$$R_\lambda(\zeta) = \left(P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp\right)^{-1},$$

og at $R_\lambda(\zeta)$ i henhold til udtryk (3.10) er en begrænset operator for ζ nær $E_1(0)$. Ydermere bemærkes, at den afledede af $R_\lambda(E_1(\lambda))$ med hensyn til λ er givet ved

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} R_\lambda(E_1(\lambda)) = \lim_{\delta\lambda \to 0} \frac{1}{\delta\lambda} (R_{\lambda+\delta\lambda}(E_1(\lambda + \delta\lambda)) - R_\lambda(E_1(\lambda))).$$

For at kunne evaluere dette udtryk indføres følgende lighed

$$P_\perp(H(\lambda + \delta\lambda) - \zeta I)P_\perp - P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp = \delta\lambda P_\perp V P_\perp.$$

Ganges dette udtryk med $R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)$ fra højre fås

$$I - P_\perp(H(\lambda) - \zeta I)P_\perp R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) = \delta\lambda P_\perp V P_\perp R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta),$$

og ganges det så med $R_\lambda(\zeta)$ fra venstre fås

$$R_\lambda(\zeta) - R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) = \delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta). \tag{3.11}$$

Dermed haves

$$\frac{1}{\delta\lambda}(R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) - R_\lambda(\zeta)) = -R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta),$$

og dermed gælder, såfremt $R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)$ konvergerer mod $R_\lambda(\zeta)$ for $\delta\lambda \to 0$, at

$$\lim_{n\to 0} \frac{1}{\delta\lambda}(R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) - R_\lambda(\zeta)) = -R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp R_\lambda(\zeta).$$

Det ønskes således vist, at $R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)$ konvergerer mod $R_\lambda(\zeta)$ for $\delta\lambda \to 0$. Dette vises ved at vise at $\|R_\lambda(\zeta) - R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)\| < \varepsilon$ for $|\lambda - (\lambda + \delta\lambda)| < \delta$. For at vise dette tages der udgangspunkt i udtryk (3.11). Der gælder således

$$\begin{aligned} R_\lambda(\zeta) - R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) &= \delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) \Leftrightarrow \\ R_\lambda(\zeta) &= (I + \delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp) R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) \Leftrightarrow \\ R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta) &= (I + \delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp)^{-1} R_\lambda(\zeta). \end{aligned} \tag{3.12}$$

Den sidste ligning har kun mening, hvis $\|-\delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp\| < 1$. Definer nu $a = \|R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp\| > 0$. Det bemærkes, at

$$\begin{aligned} a &= \|R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp\| \le \|R_\lambda(\zeta)\| \, \|P_\perp\| \, \|V\| \, \|P_\perp\| \\ &= \|R_\lambda(\zeta)\| \, \|V\| < \infty, \end{aligned}$$

idet $R_\lambda(\zeta)$ og V begge er begrænsede. Så gælder der for alle $|\delta\lambda| < \frac{1}{2a}$, at $\|-\delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp\| < \frac{1}{2}$, og udtryk (3.12) har således mening. Dermed gælder der, at

$$\begin{aligned} \left\|(I + \delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp)^{-1}\right\| &= \left\| \sum_{k\ge 0} (-\delta\lambda R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp)^k \right\| \\ &\le \sum_{k\ge 0} |\delta\lambda|^k \, \|R_\lambda(\zeta) P_\perp V P_\perp\|^k \\ &< \sum_{k\ge 0} \left(\frac{1}{2}\right)^k = 2. \end{aligned}$$

Så gælder der i henhold til udtryk (3.12), at

$$\begin{aligned}\|R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)\| &= \left\|(I+\delta\lambda R_\lambda(\zeta)P_\perp V P_\perp)^{-1}R_\lambda(\zeta)\right\| \\ &\leq \left\|(I+\delta\lambda R_\lambda(\zeta)P_\perp V P_\perp)^{-1}\right\| \|R_\lambda(\zeta)\| \\ &< 2\|R_\lambda(\zeta)\|.\end{aligned}$$

Dermed fås, ved at tage normen af udtryk (3.11) og indsætte ovenstående resultater, at

$$\begin{aligned}\|R_\lambda(\zeta) - R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)\| &= \|\delta\lambda R_\lambda(\zeta)P_\perp V P_\perp R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)\| \\ &\leq |\delta\lambda| \|R_\lambda(\zeta)\| \|P_\perp V P_\perp\| \|R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)\| \\ &< 2|\delta\lambda| \|R_\lambda(\zeta)\|^2 \|P_\perp V P_\perp\| \\ &< 2|\delta\lambda| c,\end{aligned}$$

idet $R_\lambda(\zeta)$ og $P_\perp V P_\perp$ er begrænsede. Således gælder der, at

$$\|R_\lambda(\zeta) - R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)\| < \varepsilon = 2\delta c$$

for $|\delta\lambda| < \delta$, og $R_{\lambda+\delta\lambda}(\zeta)$ konvergerer således mod $R_\lambda(\zeta)$.

Det bemærkes, at der gælder, at

$$R_\lambda(\zeta+\delta\zeta) - R_\lambda(\zeta) = \delta\zeta R_\lambda(\zeta+\delta\zeta)R_\lambda(\zeta),$$

og dermed haves, at

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}R_\lambda(E_1(\lambda)) &= \lim_{\delta\lambda\to 0}\frac{1}{\delta\lambda}(R_{\lambda+\delta\lambda}(E_1(\lambda+\delta\lambda)) - R_\lambda(E_1(\lambda))) \\ &= \lim_{\delta\lambda\to 0}\frac{1}{\delta\lambda}(R_{\lambda+\delta\lambda}(E_1(\lambda+\delta\lambda)) - R_{\lambda+\delta\lambda}(E_1(\lambda)) \\ &\qquad + R_{\lambda+\delta\lambda}(E_1(\lambda)) - R_\lambda(E_1(\lambda))) \\ &= \lim_{\delta\lambda\to 0}\left(\frac{E_1(\lambda+\delta\lambda)-E_1(\lambda)}{\delta\lambda}R_{\lambda+\delta\lambda}(E_1(\lambda+\delta\lambda))R_\lambda(E_1(\lambda))\right) \\ &\quad - R_\lambda(E_1(\lambda))VR_\lambda(E_1(\lambda)) \\ &= E_1'(\lambda)R_\lambda^2(E_1(\lambda)) - R_\lambda(E_1(\lambda))VR_\lambda(E_1(\lambda)),\end{aligned}$$

og sætningen er dermed bevist. □

Således kan koefficienter i rækken bestemmes. Koefficienten ε_0 er givet ved

$$\begin{aligned}
\varepsilon_0 &= \frac{1}{0!}\frac{\mathrm{d}^0 E_1(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda^0}\bigg|_{\lambda=0} \\
&= E_1(0) + 0\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - 0^2\langle R_0(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&= E_1(0),
\end{aligned}$$

mens koefficienten ε_1 er givet ved

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= \frac{1}{1!}\frac{\mathrm{d}E_1(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\bigg|_{\lambda=0} \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\Big(E_1(0) + \lambda\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\qquad - \lambda^2\langle R_\lambda(E_1(\lambda))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\Big)\bigg|_{\lambda=0} \\
&= \Big(\langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle - 2\lambda\langle R_\lambda(E_1(\lambda))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad - \lambda^2 E_1'(\lambda)\langle R_\lambda^2(E_1(\lambda))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad + \lambda^2\langle R_\lambda(E_1(\lambda))VR_\lambda(E_1(\lambda))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle\Big)\bigg|_{\lambda=0} \\
&= \langle V\boldsymbol{\psi}_1(0), \boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle.
\end{aligned}$$

Ved at differentiere udtrykket for $E_1(\lambda)$ yderligere, kan de øvrige koefficienter findes, således at de tre næste koefficienter er givet ved

$$\begin{aligned}
\varepsilon_2 &= -\langle R_0(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle, \\
\varepsilon_3 &= \langle R_0(E_1(0))VR_0(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad - E_1'(0)\langle R_0^2(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle, \\
\varepsilon_4 &= -\frac{1}{2}E_1''(0)\langle R_0^2(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad - (E_1'(0))^2\langle R_0^3(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad + \frac{3}{2}E_1'(0)\langle R_0^2(E_1(0))VR_0(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}E_1'(0)\langle R_0(E_1(0))VR_0^2(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle \\
&\quad - \langle R_0(E_1(0))VR_0(E_1(0))VR_0(E_1(0))V\boldsymbol{\psi}_1(0), V\boldsymbol{\psi}_1(0)\rangle.
\end{aligned}$$

I dette kapitel er det blevet vist, at hvis $E_1(0)$ er en ikke-degenereret egenværdi for H_0, eksisterer en ikke-degenereret egenværdi $E_1(\lambda)$ for $H(\lambda)$

tæt på $E_1(0)$, hvis $|\lambda|$ er lille nok. Ydermere er det vist, at denne ikke-degenererede egenværdi $E_1(\lambda)$ er analytisk om $\lambda = 0$, og de første fem koefficienter er bestemt, således at egenværdien $E_1(\lambda)$ kan approksimeres. På tilsvarende vis kan øvrige ikke-degenererede egenværdier for $H(\lambda)$ bestemmes.

Hvis egenværdien for H_0 er degenereret med degenerationsgrad m, gælder i henhold til Rellichs sætning, [Reed og Simon, 1972b, Theorem XII.3], at der eksisterer $p \leq m$ forskellige egenværdier for $H(\lambda)$ tæt på egenværdien for H_0. Der gælder, at disse p egenværdier alle er analytiske om $\lambda = 0$, og der gælder, at summen af de p egenværdiers degenerationsgrad er m. På trods af de resultater, der er vist gennem rapporten, er Rellichs sætning dog ikke triviel at vise, og der henvises derfor blot til [Reed og Simon, 1972b] for et bevis.

Litteratur

[Agrawal, 2002] Agrawal, M. (2002). Axiomatic/Postulatory Quantum Mechanics. Rapport, Stanford University.

[Axler, 1997] Axler, S. (1997). *Linear Algebra Done Right*. Springer, 2. udgave. ISBN 0-387-98258-2.

[Berg og Madsen, 2001] Berg, C. og Madsen, T. G. (2001). *Mål- og integrationsteori*. Universitetsbogladen, København.

[Cohen, 2003] Cohen, G. (2003). *A Course in Modern Analysis and its Applications*. Cambridge, 1. udgave. ISBN 0-521-52627-2.

[Cornean, 2008] Cornean, H. (2008). Several applications of the Feshbach Formula. Ikke-publicerede noter til PhD-kursus.

[Jensen, 2005] Jensen, A. (2005). A Short Introduction to Complex Analysis. Rapport, Department of Mathematical Sciences Aalborg University.

[Kato, 1980] Kato, T. (1980). *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer, 2. udgave. ISBN 3-540-58661-X.

[Reed og Simon, 1972a] Reed, M. og Simon, B. (1972a). *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*. Academic Press, Inc. ISBN 0-12-585050-6 (v. 1).

[Reed og Simon, 1972b] Reed, M. og Simon, B. (1972b). *Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators*. Academic Press, Inc. ISBN 0-12-585004-2 (v. 4).

[Wade, 2004] Wade, W. R. (2004). *An Introduction to Analysis*. Pearson Prentice Hall, 3. udgave. ISBN 0-13-124683-6.