

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta

Band: 25 (1952)

Heft: V

Artikel: Ein neues Variationsverfahren zur genäherten Berechnung der Eigenwerte hermitescher Operatoren

Autor: Maehly, Hans J.

DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-112322>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 15.10.2024

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Ein neues Variationsverfahren zur genäherten Berechnung der Eigenwerte hermitescher Operatoren

von Hans J. Maehly (Phys. Institut der ETH., Zürich).

(6. III. 1952.)

Summary. A new variation procedure for the approximate computation of eigenvalues is developed. It is well known that the Ritz-Method will give upper bounds for the lowest eigenvalues; by help of our new procedure however, *upper and lower bounds* can be calculated (even for operators whose spectrum extends from $-\infty$ to $+\infty$), if the positions of the neighbouring eigenvalues can roughly be estimated. As an example, the two lowest eigenvalues λ_1, λ_2 of the differential equation (arising in the deuteron-problem)

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} - \kappa^2 \Phi + \lambda \frac{e^{-x}}{x} \Phi = 0$$

are calculated with high accuracy.

1. Einleitung.

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit Methoden zur genäherten Berechnung der Eigenwerte eines hermiteschen Operators \mathbf{A} , also derjenigen Werte λ_i , für welche die Gleichung

$$\mathbf{A} f_i = \lambda_i f_i \quad (1.1)$$

lösbar ist. Die Lösung dieser Gleichung ist bekanntlich äquivalent mit der Aufgabe, diejenigen Funktionen $\psi = f_i$ zu finden, für welche der Erwartungswert von \mathbf{A} , d. h. der Quotient

$$L(\psi) = \frac{(\psi, \mathbf{A} \psi)}{(\psi, \psi)} \quad (1.2)$$

bei allen Variationen von ψ stationär bleibt*), und es ist

$$L(f_i) = \frac{(f_i, \mathbf{A} f_i)}{(f_i, f_i)} = \lambda_i. \quad (1.3)$$

*) Genauer: Für alle zur Variation zugelassenen Funktionen; vgl. hierzu und für einen kurzen Beweis der Äquivalenz der Eigenwertgleichung (1.1) mit dem Variationsproblem das 7. Kapitel dieser Arbeit.

Mit (φ, ψ) bezeichnen wir hier ein „hermitesches Produkt“ mit den Eigenschaften

$$(\varphi, \psi) = \overline{(\psi, \varphi)} \quad (1.4)$$

und

$$(\psi, \psi) > 0 \quad \text{für } \psi \neq 0 \text{ *);} \quad (1.5)$$

die Hermitezität von \mathbf{A} wird dann durch die Gleichung

$$(\varphi, \mathbf{A} \psi) = (\mathbf{A} \varphi, \psi) \quad (1.6)$$

ausgedrückt. — Oft ist das hermitesche Produkt in der Form

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi \bar{\psi} dq \quad (1.7)$$

gegeben; dann lautet die Hermitezitätsbedingung einfach:

$$\int \varphi (\mathbf{A} \bar{\psi}) dq = \int \bar{\psi} (\mathbf{A} \varphi) dq. \quad (1.8)$$

2. Das Ritzsche Verfahren.

Als Grundlage für das im 3. Kapitel zu besprechende neue Verfahren sollen hier kurz die wichtigsten Sätze über das Ritzsche Verfahren zusammengestellt werden. Dieses besteht bekanntlich darin, dass man zum Variationsproblem $\delta L(\psi) = 0$ nur Linearkombinationen von n gegebenen, voneinander linear unabhängigen „Koordinatenfunktionen“ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ zulässt**). Man setzt also ψ in der Form

$$\psi = \sum_{l=1}^n y_l \psi_l \text{ ***)} \quad (2.1)$$

an und bestimmt die Koeffizienten y_1, y_2, \dots, y_n so, dass

$$\frac{\partial}{\partial y_m} L(\psi) = 0 \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (2.2)$$

Entsprechend den Eigenfunktionen und Eigenwerten des exakten

*) Eine genauere Definition gibt NEUMANN¹⁾, S. 21.

***) Vgl. neben den Originalarbeiten von W. RITZ²⁾ die Abhandlungen von COLLATZ³⁾⁴⁾⁵⁾ und die Diss. des Verf.⁶⁾. HYLLEAAS⁷⁾ hat wohl als erster die Anwendungsmöglichkeiten des Ritzschen Verfahrens zur genäherten Berechnung der Eigenwerte der Schroedinger-Gleichung näher untersucht.

***) Die ψ_l müssen natürlich „zur Variation zugelassene Funktionen“ sein, wie die ψ in (1.2); vgl. (7.6).

Eigenwertproblems (1.1) erhält man auf diese Weise n „Lösungsfunktionen“ g_i ,

$$g_i = \sum_{l=1}^n y_{il} \psi_l, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.3)$$

und n „Ritzsche Werte“

$$L_i = L(g_i), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.4)$$

Analog zu einigen Spezialfällen, für welche das Ritzsche Verfahren näher untersucht wurde, kann man ganz allgemein folgende Sätze beweisen:

1. Die Ritzschen Werte sind identisch mit den n (evtl. z. T. mehrfachen) Wurzeln der Säkulargleichung

$$\det [(\psi_l, \mathbf{A} \psi_m) - L_i (\psi_l, \psi_m)] = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.5)$$

Diese L_i sind immer reell; wir ordnen sie der Grösse nach, so dass also

$$L_1 \leq L_2 \leq \dots \leq L_n. \quad (2.6)$$

2. Die g_i bilden ein Orthogonalsystem und können so normiert werden, dass

$$\left. \begin{aligned} (g_i, g_j) &= \sum_{l,m=1}^n (\psi_l, \psi_m) y_{il} \overline{y_{jm}} = \delta_{ij}, \\ (g_i, \mathbf{A} g_j) &= \sum_{l,m=1}^n (\psi_l, \mathbf{A} \psi_m) y_{il} \overline{y_{jm}} = L_i \delta_{ij}. \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

3. Fügt man dem Ritzschen Ansatz (2.1) noch eine weitere, von den n ersten linear unabhängige Koordinatenfunktion ψ_{n+1} zu, so können die Ritzschen Werte L_1, \dots, L_n nur sinken, aber nie unter den nächst tieferen Wert des alten Systems.

4. Ist der Operator \mathbf{A} nach unten halbbeschränkt und sein Spektrum diskret*), so sind die Ritzschen Werte obere Schranken für die entsprechenden Eigenwerte, d. h. es ist

$$\lambda_i \leq L_i, \quad (2.8)$$

wenn die n kleinsten Eigenwerte analog zu (2.6) geordnet sind:

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots \quad (2.9)$$

*) Ein Operator heisst nach unten (bzw. oben) halbbeschränkt, wenn $L(\psi)$ für alle zugelassenen Funktionen ψ ein Minimum (bzw. Maximum) besitzt; z. B. ist jeder positiv-definite Operator nach unten halbbeschränkt; vgl. NEUMANN¹⁾, S. 51/52. Für den Fall gemischter Spektren, vgl. Kap. 9.

5. Ist der Operator \mathbf{A} nach *oben* halbbeschränkt und sein Spektrum diskret, so sind die Ritzschen Werte *untere* Schranken für die entsprechenden Eigenwerte, d. h. es ist

$$\Lambda_i \geq L_{n-i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.10)$$

wenn wir mit $\Lambda_1, \dots, \Lambda_n$ die n grössten Eigenwerte bezeichnen:

$$\Lambda_1 \geq \Lambda_2 \geq \dots \geq \Lambda_n \geq \dots \quad (2.11)$$

Zusammenfassend können wir also sagen: *Das Ritzsche Verfahren liefert „innere Schranken“ für die äussersten Eigenwerte.* — Es ist daher nur dann wirklich brauchbar, wenn es solche äussersten Eigenwerte überhaupt gibt, wenn also \mathbf{A} mindestens halbbeschränkt, oder noch besser (beidseitig) beschränkt ist. Hingegen kann man z. B. für ein reines Punktspektrum, das sich von $-\infty$ bis $+\infty$ erstreckt*) nur sagen, dass die L_i im allgemeinen nicht sehr verschieden von gewissen, meist ungefähr den n absolut genommen kleinsten Eigenwerten sind, doch lässt sich die Unzuverlässigkeit dieses Erfahrungsgesetzes leicht an Beispielen zeigen.

3. Erweiterung des Ritzschen Verfahrens.

Wir wollen nun daran gehen, ein neues Variationsverfahren zu besprechen**), das in vielen Fällen die Berechnung oberer und unterer Schranken ermöglicht, selbst dann, wenn der Operator \mathbf{A} nicht einmal halbbeschränkt ist. Dagegen wollen wir vorläufig voraussetzen, dass das Spektrum von \mathbf{A} diskret sei; für den Fall gemischter (d. h. teils diskreter, teils kontinuierlicher) Spektren verweisen wir nochmals auf das 9. Kapitel am Schlusse dieser Arbeit.

Unser Verfahren besteht im wesentlichen darin, das Ritzsche Verfahren auf den Operator

$$\mathbf{B} = (\mathbf{A} - p \mathbf{1})^{-1} \quad (3.1)$$

anzuwenden; dabei ist p eine reelle Zahl, $\mathbf{1}$ der Einheitsoperator (der jede Funktion in sich selbst überführt) und \mathbf{B} die Inverse von $(\mathbf{A} - p \mathbf{1})$, die durch

$$\mathbf{B} (\mathbf{A} - p \mathbf{1}) = \mathbf{B} \mathbf{A} - p \mathbf{B} = \mathbf{1} \quad (3.2)$$

*) Solche Spektren können z. B. bei der Berechnung von Streuphasen auftreten, wenn man die Phase (als Parameter) gibt und die „force constant“ als Eigenwert berechnet; vgl. ROSENFELD⁸), S. 81—82, HULTHEN⁹) und MAEHLY¹⁰).

**) Kurz vor der Korrektur machte mich Herr Dr. hab. N. J. LEHMANN auf seine Dissertation¹⁹) aufmerksam, in welcher dieses Verfahren auf Grund der Integralgleichungstheorie beschrieben ist. Trotzdem scheint mir, wegen der Verschiedenheit der Darstellung wie auch des Leserkreises, die vorliegende Publikation nicht ganz überflüssig geworden zu sein.

definiert ist. Aus (1.1) und (3.2) folgt sofort, dass die Eigenfunktionen von **A** und **B** (bis auf einen evtl. Normierungsfaktor) identisch sind und dass die Eigenwerte λ_i von **A** mit den Eigenwerten μ_i von **B** durch die Gleichungen

$$\mu_i = \frac{1}{\lambda_i - p}; \quad \lambda_i = p + \frac{1}{\mu_i} \quad (3.3)$$

verknüpft sind. Hieraus folgt: *Ist p kein Eigenwert von **A** (und auch nicht ein Häufungspunkt von Eigenwerten), so ist der Operator **B** beschränkt.* Das Ritzsche Verfahren eignet sich daher gut zur genäherten Berechnung der Eigenwerte von **B**: Es liefert innere Schranken für die äussersten Eigenwerte von **B** und damit (durch Rücktransformation in die λ -Skala) „äussere Schranken“ für n aufeinanderfolgende, um den Wert $\lambda = p$ liegende Eigenwerte von **A**. — Diesen Gedankengang wollen wir nun mathematisch formulieren: Wir setzen ψ wieder in der Form

$$\psi = \sum_{l=1}^n y_l \psi_l \quad (3.4)$$

an und bestimmen die stationären Werte von

$$M(\psi) = \frac{(\psi, \mathbf{B} \psi)}{(\psi, \psi)}, \quad (3.5)$$

die nach (2.5) mit den Wurzeln $M = M_1, M_2, \dots, M_n$ der Säkulargleichung

$$\det [(\psi_l, \mathbf{B} \psi_m) - M(\psi_l, \psi_m)] = 0 \quad (3.6)$$

identisch sind. Die entsprechenden Werte in der λ -Skala, die wir l_i nennen wollen:

$$l_i = p + \frac{1}{M_i}, \quad (3.7)$$

können auch direkt aus der Säkulargleichung

$$\det [(\psi_l, \psi_m) - (l - p) (\psi_l, \mathbf{B} \psi_m)] = 0 \quad (3.8)$$

berechnet werden, die aus (3.6) durch Multiplikation jedes Elementes mit $(p-l)$ hervorgeht.

Bevor wir auf die Bedeutung der l_i näher eingehen, bemerken wir, dass sich die Berechnung des Operators **B**, bzw. der Funktionen

$$\varphi_l = \mathbf{B} \psi_l \quad (3.9)$$

leicht umgehen lässt, indem man a priori mit n Koordinatenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ beginnt und aus diesen die ψ_l nach

$$\psi_l = (\mathbf{A} - p \mathbf{1}) \varphi_l = \mathbf{A} \varphi_l - p \varphi_l \quad (3.10)$$

berechnet. Setzt man dies in (3.8) ein, so erhält man wegen der Hermitezität von \mathbf{A} für die Werte $l = l_1, \dots, l_n$ die Säkulargleichung:

$$\det [(\mathbf{A} \varphi_l, \mathbf{A} \varphi_m) - (p + l) (\varphi_l, \mathbf{A} \varphi_m) + pl (\varphi_l, \varphi_m)] = 0 \quad *). \quad (3.11)$$

Die Bedeutung der l_i -Werte und ihre Abhängigkeit vom Parameter p kann man sich am besten an Hand einer Skizze (Fig. 1) klar machen. Trägt man z. B. p nach rechts und l nach oben auf, so wird die Figur symmetrisch in bezug auf die Winkelhalbierende

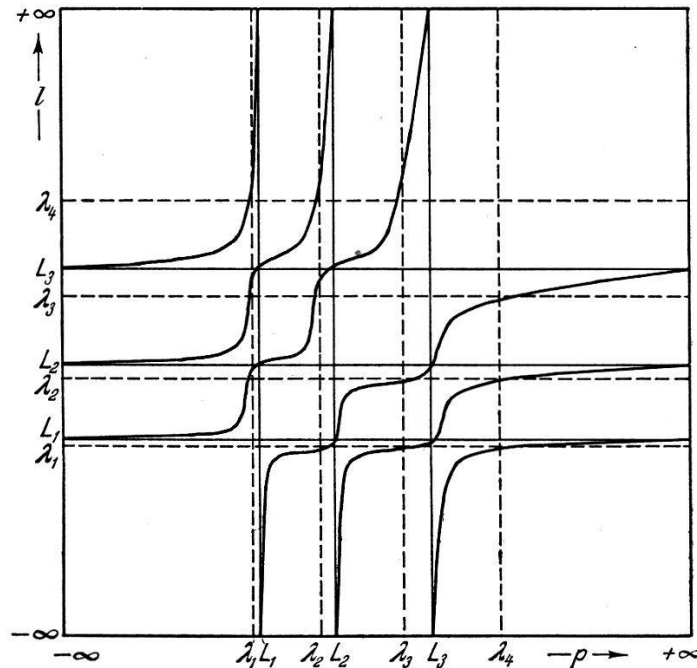


Fig. 1.

Qualitativer Verlauf der Kurven $l_i(p)$ für 3 Koordinatenfunktionen. Um das asymptotische Verhalten der Kurven zu zeigen, sind die Punkte $-\infty$ und $+\infty$ an den Rand der Figur verlegt; es ist also nach rechts eigentlich nicht p , sondern etwa $\arctg p$ oder $Th p$ aufgetragen und analog $\arctg l$ oder $Th l$ nach oben. Ferner sind zur Vereinfachung der Figur nur die ersten 4 Eigenwerte eingezeichnet.

($p = l$), da Gl. (3.11) in p und l symmetrisch ist. Ferner gelten folgende Sätze über den Verlauf der Kurven $l_i(p)$ (die Beweise sind im 8. Kapitel zusammengefasst):

1. Für alle l_i und p ist

$$\frac{dl_i}{dp} \geq 0. \quad (3.12)$$

2. Für $p \rightarrow \infty$ werden die l_i identisch mit den n Wurzeln der Säkulargleichung

$$\det [(\varphi_l, \mathbf{A} \varphi_m) - L (\varphi_l, \varphi_m)] = 0; \quad (3.13)$$

*) Die folgenden Sätze sind nur dann gültig, wenn die Koordinatenfunktionen $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ den in (7.9) angegebenen Bedingungen ($\varphi_l \in \mathcal{D}'$) genügen.

ist p keine Wurzel dieser Gleichung ($p \neq L_i$), so sind alle Wurzeln $l_i(p)$ von (3.11) endlich; andernfalls ist (3.11) nur noch vom $(n-1)$ ten Grade in l (bzw. vom $(n-k)$ ten, wenn p eine k -fache Wurzel von (3.13) ist).

3. Ordnet man die L_i und $l_i(p)$ der Grösse nach und ist

$$L_j < p < L_{j+1}, \tag{3.14}$$

so ist

$$\left. \begin{aligned} l_i &\leq L_i && \text{für } i = 1, 2, \dots, j \\ l_k &\geq L_k && \text{für } k = j+1, \dots, n \end{aligned} \right\} \tag{3.15}$$

4. Bezeichnen wir mit $\lambda_{N+1}, \dots, \lambda_{N+n}$ n aufeinanderfolgende Eigenwerte, welche (mit derselben Zahl j wie in (3.14)) der Ungleichung

$$\lambda_{N+1} \leq \dots \leq \lambda_{N+j} \leq p \leq \lambda_{N+j+1} \leq \dots \leq \lambda_{N+n}, \tag{3.16}$$

gehörchen, so ist

$$\left. \begin{aligned} l_i &\leq \lambda_{N+i} && \text{für } i = 1, 2, \dots, j \\ l_k &\geq \lambda_{N+k} && \text{für } k = j+1, \dots, n \end{aligned} \right\} \tag{3.17}$$

Wie muss man also vorgehen, um obere und untere Schranken für die Eigenwerte zu berechnen? Ist der Operator \mathbf{A} nach unten halbbeschränkt, so wird man, nach der Wahl geeigneter Koordinatenfunktionen $\varphi_1, \dots, \varphi_n$, zuerst aus (3.13) die $L_1 \dots L_n$ berechnen; sie sind nach (2.8) obere Schranken für die n ersten Eigenwerte. Zur Berechnung unterer Schranken für die j ersten Eigenwerte müssen wir für p einen Wert wählen, der zwischen L_j und L_{j+1} liegt: Dann sind die l_1, \dots, l_j untere Schranken für $\lambda_1, \dots, \lambda_j$. Je näher p bei λ_{j+1} liegt, desto grösser und damit genauer werden diese unteren Schranken; ist aber $p > \lambda_{j+1}$, so kann man nur noch behaupten, dass $l_1 < \lambda_2, l_2 < \lambda_3, \dots, l_j < \lambda_{j+1}$. Zur Berechnung unterer Schranken für die ersten j Eigenwerte brauchen wir daher eine möglichst gute untere Schranke für λ_{j+1} . — Bei unbeschränkten Operatoren oder zur Berechnung hoher Eigenwerte mit nur wenigen Koordinatenfunktionen, wo das Ritzsche Verfahren nicht mehr brauchbar ist, kann man das neue Verfahren auch zur Berechnung oberer Schranken anwenden; in diesem Falle braucht man eine obere Schranke für einen „etwas tieferen“ Eigenwert.

Es könnte zunächst erscheinen, als ob die Notwendigkeit, zur Berechnung unterer bzw. oberer Schranken für die interessierenden Eigenwerte zuerst solche für benachbarte (höhere bzw. tiefere) Eigenwerte finden zu müssen, das neue Verfahren völlig wertlos mache. Die Erfahrung zeigt aber, dass bei geschickter Wahl der Koordinatenfunktionen und geeignet gewähltem j der Einfluss von

p auf die gesuchten unteren und oberen Schranken sehr klein ist, so dass es genügt, jene benachbarten Eigenwerte ziemlich roh abzuschätzen, wofür bekanntlich eine ganze Reihe von Methoden zur Verfügung stehen (Störungsrechnung, Differenzenrechnung, WKB-Methode, graphische Verfahren usw.). Selbst dann, wenn diese Hilfwerte nur Näherungswerte für die betreffenden Eigenwerte sind, statt zuverlässige untere, bzw. obere Schranken, liefert das neue Verfahren doch meist bessere Fehlerabschätzungen mit weniger Rechenarbeit als etwa durch die Betrachtung der „Konvergenz“ der Ritzschen Werte bei wachsenden n möglich ist*).

4. Erweiterung des Weinsteinschen Einschliessungssatzes**).

Zum Beweis des Weinsteinschen Satzes wenden wir das im letzten Kapitel beschriebene Verfahren auf eine einzige Koordinatenfunktion φ an. Dann ergibt sich an Stelle von (3.11):

$$(\mathbf{A}\varphi, \mathbf{A}\varphi) - (p + l)(\varphi, \mathbf{A}\varphi) + pl(\varphi, \varphi) = 0, \quad (4.1)$$

oder, unter Verwendung der Abkürzungen:

$$L = \frac{(\varphi, \mathbf{A}\varphi)}{(\varphi, \varphi)}; \quad L' = \frac{(\mathbf{A}\varphi, \mathbf{A}\varphi)}{(\varphi, \mathbf{A}\varphi)}; \quad w^2 = L(L' - L) \quad *** \quad (4.2)$$

nach kurzer Rechnung

$$(l - L)(L - p) = w^2, \quad (4.3)$$

unabhängig von der Wahl des Parameters p . Nun folgt aber aus dem 4. und 5. Satz über das Ritzsche Verfahren, dass L nie ausserhalb aller Eigenwerte liegen kann; es gibt also, von L aus gesehen, einen nächstkleineren und einen nächstgrösseren Eigenwert, die wir mit λ_N bzw. λ_{N+1} bezeichnen. Wählen wir nun in (4.3) $p = \lambda_N$, so ist nach (3.17) $l \geq \lambda_{N+1}$ und somit

$$(\lambda_{N+1} - L)(L - \lambda_N) \leq w^2. \quad (4.4)$$

Hieraus folgt der Weinsteinsche Satz: Für jede positive Zahl α

*) Diese zuletzt erwähnte Methode ist z. B. von HYLLEAAS wiederholt angewandt worden^{7) 11)}, sowie neuerdings von L. HULTHEN und K. V. LAURIKAINEN¹²⁾ für die im 6. Kap. behandelte Differentialgleichung.

***) Vgl. dazu die Originalarbeit von WEINSTEIN¹³⁾; nach COLLATZ⁴⁾, S. 208, stammt die Idee zu diesem Satz allerdings schon von N. KRYLOFF und N. BOGOLUBOV, Bull. Acad. Sci. URSS., Classe phys. math., Leningrad (1929), p. 471.

****) Wir werden im nächsten Kapitel, Gl. (5.15), sehen, dass $L(L' - L)$ nie negativ ist.

muss im abgeschlossenen Intervall zwischen $L - \alpha w$ und $L + \alpha^{-1} w$ mindestens ein Eigenwert liegen. — Zur Verschärfung dieses Satzes führen wir nochmals zwei Abkürzungen ein:

$$d = \frac{1}{2}(\lambda_{N+1} - \lambda_N); \quad x = L - \frac{1}{2}(\lambda_{N+1} + \lambda_N). \quad (4.5)$$

Dann gilt identisch:

$$\lambda_{N+1} - L = d - x; \quad L - \lambda_N = d + x \quad (4.6)$$

und somit wegen (4.4): $x^2 \geq d^2 - w^2$. Aus den beiden letzten Gleichungen folgt nun der neue Satz: *Ist $w < d$, so liegt zwischen $L - (d - \sqrt{d^2 - w^2})$ und $L + (d - \sqrt{d^2 - w^2})$ mindestens ein Eigenwert; dieser Satz gilt, wie man sich leicht überlegt, a fortiori, wenn*

$$\frac{1}{2}(\lambda_{N+1} - \lambda_N) \geq d > w. \quad (4.7)$$

Die Anwendung beider Sätze kommt in erster Linie für die Berechnung höherer Eigenwerte in Frage, die des zweiten vor allem dann, wenn $\lambda_{N+1} - \lambda_N$ aus der asymptotischen Eigenwertverteilung abgeschätzt werden kann. Die dadurch gewonnenen unteren Schranken für höhere Eigenwerte können dann als Ausgangspunkt für das im 3. Kapitel dargestellte Verfahren benutzt werden.

5. Das Iterationsverfahren.

In diesem Kapitel sollen kurz diejenigen Sätze über das Verfahren der fortgesetzten Näherungen zusammengestellt werden, welche als Ergänzung zum 3. und 4. Kapitel von Bedeutung sind*).

Das Iterationsverfahren beruht bekanntlich darauf, dass bei definiten Operatoren jede Funktion ψ , die zur ersten Eigenfunktion *nicht* orthogonal ist, durch wiederholte Anwendung des inversen Operators \mathbf{A}^{-1} immer mehr der ersten Eigenfunktion angenähert wird. Da wir uns hier mehr für die *Eigenwerte* als für die *Eigenfunktionen* interessieren, wollen wir vor allem die „Schwarzschen Konstanten“ α_j :

$$\alpha_j(\psi) = (\psi, \mathbf{A}^{-j} \psi), \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (**) \quad (5.1)$$

*) Eine eingehendere Diskussion dieses Verfahrens findet man z. B. bei COLLATZ (loc. cit.).

***) Über die praktische Berechnung von \mathbf{A}^{-1} lässt sich erst dann etwas aussagen, wenn man über \mathbf{A} Näheres weiss; so ist z. B. bekannt, dass die Berechnung von $\mathbf{A}^{-1}\psi$ auf eine Integralgleichung führt, wenn \mathbf{A} ein Differentialoperator ist.

und die Quotienten

$${}^jL(\psi) = \frac{\alpha_{j-1}(\psi)}{\alpha_j(\psi)} \quad (5.2)$$

untersuchen. Gehört ψ zu den im 7. Kapitel definierten Funktionsräumen \mathfrak{D} bzw. \mathfrak{D}' , so definieren wir sinngemäss α_{-1} und α_{-2} durch

$$\alpha_{-1}(\psi) = (\psi, \mathbf{A}\psi); \quad \alpha_{-2}(\psi) = (\mathbf{A}\psi, \mathbf{A}\psi), \quad (5.3)$$

so dass

$${}^0L(\psi) = L(\psi); \quad {}^{-1}L(\psi) = L'(\psi). \quad (5.4)$$

Aus der Hermitezität von \mathbf{A} ergibt sich für positives j :

$$\alpha_j(\psi) = (\mathbf{A}^{-i}\psi, \mathbf{A}^{-(j-i)}\psi), \quad i = 0, 1, \dots, j, \quad (5.5)$$

unabhängig von i , also insbesondere wegen (1.5):

$$\alpha_{2k}(\psi) = (\mathbf{A}^{-k}\psi, \mathbf{A}^{-k}\psi) > 0, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (5.6)$$

und für alle reellen Werte von x :

$$x^2 \alpha_{2k} - 2x \cdot \alpha_{2k-1} + \alpha_{2k-2} = ((x - \mathbf{A})\mathbf{A}^{-k}\psi, (x - \mathbf{A})\mathbf{A}^{-k}\psi) \geq 0; \quad (5.7)$$

das Gleichheitszeichen kann also höchstens für einen, nie aber für zwei verschiedene x -Werte gelten, woraus die Ungleichung

$$(\alpha_{2k-1}(\psi))^2 \leq \alpha_{2k}(\psi) \alpha_{2k-2}(\psi) \quad (5.8)$$

folgt. — Wir haben noch nachzutragen, dass $\mathbf{A}^{-1}\psi, \mathbf{A}^{-2}\psi, \dots$ und damit $\alpha_1(\psi), \alpha_2(\psi), \dots$ nur dann für alle ψ existieren, wenn $\lambda = 0$ weder ein Eigenwert, noch ein Häufungspunkt von Eigenwerten von \mathbf{A} ist*); wir wollen deshalb für das Folgende annehmen, dass *entweder* \mathbf{A} positiv definit ist: Dann gilt bekanntlich:

$${}^0L(\psi) \geq {}^1L(\psi) \geq {}^2L(\psi) \geq \dots \geq \lambda_1 \quad (5.9)$$

und

$$\lim_{j \rightarrow \infty} {}^jL(\psi) = \lambda_1 \quad \text{falls} \quad (\psi, f_1) \neq 0, \quad (5.10)$$

wobei λ_1 den ersten Eigenwert, f_1 die zugehörige Eigenfunktion bezeichnet; *oder* aber es gebe zwei *aufeinanderfolgende* Eigenwerte λ_0 und λ_1 , für welche

$$\lambda_0 < 0 < \lambda_1: \quad (5.11)$$

*) Im ersten Fall kann man sich von dieser Einschränkung dadurch befreien, dass man alle Vergleichs- bzw. Koordinatenfunktionen ψ zu der zum Eigenwert Null gehörigen Eigenfunktion f_0 orthogonalisiert, d. h. $(\psi, f_0) = 0$ verlangt. Ist $\lambda = 0$ ein mehrfacher Eigenwert, so muss ψ natürlich zu *allen* zugehörigen Eigenfunktionen orthogonal sein. Vgl. Lit. Nr. 6), S. 410/411.

Dann liegen alle Eigenwerte von \mathbf{A}^{-1} zwischen $1/\lambda_0$ und $1/\lambda_1$; nach dem 4. und 5. Satz über das Ritzsche Verfahren ist also

$$\frac{1}{\lambda_0} \leq \frac{1}{2^{k-1}L(\psi)} \leq \frac{1}{\lambda_1}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (5.12)$$

Aus (5.8) und (5.12) ergibt sich nach kurzer Rechnung: Es ist *entweder*:

$$\lambda_0 \geq 2^{k-1}L(\psi) \leq 2^kL(\psi) < 0 \quad (5.13)$$

*oder**):

$$\lambda_1 \leq 2^{k-1}L(\psi) \geq 2^kL(\psi) > 0, \quad (5.14)$$

also stets:

$$2^kL(\psi) (2^{k-1}L(\psi) - 2^kL(\psi)) \geq 0. \quad (5.15)$$

Ferner ergibt sich durch Anwendung von (5.9) auf den Operator \mathbf{A}^2

$$2^{k-1}L(\psi)2^kL(\psi) \geq 2^{k+1}L(\psi)2^{k+2}L(\psi) \geq \text{Min} \{ \lambda_0^2, \lambda_1^2 \}, \quad (5.16)$$

und schliesslich kann man noch beweisen, dass

$$\lim_{j \rightarrow \infty} {}^jL(\psi) = \begin{Bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \end{Bmatrix} \quad \text{je nachdem ob} \quad \lambda_0 + \lambda_1 \begin{Bmatrix} > 0 \\ < 0 \end{Bmatrix}, \quad (5.17)$$

falls ψ nicht zufällig zu den Eigenfunktionen von λ_0 bzw. λ_1 orthogonal ist; in diesem Falle wäre λ_0 bzw. λ_1 durch den nächsttieferen bzw. nächsthöheren Eigenwert λ_i zu ersetzen, für welchen $(\psi, f_i) \neq 0$.

*Will man nicht nur den (absolut) kleinsten, sondern auch die zweit-, dritt-, ... -kleinsten Eigenwerte von \mathbf{A} berechnen, so kann man das Iterationsverfahren mit dem Ritzschen kombinieren**); die Wurzeln ${}^jL = {}^jL_i$ der Determinanten*

$$\det [(\psi_i, \mathbf{A}^{-(j-1)}\psi_m) - {}^jL_i(\psi_i, \mathbf{A}^{-j}\psi_m)] = 0 \quad (5.18)$$

streben nämlich im allgemeinen gegen die n absolut kleinsten Eigenwerte***). Bei positiv-definitem \mathbf{A} gilt ausserdem****):

$$L_i \geq {}^1L_i \geq {}^2L_i \geq \dots \geq \lambda_i \quad i = 1, \dots, n \quad (5.19)$$

*) Die erste Möglichkeit scheint SVARTHOLM¹⁴⁾ in seiner Ungleichung (2.21) übersehen zu haben.

***) Vgl. hierzu die „Variation-Iteration-Method“ von SVARTHOLM¹³⁾, sowie die Diss. des Verf.⁶⁾, S. 421.

****) Ausser wenn eine der zu diesen absolut kleinsten Eigenwerten gehörenden Eigenfunktionen zu *allen* ψ_1, \dots, ψ_n orthogonal ist; dann scheidet der betreffende Eigenwert natürlich aus.

*****) Dies ist nicht etwa mit (5.9) identisch, da die Koeffizienten y_{il} von (2.3) bei der Iteration im allgemeinen geändert werden.

Für die Wurzeln ${}^j l = {}^j l(p)$ der Determinanten

$$\det [(\psi_l, \mathbf{A}^{-(j-2)} \psi_m) - (p + {}^j l) (\psi_l, \mathbf{A}^{-(j-1)} \psi_m) + {}^j l p (\psi_l, \mathbf{A}^{-j} \psi_m)] = 0 \quad (5.20)$$

gelten alle im 3. Kapitel für die l_i abgeleiteten Sätze sicher dann, wenn j gerade ist, bei positiv-definitem \mathbf{A} aber auch für ungerade j . Dagegen ist noch nicht allgemein untersucht worden, unter welchen Bedingungen die so erhaltenen unteren bzw. oberen Schranken durch die Iteration verbessert werden.

6. Anwendungsbeispiel.

Als Beispiel für die Anwendung des im 3. Kapitel beschriebenen Verfahrens behandeln wir die Differentialgleichung:

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} - \kappa^2 \Phi + \lambda \frac{e^{-x}}{x} \Phi = 0 \quad (6.1)$$

im Grundgebiet $x = 0$ bis ∞ und mit der Randbedingung

$$\Phi(0) = 0^{**}), \quad (6.2)$$

wobei κ ein Parameter, λ der gesuchte Eigenwert ist. Dieses Eigenwertproblem hat bekanntlich für die Berechnung der Bindungsenergie des Deuterons eine grosse Rolle gespielt (bis die Entdeckung seines Quadrupolmomentes zu komplizierteren Kraftansätzen führte) und ist daher von verschiedenen Autoren behandelt worden*). Die genauesten Rechnungen sind bisher von HULTHEN ausgeführt worden, der für verschiedene κ -Werte nach dem Ritzschen Verfahren obere Schranken für die drei ersten Eigenwerte berechnet hat¹²⁾. Als Koordinatenfunktionen verwendet HULTHEN die ersten Eigenfunktionen der Differentialgleichung

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \kappa^2 \psi + \lambda' \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \psi = 0, \quad (6.3)$$

welche exakt gelöst werden kann und ein Potential enthält, das mit e^{-x}/x in den wesentlichen Punkten qualitativ übereinstimmt¹⁵⁾. Die Eigenwerte von (6.3) sind

$$\lambda_n' = n(n + 2\kappa), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.4)$$

*) Alle diese Arbeiten sind im letzten Artikel von HULTHEN und LAURIKAINEN¹²⁾ zitiert.

***) Das Verhalten von Φ für $\kappa \rightarrow \infty$ wird durch die Forderung $(\Phi, \Phi) < \infty$ bestimmt; vgl. (6.6) und (7.6).

und die drei ersten Eigenfunktionen lauten, abgesehen von einem willkürlichen Normierungsfaktor:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= e^{-\kappa x}(1 - e^{-x}) \\ \psi_2 &= e^{-\kappa x}(1 - e^{-x}) \left((3 + 2\kappa)(1 - e^{-x}) - 2 \right) \\ \psi_3 &= e^{-\kappa x}(1 - e^{-x}) \left((5 + 2\kappa)(2 + \kappa)(1 - e^{-x})^2 - 6(2 + \kappa)(1 - e^{-x}) + 3 \right) \end{aligned} \right\} \quad (6.5)$$

Für das Eigenwertproblem (6.1)–(6.2) sind das hermitesche Produkt und der Operator **A** durch

$$(\varphi, \psi) = \int_0^\infty \varphi(x) \psi(x) \frac{e^{-x}}{x} dx, \quad (6.6)$$

$$\mathbf{A} = x e^x \cdot \left(\kappa^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \quad (6.7)$$

gegeben, so dass also

$$(\varphi, \mathbf{A} \psi) = \int_0^\infty \varphi \left(\kappa^2 \psi - \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right) dx, \quad (6.8)$$

$$(\mathbf{A} \varphi, \mathbf{A} \psi) = \int_0^\infty \left(\kappa^2 \varphi - \frac{d^2 \varphi}{dx^2} \right) \left(\kappa^2 \psi - \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right) x e^x dx. \quad (6.9)$$

Setzen wir zur Abkürzung:

$$\left. \begin{aligned} M^{(n)}(1 + 2\kappa) &= \int_0^\infty \frac{(1 - e^{-x})^n}{x} e^{-(1+2\kappa)x} dx \\ &= \sum_{k=0}^n (-1)^{k+1} \cdot \binom{n}{k} \cdot \ln(k + 1 + 2\kappa) \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

so erhält man mit den Koordinatenfunktionen (6.5):

$$\left. \begin{aligned} (\psi_1, \psi_1) &= \int_0^\infty \frac{(1 - e^{-x})^2}{x} e^{-(1+2\kappa)x} dx = M^{(2)}(1 + 2\kappa) \\ (\psi_1, \psi_2) &= (3 + 2\kappa) M^{(3)}(1 + 2\kappa) - 2 M^{(2)}(1 + 2\kappa) \\ (\psi_2, \psi_2) &= (3 + 2\kappa)^2 M^{(4)}(1 + 2\kappa) - \\ &\quad - 4(3 + 2\kappa) M^{(3)}(1 + 2\kappa) + 4 M^{(2)}(1 + 2\kappa) \end{aligned} \right\} \quad (6.11)$$

und so fort. Ferner ergibt sich nach einiger Rechnung:

$$(\psi_l, \mathbf{A} \psi_m) = \frac{\delta_{lm} \cdot m^2}{2(m+\kappa)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2(1+\kappa)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{2+\kappa} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{9}{2(3+\kappa)} \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

$$(\mathbf{A} \psi_l, \mathbf{A} \psi_m) = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{1+\kappa} & \frac{3}{(1+\kappa)(3+2\kappa)} \\ \frac{1}{1+\kappa} & 8 & \frac{3 \cdot (11+6\kappa)}{(3+2\kappa)(2+\kappa)} \\ \frac{3}{(1+\kappa)(3+2\kappa)} & \frac{3 \cdot (11+6\kappa)}{(3+2\kappa)(2+\kappa)} & 27 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

Aus diesen Matrizen wurden die Ritzschen Werte L_i und die „Grammelschen Werte“ $L_i'^*$) als Wurzeln der Säkulargleichungen

$$\det [(\psi_l, \mathbf{A} \psi_m) - L(\psi_l, \psi_m)] = 0 \quad (6.14)$$

und

$$\det [(\mathbf{A} \psi_l, \mathbf{A} \psi_m) - L'(\psi_l, \mathbf{A} \psi_m)] = 0 \quad (6.15)$$

für $\kappa = 0, 0,1, \dots, 1$ berechnet (siehe Tabelle 1).

Zur Berechnung *unterer Schranken* für λ_1 und λ_2 nach dem im 3. Kapitel geschilderten Verfahren benötigen wir zuerst eine grobe untere Schranke für den 3. oder 4. Eigenwert. Hiefür verwenden wir die *WKB-Methode***)) in folgender vereinfachter Weise: Wir schreiben zuerst die Differentialgleichungen (6.1) und (6.3) in der Form:

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} + \chi^2 \Phi = 0; \quad \chi = \sqrt{\lambda \frac{e^{-x}}{x} - \kappa^2}, \quad (6.16)$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \chi'^2 \psi = 0; \quad \chi' = \sqrt{\lambda' \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}} - \kappa^2}. \quad (6.17)$$

Integriert man χ' von 0 bis zu demjenigen Wert x_1' , bei welchem $\chi' = 0$ wird, so ergibt sich nach einiger Rechnung:

$$\int_0^{x_1'} \chi' dx = \int_0^{x_1'} \sqrt{n(n+2\kappa) \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}} - \kappa^2} dx = n\pi. \quad (6.18)$$

*) Gl. (6.15) entspricht der Gl. (5.18) mit $j = -1$; analog zu (5.19) muss $L_i' - L_i \geq 0$ sein und die Grösse dieser Differenz gibt einen Anhaltspunkt für den „Fehler“ $L_i - \lambda_i$; vgl. hierzu auch die Diss. des Verf.⁶⁾.

***) Eine ausführliche Darstellung dieser Methode findet sich bei KEMBLE¹⁶⁾, eine kürzere z. B. bei SCHIFF¹⁷⁾.

Wegen der Ähnlichkeit der Potentiale in (6.16) und (6.17) ist zu erwarten, dass die Werte Λ_n , für welche

$$\int_0^{x_1} \chi dx = \int_0^{x_1} \sqrt{\Lambda_n \frac{e^{-x}}{x} - \kappa^2} dx = n\pi, \quad (6.19)$$

$$\chi(x) > 0 \text{ nur für } 0 < x < x_1$$

Tabelle 1.

Näherungswerte für die Eigenwerte der Differentialgleichung (6.1).

$\kappa = 0,0$	κ	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4
$L_3 = 16,6292$	L'_3	19,8616	20,3572	20,8663	21,3862	21,9150
${}^1L_3 = 15,4559$	L_3	16,6292	17,3819	18,1056	18,8081	19,4946
$\Lambda_3 = 14,137$	Λ_3	14,137	14,95	15,71	16,45	17,17
$L_2 = 6,44851$	L'_2	6,45664	6,93767	7,40885	7,87200	8,32851
${}^1L_2 = 6,44758$	L_2	6,44851	6,93156	7,40335	7,86647	8,32267
${}^1l_2 = 6,44700$	l_2	6,44169	6,92648	7,39916	7,86270	8,31907
${}^1L_2 - {}^1l_2 = ,00058$	$L_2 - l_2$,00682	,00508	,00419	,00377	,00360
$\Lambda_2 = 6,283$	Λ_2	6,283	6,81	7,31	7,79	8,25
$L_1 = 1,679853$	L'_1	1,681753	1,905142	2,124869	2,341791	2,556509
${}^1L_1 = 1,679810$	L_1	1,679853	1,904002	2,124151	2,341321	2,556191
${}^1l_1 = 1,679806$	l_1	1,679697	1,903901	2,124083	2,341274	2,556158
${}^1L_1 - {}^1l_1 = ,000004$	$L_1 - l_1$,000156	,000101	,000068	,000047	,000033
$\Lambda_1 = 1,571$	Λ_1	1,571	1,82	2,06	2,29	2,51

κ	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
L'_3	22,4511	22,9933	23,5408	24,0928	24,6487	25,2080
L_3	20,1686	20,8327	21,4887	22,1381	22,7820	23,4212
Λ_3	17,87	18,57	19,26	19,94	20,60	21,25
L'_2	8,77945	9,22569	9,66790	10,10663	10,54233	10,97538
L_2	8,77322	9,21907	9,66093	10,09937	10,54386	10,96775
l_2	8,76965	9,21545	9,65724	10,09559	10,53997	10,96377
$L_2 - l_1$,00357	,00362	,00369	,00378	,00389	,00398
Λ_2	8,71	9,16	9,61	10,05	10,49	10,93
L'_1	2,769459	2,980961	3,191261	3,400551	3,608982	3,816674
L_1	2,769237	2,980802	3,191146	3,400466	3,608917	3,816624
l_1	2,769212	2,980784	3,191132	3,400455	3,608909	3,816617
$L_1 - l_1$,000025	,000018	,000014	,000011	,000008	,000007
Λ_1	2,73	2,95	3,16	3,37	3,58	3,79

gute Näherungen für die Eigenwerte λ_n von (6.16) sind. Dies wird durch Tab. 1 bestätigt; die Abweichung von den Ritzschen Werten ist aber doch so gross (verglichen mit $L_n' - L_n$), dass wir mit Sicherheit behaupten können: Für $n = 1, 2$ und $0 \leq \kappa \leq 1$ ist

$$A_n < \lambda_n \quad (6.20)$$

Es ist daher sehr wahrscheinlich, dass diese Ungleichung auch für $n = 3$ gilt: Dann sind nach (3.15)–(3.18) die beiden kleinsten Wurzeln (l_1 und l_2) von

$$\det [(\mathbf{A} \psi_l, \mathbf{A} \psi_m) - (A_3 + l) (\psi_l, \mathbf{A} \psi_m) + A_3 l (\psi_l, \psi_m)] = 0 \quad (6.21)$$

untere Schranken für λ_1 und λ_2 .

Aus Tabelle 1 ist ersichtlich, dass die Differenz zwischen den oberen und unteren Schranken am grössten wird, wenn $\kappa = 0$ ist. Gerade in diesem Falle ist es aber leicht möglich, beide Schranken durch *Iteration* zu verbessern. Da nämlich nach (6.7) für $\kappa = 0$ einfach

$$\mathbf{A}_0 = -x e^x \cdot \frac{d^2}{dx^2} \quad (6.22)$$

ist, folgt nach bekannten Sätzen über Integralgleichungen:

$$\mathbf{A}_0^{-1} \psi(x) = \int_0^\infty G(x, x') \frac{e^{-x'}}{x'} \psi(x') dx' \quad (6.23)$$

mit

$$G(x, x') = \begin{cases} x, & \text{wenn } x < x' \\ x', & \text{wenn } x > x' \end{cases} \quad (6.24)$$

$(\varphi, \mathbf{A}_0^{-1} \psi)$ lässt sich in der symmetrischen Form:

$$(\varphi, \mathbf{A}_0^{-1} \psi) = \int_0^\infty \int_0^\infty G(x, x') \frac{e^{-(x+x')}}{x \cdot x'} \varphi(x) \psi(x') dx dx' \quad (6.25)$$

schreiben; dies ist hier wichtig, weil für unsere Koordinatenfunktionen (6.5) das Integral (6.23) nicht geschlossen ausgewertet werden kann, wohl aber das Doppelintegral in (6.25). Es ist nämlich — unter Benutzung der Abkürzung $M^{(n)}$ aus (6.10) —

$$\int_0^\infty \frac{(1-e^{-x})^j}{x} e^{-x} \left[\int_0^x (1-e^{-x'})^k e^{-x'} dx' \right] dx = \frac{M^{k+j+1}(1)}{k+1} \quad (6.26)$$

und folglich wegen der Symmetrie des Integrals (6.25):

$$((1-e^{-x})^j, \mathbf{A}_0^{-1}(1-e^{-x})^k) = \left(\frac{1}{j+1} + \frac{1}{k+1} \right) M^{k+j+1}(1), \quad (6.27)$$

womit die $(\psi_l, \mathbf{A}_0 \psi_m)$ leicht berechnet werden können. Ersetzen wir nun in den Säkulargleichungen (6.14), (6.15) und (6.21) (ψ_l, ψ_m) , $(\psi_l, \mathbf{A} \psi_m)$ und $(\mathbf{A} \psi_l, \mathbf{A} \psi_m)$ durch $(\psi_l, \mathbf{A}_0^{-1} \psi_m)$, (ψ_l, ψ_m) und $(\psi_l, \mathbf{A}_0 \psi_m)$, so erhalten wir an Stelle von L_i', L_i und l_i , die um einen „halben Iterationsschritt“ verbesserten Werte $L_i, {}^1L_i$ und 1l_i , welche in der ersten Kolonne von Tabelle 1 eingetragen sind. Man sieht daraus, dass der Abstand der Fehlerschranken durch diese Iteration für den zweiten Eigenwert auf etwa ein Zehntel, für den ersten sogar auf ein Vierzigstel des alten Wertes heruntergedrückt werden konnte.

7. Zulassungsbedingungen für die Koordinatenfunktionen.

R. COURANT¹⁸⁾ hat für elliptische Differentialgleichungen untersucht, welche Funktionen zum Variationsproblem (7.1) zugelassen werden dürfen, wenn dieses mit dem Eigenwertproblem (1.1) äquivalent sein soll. Leider sind diese mathematisch exakten Kriterien für die praktische Rechnung wenig geeignet; wir wollen deshalb versuchen, allgemein gültige und leicht kontrollierbare Bedingungen für die Äquivalenz von (1.1) und (7.1) zu finden.

Den linearen Raum der zum Variationsproblem

$$\delta L(\psi) = 0 \tag{7.1}$$

zugelassenen Funktionen ψ wollen wir, in Anlehnung an COURANT-HILBERT¹⁸⁾, mit \mathfrak{D} bezeichnen und für „ ψ gehört zu \mathfrak{D} “ kurz $\psi \in \mathfrak{D}$ schreiben. — (7.1) bedeutet: Ist $\psi = f_i$ eine Lösung dieses Variationsproblems, so muss in erster Näherung gelten:

$$\delta L(\psi) = L(f_i + \delta \psi) - L(f_i) = 0, \quad \text{wenn } \delta \psi \in \mathfrak{D}, \tag{7.2}$$

oder, was offenbar dasselbe bedeutet:

$$\frac{d}{d\varepsilon} L(f_i + \varepsilon \varphi) = 0 \quad \text{für } \varepsilon = 0, \quad \text{wenn } \varphi \in \mathfrak{D}. \tag{7.3}$$

Nach der Definition von $L(\psi)$ führt dies auf die Gleichung:

$$(\varphi, \mathbf{A} f_i) + (f_i, \mathbf{A} \varphi) - L(f_i) \{(\varphi, f_i) + (f_i, \varphi)\} = 0. \tag{7.4}$$

Andrerseits folgt aus der Eigenwertgleichung (1.1) für jede Funktion φ , für welche das hermitesche Produkt definiert ist*):

$$(\varphi, \mathbf{A} f_i) + (\mathbf{A} f_i, \varphi) - \lambda_i \{(\varphi, f_i) + (f_i, \varphi)\} = 0, \tag{7.5}$$

*) Also für jedes $\varphi \in \mathfrak{H}$, wenn \mathfrak{H} den zugehörigen Hilbertschen Raum bezeichnet; vgl. NEUMANN¹⁾, S. 21.

Die beiden letzten Gleichungen, und damit das Variationsproblem (7.1) und das Eigenwertproblem (1.1) sind offenbar dann äquivalent, wenn wir den Funktionsraum \mathfrak{D} wie folgt definieren:

$$\varphi \in \mathfrak{D}, \text{ wenn } \left\{ \begin{array}{l} (\varphi, \varphi) < \infty, (\varphi, \mathbf{A} \varphi) < \infty^* \\ \text{und } (f_i, \mathbf{A} \varphi) = (\mathbf{A} f_i, \varphi) \end{array} \right\}. \quad (7.6)$$

Da das Ritzsche Verfahren auf dem Variationsprinzip (7.1) beruht, müssen, damit die Sätze des 2. Kapitels gültig sind, die Koordinatenfunktionen ψ_i in (2.1) diesen Bedingungen ($\psi_i \in \mathfrak{D}$) genügen. Die letzte Bedingung in (7.6) scheint zunächst unbrauchbar zu sein, da wir ja die Eigenfunktionen f_i noch nicht kennen; in den meisten Fällen ist es aber leicht, das qualitative Verhalten der Eigenfunktionen in allen wichtigen Punkten (am Rande, im Unendlichen, in singulären Punkten usw.) so weit zu bestimmen, dass die Gültigkeit von (7.6) (d. h. bei Differentialoperatoren: Das Verschwinden der Randterme bei der partiellen Integration) nachgeprüft werden kann.

Oft ist es möglich, $(\varphi, \mathbf{A} \varphi)$ durch partielle Integration in eine symmetrische Gestalt zu bringen**, die wir mit $(\varphi \mathbf{A} \varphi)$ — ohne Komma — bezeichnen wollen. Dann genügen für die Äquivalenz des Variationsproblems

$$\delta \frac{(\varphi \mathbf{A} \varphi)}{(\varphi, \varphi)} = 0 \quad (7.7)$$

mit (1.1) die etwas schwächeren Bedingungen:

$$\varphi \in \mathfrak{D}_s, \text{ d. h. } \left\{ \begin{array}{l} (\varphi, \varphi) < \infty, (\varphi \mathbf{A} \varphi) < \infty \\ \text{und } (f_i \mathbf{A} \varphi) = (\mathbf{A} f_i, \varphi) \end{array} \right\}. \quad (7.8)$$

*) Dies soll bedeuten: (φ, φ) und $(\varphi, \mathbf{A} \varphi)$ — oft sind dies uneigentliche Integrale — existieren, d. h. divergieren nicht.

**) Beispiele: 1. Für $\mathbf{A} = -d^2/dx^2$, also $\mathbf{A} \varphi = -\varphi''$, ergibt sich

$$(\varphi, \mathbf{A} \varphi) = - \int_a^b \varphi \varphi'' dx = \int_a^b (\varphi')^2 dx = (\varphi \mathbf{A} \varphi),$$

wenn am Rande ($x = a, x = b$)

$$\varphi = 0 \text{ oder } \varphi' = 0.$$

2. Für den Operator

$$\mathbf{A} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \right)$$

ergibt sich aus dem Greenschen Satz (falls die Randterme verschwinden):

$$(\varphi \mathbf{A} \varphi) = \iiint \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\text{grad } \varphi|^2 + V(x, y, z) \cdot \varphi^2 \right) dx dy dz.$$

Für weitere Beispiele vgl. COURANT-HILBERT II¹⁸), Kap. VII, sowie die Diss. des Verf.⁶).

Auch für das Ritzsche Verfahren genügen dann die Bedingungen $\varphi_l \in \mathfrak{D}_s$, wenn wir überall $(\varphi_l, \mathbf{A} \varphi_m)$ durch $(\varphi_l \mathbf{A} \varphi_m)$ ersetzen.

Analog kann man zeigen, dass für die Anwendung des erweiterten Ritzschen Verfahrens in der Form (3.11) und für den Weinstein'schen Einschliessungssatz, also überall da, wo der Ausdruck $(\mathbf{A} \varphi, \mathbf{A} \varphi)$ auftritt, die Bedingungen:

$$\varphi \in \mathfrak{D}' \text{ d. h. } \varphi \in \mathfrak{D} \text{ und } (\mathbf{A} \varphi, \mathbf{A} \varphi) < \infty \tag{7.9}$$

erfüllt sein müssen.

8. Beweise zum erweiterten Ritzschen Verfahren.

In diesem Kapitel wollen wir zeigen, wie die vier Sätze des 3. Kapitels (Gl. (3.12)–(3.17)) bewiesen werden können, doch werden wir die Beweise nicht bis in alle Einzelheiten durchführen. — Es ist für das Folgende vorteilhaft, die Hilfsfunktion

$$l(p, \varphi) = \frac{(\mathbf{A} \varphi, \mathbf{A} \varphi) - p(\varphi, \mathbf{A} \varphi)}{(\varphi, \mathbf{A} \varphi) - p(\varphi, \varphi)} \tag{8.1}$$

einzuführen, welche für alle $\varphi \in \mathfrak{D}'$ definiert ist. Man überlegt sich leicht, dass $l(p, \varphi)$ für jede Eigenfunktion stationär und gleich dem zugehörigen Eigenwert wird. Beschränken wir uns aber auf einen durch den Ansatz

$$\varphi = \sum_{l=1}^n z_l \varphi_l, \quad \varphi_l \in \mathfrak{D}' \tag{8.2}$$

aufgespannten (n -dimensionalen) Funktionenraum \mathfrak{D}_n' , so wird $l(p, \varphi)$ in \mathfrak{D}_n' genau dann stationär, wenn

$$\frac{\partial l(p, \varphi)}{\partial z_m} = \frac{\partial l(p, z, \dots, z_n)}{\partial z_m} = 0 \quad \text{für } m = 1, \dots, n, \tag{8.3}$$

oder, wie sich nach kurzer Rechnung ergibt*):

$$\sum_{l=1}^n \{(\mathbf{A} \varphi_l, \mathbf{A} \varphi_m) - (p + l)(\varphi_l, \mathbf{A} \varphi_m) + p l(\varphi_l, \varphi_m)\} z_l = 0. \tag{8.4}$$

Dieses Gleichungssystem für die z_l ist genau dann lösbar, wenn die Determinante der Koeffizienten verschwindet: Die stationären Werte von $l(p, \varphi)$ in \mathfrak{D}_n' sind also identisch mit den Wurzeln $l_i(p)$ von (3.11). Für jeden dieser Werte gibt es eine Lösung $z_{i1}(p), \dots,$

*) Vgl. Lit. Nr. 6, Gl. (62)–(65).

$z_{in}(p)$, (die wir als „Lösungsvektor“ in \mathfrak{D}_n' ansehen können) und eine zugehörige „Lösungsfunktion“ $h_i(p)$:

$$h_i(p) = \sum_{l=1}^n z_{il}(p) \varphi_l, \quad i = 1, \dots, n, \quad (8.5)$$

welche für $p \rightarrow \infty$ in eine der Ritzschen Lösungsfunktionen übergeht. — Aus Gl. (8.3) ergibt sich nun, dass

$$\frac{dl_i}{dp} = \frac{\partial l(p, h_i)}{\partial p} + \sum_{m=1}^n \frac{\partial l(p, h_i)}{\partial z_m} \frac{dz_m}{dp} = \frac{\partial l(p, h_i)}{\partial p}; \quad (8.6)$$

weiter aus der Definition von $l(p, \varphi)$ und der Ungleichung (5.8):

$$\frac{\partial l(p, \varphi)}{\partial p} = \frac{(\varphi, \varphi) \cdot (\mathbf{A}\varphi, \mathbf{A}\varphi) - (\varphi, \mathbf{A}\varphi)^2}{\{(\varphi, \mathbf{A}\varphi) - p(\varphi, \varphi)\}^2} \geq 0 \quad (8.7)$$

für jedes $\varphi \in \mathfrak{D}'$, also insbesondere für jedes h_i , womit der erste Satz bewiesen ist.

Der erste Teil des zweiten Satzes ergibt sich sofort aus (3.11), wenn wir jedes Element der Determinante durch p dividieren und $1/p$ gegen Null streben lassen; der zweite Teil folgt, wie man am besten aus Fig. 1 abliest, aus der Symmetrie dieser Figur bezüglich Vertauschung von p und l .

Den dritten Satz beweisen wir zuerst für $p = 0$ (wir werden weiter unten sehen, dass dies genügt): Dann ist einfach

$$l(\varphi) = l(0, \varphi) = \frac{(\mathbf{A}\varphi, \mathbf{A}\varphi)}{(\varphi, \mathbf{A}\varphi)}, \quad (8.8)$$

und die h_i können, da $(\mathbf{A}h_i, \mathbf{A}h_i)$ stets positiv ist, durch

$$(\mathbf{A}h_i, \mathbf{A}h_j) = \delta_{ij}, \quad (h_i, \mathbf{A}h_j) = \frac{1}{l_i} \delta_{ij} \quad (8.9)$$

normiert werden, was sich am schnellsten durch Anwendung des Ritzschen Verfahrens — insbesondere von Gl. (2.7) — auf den Operator \mathbf{A}^{-1} und mit den Koordinatenfunktionen $\mathbf{A}\varphi_l$ ergibt. Die h_i wie auch die „gewöhnlichen“ Ritzschen Lösungsfunktionen g_i von (2.3) bilden je ein vollständiges Funktionensystem in \mathfrak{D}_n' ; man kann also jede Funktion $\psi \in \mathfrak{D}_n'$ als Linearkombination der g_i oder der h_i darstellen:

$$\psi = \sum_{m=1}^n x_m g_m = \sum_{m=1}^n \kappa_m h_m. \quad (8.10)$$

Für unseren Beweis brauchen wir nun insbesondere ein solches ψ , für welches

$$x_1 = x_2 = \dots = x_{j-1} = 0; \quad \kappa_{j+1} = \dots = \kappa_n = 0. \quad (8.11)$$

Das sind $(n-1)$ homogene Gleichungen für n unabhängige Unbekannte; es gibt also sicher für jedes j eine solche Funktion, und

da wir sowohl die L_i wie auch die l_i der Grösse nach geordnet haben, ist

$$l(\psi) = \sum_{m=i}^n x_m^2 \left(\sum_{m=i}^n \frac{1}{l_m} x_m^2 \right)^{-1} \geq l_i, \tag{8.12}$$

$$L(\psi) = \sum_{m=1}^i l_m x_m^2 \left(\sum_{m=1}^i x_m^2 \right)^{-1} \leq L_i. \tag{8.13}$$

Ist nun $L_i < 0$, so folgt aus (8.13), (8.8) und (5.15):

$$l(\psi) \leq L(\psi), \tag{8.14}$$

und aus den letzten drei Ungleichungen $l_i \leq L_i$, womit die erste Zeile von (3.15) für $p = 0$ bewiesen ist; ganz analog verläuft der Beweis für die zweite Zeile. Ist aber $p = 0$, so kann das Problem durch die Transformation

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - p \cdot \mathbf{1}, \quad \bar{L}_i = L_i - p, \quad \bar{l}_i = l_i - p \tag{8.15}$$

auf den Spezialfall $p = 0$ zurückgeführt werden.

Der vierte Satz endlich ergibt sich durch Anwendung des Ritzschen Verfahrens, insbesondere Gl. (2.8)–(2.11), auf den zu Beginn des 3. Kapitels definierten Operator \mathbf{B} mit den Eigenwerten μ_i und Rücktransformation in die λ -Skala gemäss Gl. (3.3). Auf die Wiedergabe dieser elementaren, aber etwas umständlichen Rechnungen soll hier verzichtet werden, da man sich den Sachverhalt leichter an Hand einer Skizze (als rechnerisch) klarmachen kann.

9. Zwei Ergänzungen.

1. Alle oben beschriebenen Methoden lassen sich fast unverändert auch dann anwenden, wenn neben den diskreten Eigenwerten ein Kontinuum auftritt, indem man nämlich dieses Streckenspektrum als Limes eines sehr dichten Linienpektrums auffasst*). Besteht z. B. das Gesamtspektrum eines Operators \mathbf{A} aus zwei diskreten Eigenwerten λ_1, λ_2 und einem Kontinuum mit der Untergrenze $\lambda' > \lambda_2$, so gelten für die Ritzschen Werte die Ungleichungen:

$$\lambda_1 \leq L_1, \quad \lambda_2 \leq L_2, \quad \lambda' < L_3 \leq \dots \leq L_n. \tag{9.1}$$

Kennt man $\lambda'^{**})$ und ist $L_2 < \lambda'$, so wird man für das erweiterte Ritzsche Verfahren mit Vorteil $p = \lambda'$ wählen; dann ist nämlich

$$l_1 \leq \lambda_1, \quad l_2 \leq \lambda_2, \quad \lambda' < l_3 \leq \dots \leq l_n, \tag{9.2}$$

*) Dies ergibt sich aus einer unpublizierten Untersuchung des Verf. mit Hilfe des hierfür besonders geeigneten Neumannschen Formalismus¹⁾.

***) Z. B. bei der Berechnung von Bindungsenergien, wo $\lambda' = 0$ ist.

wodurch die beiden diskreten Eigenwerte in Schranken eingeschlossen sind.

2. Oft ist es mit Hilfe gruppentheoretischer Methoden möglich, die gesamte Menge der Eigenfunktionen in Teilmengen einzuteilen, die sich durch ihre Symmetrieeigenschaften unterscheiden; dann wird man natürlich auch den Raum \mathfrak{D} bzw. \mathfrak{D}' der zulässigen Koordinatenfunktionen in die entsprechenden invarianten Teilräume aufspalten, d. h. von den Koordinatenfunktionen jeweils dieselben Symmetrieeigenschaften fordern, welche der gesuchten Eigenfunktion zukommen.

Diese Arbeit ist in der Hauptsache bei der Vorbereitung und Durchführung numerischer Berechnungen von Bindungsenergien und Streuphasen entstanden, welche leider wegen der augenblicklichen Unsicherheit in den Kraftansätzen eingestellt werden mussten. Der Anwendungsbereich der hier geschilderten Methoden geht aber sicher weit über diese speziellen Anwendungen hinaus.

Herrn Prof. Dr. PAUL SCHERRER möchte ich für die Unterstützung und Förderung dieser Arbeit herzlich danken. Ausserdem bin ich Herrn ALFRED AEPPLI, dipl. math. ETH., für die kritische Durchsicht des ersten Entwurfes zu Dank verpflichtet.

Literatur.

- 1) J. v. NEUMANN, Math. Grundlagen der Quantenmechanik, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Bd. 38.
- 2) W. RITZ, J. f. reine und angew. Math. **135**, 1—61 (1909); Annalen d. Physik (4), **28**, 737—786 (1909) oder: Gesammelte Werke (S. 192—316), Paris 1911.
- 3) L. COLLATZ, Zeitschr. f. angew. Math. u. Mech. **19**, 224 (1939).
- 4) L. COLLATZ, Eigenwertprobl. u. ihre num. Behandlung, Leipzig 1945.
- 5) L. COLLATZ, Eigenwertaufgaben mit techn. Anwendungen, Leipzig 1949.
- 6) H. J. MAEHLY, Erg. der ex. Naturw. **24**, 402 (1951).
- 7) E. A. HYLLEAAS, Zeitschr. f. Physik **48**, 469 (1928).
- 8) L. ROSENFELD, Nuclear Forces, Amsterdam 1948.
- 9) L. HULTHEN, C. R., 10e Congrès des Math. Scand., 201 (1946).
- 10) H. J. MAEHLY, Nuovo Cimento **8**, 466 (1951).
- 11) E. A. HYLLEAAS, Zeitschr. f. Physik **65**, 209 (1930).
- 12) L. HULTHEN und K. V. LAURIKAINEN, Rev. of Mod. Physics **23**, 1 (1951).
- 13) D. H. WEINSTEIN, Proc. Nat. Acad. Sci. of USA. **20**, 529 (1934).
- 14) N. SVARTHOLM, Dissertation Lund 1945.
- 15) L. HULTHEN, Arkiv f. mat. astr. och fysik **28** A, No. 5 (1942).
- 16) E. C. KEMBLE, The Fundamental Principles of Quantum Mechanics, McGraw-Hill 1937.
- 17) L. I. SCHIFF, Quantum Mechanics, McGraw-Hill 1949.
- 18) R. COURANT und D. HILBERT, Methoden der mathematischen Physik, Bd. II; Grndl. der math. Wissensch., Bd. 48.
- 19) N. J. LEHMANN, Diss. T. H. Dresden 1948, publ. in Z. angew. Math. u. Mech. **29**, 341 (1949) und **30**, 1 (1950).