Freies Teilchen auf der Halbgeraden

Da $\mathbb{R}_+$ den Randpunkt 0 hat, ist zu erwarten, dass durch verschiedene Randbedingungen in diesem Punkte verschiedene selbstadjungierte Fortsetzungen des auf $C_o^\infty(\mathbb{R}_+)$ durch den Differenzialausdruck $-\frac{d^2}{dx^2}$ erklärten minimalen Operators T gewählt werden können. Eine den Spektren aller dieser Erweiterungen gemeinsame Teilmenge wird angegeben durch den folgenden

Satz : Das Spektrum einer jeden selbstadjungierten Fortsetzung von T enthält $\mathbb{R}_+$.

Beweis : Man wählt eine reellwertige Funktion $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R})$ mit

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } \; x \leq 0, \\ 0 & \text{für } \; x \geq 1 \qquad 0 \leq \varphi(x) \leq 1 \quad \text{für} \quad 0 < x < 1. \end{cases} \tag{1}$$

Mit ihr führt man durch

$$\psi_m(x) := \varphi(|x - m - 2| - m) \tag{2}$$

eine Funktionenfolge ein, für die gilt :

$$\begin{aligned} \psi_m(x) = 1 \quad \text{für} \quad 2 \leq x \leq 2m + 2 \\ \psi_m(x) = 0 \quad \text{für} \quad x \leq 1 \quad \text{und} \qquad x \geq 2m + 3 \end{aligned} \tag{3}$$

In den Intervallen $1 \leq x \leq 2$ und $2m + 2 \leq x \leq 2m + 3$ verbindet sie die Werte 0 und 1 durch $\varphi(2 - x)$ bzw. $\varphi(y), y := x - 2(m + 1), 0 \leq y \leq 1$ glatt; der Verlauf in ihnen hängt nicht von m ab. Mit ψ_m bildet man nun für $\lambda \geq 0$, wobei auch $\sqrt{\lambda} \geq 0$ gewählt wird, die Folge

$$f_m(x) := \frac{1}{\sqrt{2m}} \psi_m(x) \exp i\sqrt{\lambda}\; x \; . \tag{4}$$

Eine kurze Rechnung ergibt

$$((\lambda - T)f_m)(x) = \frac{1}{\sqrt{2m}} (\psi_m''(x) e^{i\sqrt{\lambda}x} + 2\psi_m'(x) i\sqrt{\lambda}\; e^{i\sqrt{\lambda}x}) \tag{5}$$

Um zu zeigen, dass T für $\lambda \geq 0$ nicht stetig umkehrbar ist, muss man zwei Grenzwerte bestimmen :

a) $\lim_{m\to\infty} ||\, f_m||$
Aus (3) und dem angeführten Verlauf in den beiden Übergangsintervallen folgt

$$||f_m||^2 = \frac{1}{2m} \left[\int_1^2 \varphi(2 - x)^2 dx + \int_0^1 \varphi(y)^2 dy + 2m \right] = 1 + \frac{1}{2m} J \; , \tag{6}$$

mit $J < 2$, also $\lim_{m\to\infty} ||f_m|| = 1$.

b) $\lim_{m\to\infty} ||(\lambda - T)f_m||$
Aus dem in und nach (3) festgestellten Verlauf von ψ_m folgt, dass
$\psi_m'(x) = 0$ ist für $x \leq 1,\; 2 \leq x \leq 2m + 2,\; 2m + 3 \leq x$. Damit erhält man aus (5)

$$\begin{aligned} ||\; (\lambda - T)f_m||^2 = \frac{1}{2m} \Bigg[& \int_1^2 \varphi''(2 - x)^2 dx + 4 \int_1^2 \varphi''(2 - x)\varphi'(2 - x) dx + 4 \int_1^2 \varphi'(2 - x)^2 dx + \\ & \int_0^1 \varphi''(y)^2 dx + 4 \int_0^1 \varphi''(y)\varphi'(2 - x) dx + 4 \int_0^1 \varphi'(y)^2 dx \Bigg] \end{aligned} \tag{7}$$

also $\lim_{m\to\infty} ||(\lambda - T)f_m|| = 0$.
Wegen des in Großmann, S. 249 angegeben Kriteriums ist demnach $T - \lambda$ für $\lambda \geq 0$ nicht stetig umkehrbar.

Der Impulsoperator $\mathbf{p}$ mit einer Dirichlet-Randbedingung in 0 ist nach Großmann, S. 295 dicht definiert; er ist auch abschließbar. (Für die letzte Behauptung siehe z. b. Fischer/Kaul II, S. 657.) Nach einem früher angegeben Kriterium ist daher $T_\infty = \mathbf{p}^*\mathbf{p}$ selbstadjungiert.

$$\mathfrak{D}(T_\infty = L^2(\mathbb{R}_+) \cap C^1(\mathbb{R}_+) \cap \{\psi | \psi' \in AC(\mathbb{R}_+) \wedge \psi'' \in L^2(\mathbb{R}_+) \wedge \psi(0) = 0\} \tag{8}$$

Um festzustellen, ob es noch weitere selbstadjungierte Fortsetzungen von T gibt, muss man seine Defektindizes bestimmen, also die Dimensionen der Defekträume $\mathrm{Ker}(T^* \mp i)$. Es sind also die l.u.a. L^2-Lösungen von

$$-\frac{d^2}{dx^2} f = \pm i f(x) \tag{9}$$

gesucht. Aus einem für Laplace-Operatoren gültigen Regularitätssatz folgt, dass jede L^2-Lösung von (9) in C^∞ liegt. Die Lösungen sind für das obere Vorzeichen in (9)

$$\exp\left[(\pm(-1+i))\frac{x}{\sqrt{2}}\right]$$

und für das untere

$$\exp\left[(\pm(1+i))\frac{x}{\sqrt{2}}\right] \ .$$

Da in beiden Fällen jeweils nur eine Lösung in L^2 und damit in $\mathcal{L}_+$ bzw. in $\mathcal{L}_-$ liegt, sind die Defektindizes (1,1). Es gibt daher nach den allgemeinen Sätzen der Fortsetzungstheorie symmetrischer Operatoren eine einparametrige Schar selbstadjungierter Fortsetzungen von T. Man kann sie als T_γ, $\gamma \in \mathbb{R}$, durch die Randbedingung

$$f'(0) = \gamma f(0) \tag{10}$$

parametrisieren. Als Verdeutlichung dessen, dass man für verschiedene γ im Allgemeinen auch wesentlich verschiedene Operatoren erhält, sollen die für negative γ auftretenden Eigenwerte als Funktion von γ angegeben werden. (Seminarausarbeitung v. W. Macher)

Die Eigenwertgleichung $T_\gamma f = \lambda f, \lambda \in \mathbb{R}$ lautet ausgeschrieben

$$f'' = -\lambda f(x) \ , \tag{11}$$

und ihre Lösungen sind $e^{\pm\kappa x}$ mit $\kappa^2 = -\lambda$. κ ist also reell oder rein imaginär. Ein Eigenvektor liegt nur vor, wenn ein $f(x) = ce^{-\kappa x}$ auftritt mit $\kappa = \sqrt{-\lambda} \ > 0$, also $\lambda < 0$. Es gibt also nur negative Eigenwerte.
T_∞ hat keine Eigenwerte, da die RB $c = 0$ zur Folge hat.

Eigenwerte von T_γ :
Die Randbedingung verlangt $-\kappa c e^{-\kappa x} = \gamma c e^{-\kappa x}$, also $\kappa = -\gamma$, woraus $\lambda = -\gamma^2$ folgt. Die Lösung der Eigenfunktionsgleichung zu λ ist also $f(x) = ce^{\gamma x}$, was nur für $\gamma < 0$ zu einer Eigenfunktion in L^2 führt.

Als Ergebnis erhält man, dass T_γ für $\gamma \geq 0$ keine Eigenwerte hat, für $\gamma < 0$ aber einen solchen aufweist, und zwar $\lambda = -\gamma^2$ mit der Eigenfunktion $f_\lambda = ce^{\gamma x}$. Für $\gamma < 0$ weicht also das Spektrum der selbstadjungierten Fortsetzung erheblich von jenem von T_∞ ab; die Fortsetzungen sind nicht unitär äquivalent. Ferner ersieht man daraus, dass verschiedene Randbedingungen verschiedene physikalische Eigenschaften des quantenmechanischen Modells wiedergeben: Obwohl der dem Teilchen zur Verfügung stehende Raum unbeschränkt ist, tritt für $\gamma < 0$ ein Bindungszustand auf: $\gamma < 0$ simuliert eine anziehende Wand. Dies ist das einfachste Beispiel für die auch in höheren Dimensionen beobachtete Erscheinung, dass die Gestalt des Randes oder eine geeignete Randbedingung auch bei unbeschränkten Gebieten zu Bindungszuständen führen können.