

Recensio

Perturbation Theory and Its Applications in Quantum Mechanics, herausgegeben von CALVIN H. WILCOX, 428 Seiten, New York-London-Sidney: John Wiley and Sons 1966. Preis: 53 s.

Eingegangen am 5. Dezember 1966

Das Außergewöhnliche an diesem Buch ist die Tatsache, daß es den erfreulichen Versuch eines Gedankenaustauschs zwischen Mathematikern und Chemikern darstellt. Es enthält 14 Vorträge eines Seminars, das gemeinsam vom Mathematic Research Center, United States Army und Theoretical Chemistry Institute an der Universität von Wisconsin in Madison vom 4. bis 6. Oktober 1965 veranstaltet wurde. Das Seminar sollte einen Überblick über die Basis der Störungsrechnung von hermiteschen Operatoren im Hilbertraum sowie einige neue Entwicklungen der Theorie und ihre Anwendung auf Probleme der Theoretischen Chemie geben. Dieser weit gespannte Rahmen erweist sich bei näherem Hinschauen als fast zu weit. Zwar versucht J. O. HIRSCHFELDER in seinem einführenden Artikel noch das Gebiet zu umreißen und zu fixieren, doch seine Intention scheidet an der individuellen Art, mit der jeder Autor sein Kapitel schreibt. Demgemäß ist nicht nur das Thema, sondern auch die Schwierigkeit und Qualität der Artikel unterschiedlich. Zusammengehalten wird das Buch durch die Absicht, eine mathematisch einwandfreie Basis darzubieten. Bezeichnend hierfür ist, daß J. O. HIRSCHFELDER ziemlich an den Anfang seines Kapitels zwei Sätze von F. Rellich und T. Kato über die Konvergenz von Störungsentwicklungen setzt. Auch die anderen Autoren zitieren grundlegende ältere Arbeiten, von denen noch die von K. O. Friedrichs über Störungen diskreter Spektren hervorzuheben sind.

Eine Inhaltsangabe des Dargebotenen ist schwierig, weil der Inhalt der verschiedenen Kapitel zu heterogen ist und im Rahmen wesentlich über den Artikel von J. O. HIRSCHFELDER, S. T. EPSTEIN und W. BYERS BROWN in „Advances in Quantum Chemistry“ hinausgeht.

Mit dem mathematischen Fundament der Störungsentwicklung befassen sich vier Kapitel. K. O. FRIEDRICHS diskutiert in einem Übersichtsartikel den qualitativen Einfluß von Störungen auf kontinuierliche und diskrete Spektren. Die Bedeutung von Stetigkeit und Beschränktheit von Operatoren wird untersucht. Mit weichen („gentle“) und teilweise weichen Störungen beschäftigt sich P. A. REJTO. Er gibt Bedingungen dafür an, daß zwei Operatoren unitär äquivalent sind, wenn die Störung klein ist. Anwendungen werden am Beispiel von Störungen des Laplace-Operators verifiziert. Zwei Kapitel sind dem Thema „spektrale Verdichtung“ gewidmet, d. h. dem Phänomen, daß durch Störung eines Spektrums diskreter Eigenwerte aus jedem Eigenwert ein Kontinuum hervorgeht. J. B. McLEOD diskutiert den Fall der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung und geht im Zusammenhang damit auf die Bedeutung der Methode der Greenschen Funktion ein. C. C. CONLEY und P. A. REJTO präzisieren diese Überlegungen zu einer allgemeinen Theorie. Hier wird auch endlich einmal der Stark-Effekt beim Wasserstoffatom präzise behandelt, dessen fehlerhafte Darstellung aus der Lehrbuchliteratur hoffentlich bald verschwinden wird. Schwierig zu verstehen ist hier eigentlich nur das Kapitel von P. A. REJTO, was wohl nicht nur an der Materie liegt. Das Verständnis wird durch zu viele spezielle Voraussetzungen erschwert. Warum die δ -Funktion nicht explizit eingeführt wird, ist nicht ganz klar.

Die zweite Gruppe bilden einige Arbeiten über die Anwendung der Theorie. S. T. EPSTEIN beschäftigt sich mit der Frage nach dem besten H_0 , wenn kein natürlicher Entwicklungsparameter gegeben ist. C. W. SCHERR, F. C. SANDERS und R. E. KNIGHT wenden die Störungsrechnung auf 2-, 3- und 4-Elektronensysteme an. Im Rahmen der Z^{-1} -Entwicklung werden die 2-Elektronensysteme ausführlich diskutiert. Sorgfältig wird auf das Konvergenzproblem eingegangen und Rechnungen angeführt. Eines der interessantesten Kapitel ist die Anwendung

der zeitabhängigen Störungstheorie auf stationäre Probleme durch A. DALGARNO, wie z. B. die Berechnung von Refraktionsindex, Spektren, darunter Mehrfachanregung, und Dispersionskräften zeigt. Das Kapitel schließt mit einer Diskussion der zeitabhängigen Hartree-Fock-Gleichungen, deren wachsende Bedeutung durch Rechnungen aus den letzten Jahren veranschaulicht wird. Das Interesse wird auch durch einige Flüchtigkeitsfehler in den Formeln nicht gemindert. H. P. KELLY gibt eine Anwendung der Vielteilchen-Theorie von K. A. BRUECKNER und J. GOLDSTONE. Die Hartree-Fock-Näherung für angeregte MO's wird einer kritischen Durchsicht unterzogen. In einem Übersichtsartikel über obere und untere Schranken erläutert P. O. LÖWDIN die von ihm zu einem eleganten Formalismus entwickelte Methode des „partitioning“. Diese Kapitel dürften für den Chemiker die interessantesten sein und stellen die geringsten mathematischen Anforderungen.

Eine dritte Gruppe von Artikeln geht weit über das hinaus, was man zur Zeit in der Theoretischen Chemie zum Verständnis experimenteller Daten braucht. In einem Kapitel über stationäre Methoden in der Streutheorie sucht S. T. KURODA eine Verbindung zwischen Spektraleigenschaften von Operatoren und Streuproblemen herzustellen, während sich P. D. LAX und P. S. PHILLIPS mit den analytischen Eigenschaften der Streumatrix beschäftigen. Ein ausführlicher Artikel ist kanonisch konjugierten Modellen in der Streutheorie gewidmet. L. DE BRANGES und J. ROVNIK leiten eine große Zahl von Theoremen aus der Transformationstheorie ab, die im wesentlichen Existenzsätze über Paare von Transformationen mit der Frage nach invarianten Unterräumen darstellen. Im letzten Kapitel entwickelt F. H. BROWNELL eine verbesserte Theorie zur Erklärung des Lamb-Shift. (Störend wirkt, daß der Ausdruck „pseudo“ im ganzen Kapitel falsch geschrieben ist.)

Insgesamt gesehen ist das Buch nicht leicht zu lesen und setzt zum Teil erhebliche mathematische Kenntnisse voraus. Als Einführung für den Anfänger in den Problembereich Störungstheorie ist es auf keinen Fall gedacht. Jeder Spezialist wird hier aber Anregung und eine Fülle von Literatur finden, die wegen der individuellen Auswahl jedes Autors auch einseitig ausfallen kann. Wer sich über die Entwicklung der Störungstheorie und vieler damit verbundener Probleme orientieren will und eine gewisse Mühe nicht scheut, dürfte vom Lesen des Buches auf jeden Fall profitieren. Eine Auswahl wird sich dabei wohl nicht vermeiden lassen; sie läßt sich aber leicht vornehmen, da die Kapitel in sich abgeschlossen sind. Im ganzen vermittelt der Inhalt einen lebendigen Eindruck von der Entwicklung im Bereich der Störungstheorie.

Zu erwähnen wäre noch, daß der Preis durch Schreibmaschinensatz niedrig gehalten werden konnte.

K. JUG