Het Spectrum van Kwantumoperatoren

Keune, A.

Het Spectrum van Kwantumoperatoren

Anne Keune

21 december 2005

Inhoudsopgave

1 Inleiding

In tegenstelling tot de klassieke mechanica zijn in de kwantummechanica niet per definitie alle energiewaarden geoorloofd. Op atomair niveau komt het vaak voor dat deeltjes, zoals een elektron in een atoom, discrete energiewaarden hebben.

In de kwantummechanica kunnen we het spectrum, ofwel de mogelijke energiewaarden, van een deeltje berekenen met behulp van de Schrödingervergelijking. In feite stelt deze vergelijking de niet onbekende voorwaarde op de toestandsvergelijking van een deeltje dat de totale energie van het deeltje de som is van de kinetische energie en de potentiële energie.

In deze Bachelorscriptie zal ik van verschillende kwantumoperatoren, ofwel bij verschillende potentialen, de mogelijke energiewaarden bepalen. Ik zal hierbij alleen naar tijdsonafhankelijke problemen kijken. We zullen beginnen met het definiëren van de Schrödingervergelijking, dit is de vergelijking die steeds moet worden opgelost om de energie spectra te kunnen bepalen, en we zullen de voorwaarden bekijken waar een oplossing van de Schrödingervergelijking in het algemeen aan moet voldoen. Vervolgens zullen we in hoofdstuk 2 de spectra van een viertal voorbeelden bekijken. Zijn de spectra bijvoorbeeld continu of discreet en hebben de operatoren een eindig of oneindig spectrum? Deze vragen zullen in hoofdstuk 2 beantwoord worden, maar er zal nog geen wiskundige afleiding worden gegeven om deze antwoorden ook te bewijzen. In hoofdstuk 3 zal er vervolgens een wiskundig frame opgezet worden en zullen de verschillende eigenschappen van de kwantumoperatoren behandeld worden. Ook zullen we de WKB benadering behandelen, deze methode kunnen we gebruiken om de spectra die moeilijk exact uit te rekenen zijn te benaderen. Aan het eind van hoofdstuk 3 zullen we dan in staat zijn om de spectra van de voorbeelden die we in hoofdstuk 2 al gegeven hadden, ook daadwerkelijk wiskundig af te leiden.

1.1 De Schrödingervergelijking

De tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking wordt gegeven door:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{1}$$

$\psi(\vec{r})$ is hierbij de continue toestandsfunctie van het deeltje waar we naar kijken. Verder geldt $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, waarbij h de constante van Planck is. m is de massa van het deeltje, $V(\vec{r})$ is de potentiaal en E is een constante die overeenkomt met de energiewaarde van het deeltje.

De kwantummechanica legt nog een hele belangrijke voorwaarde op de bewegingsvergelijking ψ en dat is dat moet gelden: $\psi \in L^2$. Hierbij is L^2 de verzameling van meetbare functies $f : X \to \mathbb{C}$ zodat $\int |f|^2 d\vec{r} < \infty$. Dit heeft te maken met de waarschijnlijkheid dat we het deeltje op een bepaalde plaats zullen aantreffen. De waarschijnlijkheid dat een deeltje wordt gevonden tussen $\vec{r}$ en $\vec{r} + d\vec{r}$ wordt namelijk gegeven door: $|\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$ en dus moet gelden:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1 \tag{2}$$

ofwel $\psi \in L^2$.

We kunnen nu de Schrödingervergelijking, die voldoet aan zowel (1) als (2) schrijven als: $H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ met $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$ een lineaire differentiaal operator, ook wel de Hamiltoniaan genoemd, met: $H : D(H) \subset L^2 \to L^2$, waarbij $D(H)$ het domein van H is. In paragraaf 3.3 zullen we laten zien dat het gewenste domein waar we mee willen werken de Solobev ruimte is.

Als een functie $\psi(\vec{r}) \in D(H)$ aan zowel vergelijking (1) als (2) voldoet, dan noemen we $\psi(\vec{r})$ ook wel een eigenfunctie van H. De bijbehorende E-waarden zijn dan eigenwaarden van H. De verzameling van alle eigenwaarden van H noemen we het discrete spectrum van H. Het gehele spectrum van H is echter gedefinieerd als alle waarden E waarvoor de operator $(H - IE)$, met I de identiteitsoperator, niet inverteerbaar is. Als E een eigenwaarde van H is dan heeft $(H - IE)$ een kern en is daarom niet inverteerbaar. Maar het kan ook zijn dat $(H - IE)$ niet inverteerbaar is omdat $(H - IE)$ bijvoorbeeld wel injectief is, maar niet surjectief en als dit het geval is zeggen we dat E tot het continue spectrum van H behoort. Het gehele spectrum is de vereniging van het discrete spectrum èn het continue spectrum. Zie voor meer informatie hierover ook [2].

2 Voorbeelden

In dit hoofdstuk zullen we bij verschillende voorbeelden uit de kwantummechanica het spectrum van de bijbehorende Hamiltoniaan $H : D(H) \subset L^2 \to L^2$ met $H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\psi$ geven. Aan het eind van hoofdstuk 3 zullen we deze spectra berekenen met behulp van het wiskundig frame dat we in het begin van hoodstuk 3 zullen opzetten. Naar aanleiding hiervan zullen we vervolgens eventuele verschillen in resultaat bespreken. De resultaten die in dit hoofdstuk gegeven worden komen uit [1] en in dit boek is ook meer informatie over deze resultaten.

2.1 De oneindige potentiaalput

We beschouwen het probleem van de oneindige potentiaalput als een 1-dimensionaal probleem. Laat $x \in \mathbb{R}$. De potentiaal $V(x)$ behorende bij deze potentiaalput wordt gegeven door:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{anders} \end{cases} \tag{3}$$

Hierdoor geldt buiten de put $\psi(x) = 0$. Binnen de put waar $V(x) = 0$ geldt:

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \tag{4}$$

Als we nu de volgende randvoorwaarden stellen, hoeven we ons alleen te richten op wat er binnen de potentiaalput gebeurt en kunnen we alles wat hier buiten valt nalaten. Zie hiervoor [4].

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{5}$$

Het spectrum behorende bij de rechthoekige potentiaalput is een oneindig discreet spectrum.

De orthonormale basis van eigenfuncties wordt gegeven door:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin k_n x, \quad \text{met} \quad k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \in \mathbb{R} \tag{6}$$

Bij deze eigenfuncties horen de eigenwaarden:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad \text{met} \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{7}$$

2.2 Het vrije deeltje

We beschouwen het vrije deeltje als een 1-dimensionaal probleem. Zeg $x \in \mathbb{R}$. Bij dit probleem hoort de volgende potentiaal:

$$V(x) = 0 \tag{8}$$

ofwel er is geen potentiële energie en dus:

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \tag{9}$$

Dit is dezelfde operator als we eerder bij de oneindige potentiaalput zagen, alleen is de enige randvoorwaarde bij dit probleem: $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Het spectrum van het vrije deeltje is een continu spectrum met $E \geq 0$.

2.3 De harmonische oscillator

We beschouwen het probleem van de harmonische oscillator als een 1-dimensionaal probleem. Zeg $x \in \mathbb{R}$. De potentiaal behorende bij dit probleem wordt gegeven door:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{10}$$

Hierbij is m weer de massa van het deeltje waar we naar kijken en ω is de hoekfrequentie van de oscillatie. Bij dit probleem hebben we dus te maken met de volgende operator:

$$H\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) \tag{11}$$

Het spectrum van deze operator is een oneindig discreet spectrum.

De orthonormale basis van eigenfuncties wordt gegeven door:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}^{1/4}\right)\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)e^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2/2} \tag{12}$$

met H_n de n^e Hermite polynoom. De hierbij behorende eigenwaarden zijn:

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega \quad \text{met} \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{13}$$

2.4 Het waterstofatoom

We beschouwen het voorbeeld van het waterstofatoom als een 3-dimensionaal probleem. Het waterstofatoom bestaat uit een proton en een elektron waartussen een wisselwerking bestaat door middel van de Coulombkracht. We nemen aan dat het proton oneidig zwaar is, zodat deze niet beweegt en we plaatsen het proton in de oorsprong van het coördinatenstelsel. Ook nemen we aan dat het elektron een puntlading is. De Coulombkracht is sferisch symmetrisch en enkel afhankelijk van de afstand tot de oorsprong. We kunnen hier gebruik maken van scheiding van variabelen en werken met de radiale vorm van de Schrödingervergelijking. De radiale vorm van de Schrödingervergelijking wordt gegeven door:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l\,(l+1)}{r^2}\right)u_{nl}(r) + V(r)u_{nl}(r) = Eu_{nl}(r) \tag{14}$$

waarbij $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ met $R_{nl}(r)$ het radiale deel van de golffunctie, l het nevenkwantumgetal en n het hoofdkwantumgetal. Voor de gehele golffunctie geldt: $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$, waarbij $Y_l^m(\theta,\phi)$ ookwel de bolfuntie genoemd wordt en m het zogenaamde magnetisch kwantumgetal is. De Coulombkracht wordt gegeven door:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \tag{15}$$

De operator waarvan we het spectrum bepalen wordt dus gegeven door:

$$Hu_{nl}(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l\,(l+1)}{r^2}\right)u_{nl}(r) + -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}u_{nl}(r) \tag{16}$$

Het waterstofatoom heeft zowel een oneindig negatief discreet spectrum als een oneindig positief continu spectrum. Voor $E \geq 0$ is een elektron niet langer gebonden aan het waterstofatoom. Het elektron gedraagt zich dan als een vrij deeltje en heeft dus een continu spectrum met $E \geq 0$. Behorende bij het discrete spectrum wordt de orthonormale basis van eigenfuncties gegeven door:

$$\psi_{nlm}(r,\theta\phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}}e^{r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{17}$$

waarbij

$$L_p^{q-p}(x) = (-1)^p\left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x) \tag{18}$$

en $L_q(x)$ de q^e Laguerre polynoom, gegeven door

$$L - q(x) = e^x\left(\frac{d}{dx}\right)^q\left(e^{-x}x^q\right) \tag{19}$$

De corresponderende eigenwaarden zijn:

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{n^2}, \quad \text{met} \quad n = 1,2,3,\ldots \tag{20}$$

3 De analyse van lineaire differentiaal operatoren

Om het spectrum van een operator te bepalen, wordt gebruik gemaakt van de zogenaamde spectraaltheorie. Deze theorie is in eerste instantie gedefinieerd voor begrensde operatoren. Lineaire differentiaal operatoren zijn echter niet perse begrensd en dit levert dus een probleem bij het bepalen van het spectrum van een lineaire differentiaal operator.

Hoewel de differentiaal operatoren niet begrensd zijn, kunnen ze wel gesloten zijn. Dit is een zwakkere vorm van begrensdheid en zal in paragraaf 3.2 besproken worden. De inverse van een gesloten operator is wel begrensd en dus zullen we de inverse van de differentiaal operator begruiken om de eigenschappen van de onbegrensde operator te bestuderen. Zo zullen we bijvoorbeeld zien dat wanneer deze inverse een compacte en zelfgeadjungeerde operator is, dat de differentiaal operator een volledige orthonormale verzameling van eigenfuncties heeft, ofwel dat het spectrum van de differentiaal operator dan discreet is.

De inverse van een lineaire differentiaal operator is een integraal operator, waarvan we de kern de Greense functie van de differentiaal operator noemen. Gerelateerd aan de Greense functies kunnen we differentiaalvergelijkingen ook oplossen met behulp van de methode van variatie van constanten. Deze methode zullen we bespreken in paragraaf 3.9 en we zullen laten zien hoe dit aan de Greense functie gerelateerd is.

Een verschil tussen begrensde en onbegrensde operatoren is dat onbegrensde operatoren niet gedefinieerd kunnen zijn op de hele ruimte. Wanneer we een onbegrensde operator definiëren, moeten we dus ook rekening houden met het domein van deze operator. De definitie van een onbegrensde lineaire operator:

$$A : D(A) \subset X \to Y \tag{21}$$

Met X, Y genormeerde lineaire ruimtes.

Voorbeeld. Voor de differentiaal operator $-\nabla^2$ op $L^2([0,a])$ met randvoorwaarden $u(0) = u(a) = 0$ vinden we: $D(-\nabla^2) = \{u \in H^2((0,a)) \mid u(0) = u(a) = 0\}$. Hier is $H^2((0,a))$ de Solobev ruimte van functies waarvan de zwakke afgeleiden van graad kleiner of gelijk aan 2 tot $L^2([0,a])$ behoren. Over zwakke afgeleiden de Sobolev ruimte zullen we het later uitgebreider hebben.

3.1 Zelfgeadjungeerde differentiaal operatoren

In deze paragraaf zullen we de geadjungeerden van differentiaal operatoren bestuderen die aan gestelde randvoorwaarden voldoen. Door de moeilijkheidsgraad van hogere orde differentiaalvergelijkingen en de relevantie met de kwantummechanica zullen we naar differentiaal operatoren kijken van orde 2. We bestuderen dus randvoorwaarden problemen in de vorm:

$$Au = bu'' + cu' + du, \quad Bu = 0 \tag{22}$$

met $Bu = 0$ de verzameling randvoorwaarden, $b \in C^2(\mathbb{R})$, $c \in C^1(\mathbb{R})$, $d \in C(\mathbb{R})$ en $b(x) \neq 0$ op $\mathbb{R}$.

Definitie. Laat H een Hilbert ruimte zijn. De geadjungeerde van operator $A : D(A) \subset H \to H$, is de operator $A^* : D(A^*) \subset H \to H$ met

$$D(A^*) = \{y \in H \mid \exists z \in H \text{ zodat } \forall x \in D(A) \text{ geldt } \langle Ax, y\rangle = \langle x, z\rangle\}. \quad (23)$$

Als geldt dat $y \in D(A^*)$ dan definiëren we $A^*y = z$, met z een uniek element zodat $\langle Ax, y\rangle = \langle x, z\rangle$.

Definitie. Een operator $A : D(A) \subset H \to H$ is zelfgeadjungeerd wanneer $A^* = A$.

Stelling 3.1.1. *Stel we hebben een tweede-orde differentiaal operator A zoals gedefinieerd in vergelijking (22), waarbij $A : D(A) \subset L^2[0,a] \to L^2[0,a]$ met $D(A) = \{u \in C^2[0,a] \mid u(0) = u(a) = 0\}$. Laat $\langle .,. \rangle$ het standaard inproduct op L^2 zijn. Definieer $A^* : D(A^*) \subset L^2[0,a] \to L^2[0,a]$, met $D(A^*) = \{v \in C^2[0,a]\}$ door $A^*v = \bar{b}v'' - \bar{c}v' + \bar{d}v$. Dan krijgen we voor alle $u, v \in C^2([0,a])$: $\langle v, Au\rangle - \langle A^*v, u\rangle = [b(\bar{v}u' - \bar{v}'u)] + (c - b')\bar{v}u]_0^a$.*

Bewijs. Dit resultaat wordt verkregen door tweemaal partieel te integreren:

$$\begin{aligned}
\langle v, Au\rangle &= \int_0^a \bar{v}\left(bu'' + cu' + du\right) dx \\
&= \left[b\bar{v}u' + c\bar{v}u\right]_0^a + \int_0^a \left(-(b\bar{v})'u' - (c\bar{v})'u + d\bar{v}u\right) dx \\
&= \left[b\bar{v}u' + c\bar{v}u - (a\bar{v})'u\right]_0^a + \int_0^a \overline{\left((\bar{b}v)'' - (\bar{c}v)' + \bar{d}v\right)} u dx \\
&= \left[b(\bar{v}u' - \bar{v}'u)\right] + (c - b')\bar{v}u\Big]_0^a + \langle A^*v, u\rangle
\end{aligned} \quad (24)$$

Dit is het gewenste resultaat.

A^* is nu de zelfgeadjungeerde van A als we de randvoorwaarden zo kiezen dat $\langle v, Au\rangle - \langle A^*v, u\rangle = 0$, want dan geldt dat $A = A^*$ Ofwel we willen dat voor $v \in C^2([0,a])$ geldt dat $B^*v = 0$ dan en slechts dan als $[b(\bar{v}u' - \bar{v}'u)] + (c - b')\bar{v}u]_0^a = 0$ $\forall u$ zodat $Bu = 0$.

Voorbeeld. We kijken naar de operator $-\nabla^2$ op $L^2([0,a])$. Als $v \in D((-\nabla^2)^*)$, dan is er een $w \in L^2([0,a])$ zodat:

$$\langle -u'', v\rangle = \langle u, w\rangle \ \forall u \in D(-\nabla^2) \quad (25)$$

Aangezien $C^\infty \subset D(-\nabla^2)$ volgt het uit definitie van de weak derivative dat $v \in D((-\nabla^2)^*)$ en $w = -v''$, Ofwel $-\nabla^2 = (-\nabla^2)^*$ op $L^2([0,a])$. Vervolgens moeten we nog naar het domein van de operatoren kijken. We vinden, gebruik makend van de stelling van Green: $\langle v, Du\rangle - \langle D^*v, u\rangle = [\bar{v}u' - \bar{v}'u]_0^a$. We hebben weer de Dirichlet randvoorwaarden: $u(0) = u(a) = 0$. Dus $[\bar{v}u' - \bar{v}'u]_0^a = \bar{v}(a)u'(a) - \bar{v}(0)u'(0)$. En deze uitdrukking is gelijk aan 0 dan en slechts dan als $v(0) = v(a) = 0$ en dus geldt $D((-\nabla^2)^*) = D(-\nabla^2)$. Hiermee is bewezen dat $-\nabla^2$ zelfgeadjungeerd is op $D(-\nabla^2) = \{u \in H^2((0,a))|u(0) = u(a) = 0\}$.

3.2 Gesloten operatoren

Een lineaire operator is begrensd dan en slechts dan als deze ook continu is [3]. Onbegrensde operatoren zoals differentiaal operatoren zijn dus niet continu, maar deze operatoren kunnen wel gesloten zijn. In de in deze paragraaf gegeven definities van continue en gesloten operatoren kunnen we zien dat het verschil tussen gesloten en continu is dat $Ax_n \to y \in Y$ vanzelfsprekend is bij een continue operator, maar als voorwaarde moet worden gegeven bij een gesloten operator. Geslotenheid is dus een zwakkere vorm van continuïteit.

Definitie. Een operator $A : X \to Y$ is continu als voor elke rij $\{x_n\}$ in X met $x_n \to x \in X$, geldt dat $Ax_n \to Ax \in Y$.

Voorbeeld. De differentiaaloperator $\nabla : D(\nabla) \subset L^2([0,1])) \to L^2([0,1])$ is niet continu. Het limiet van een rij continue functies hoeft namelijk niet continu te zijn. We nemen als voorbeeld de rij $\{x^n\}$ met $x \in [0,1]$ en $x^n \to f(x)$. Als $n \to \infty$ dan verkrijgen we de limiet functie:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x < 1 \\ 1 & x = 1 \end{cases} \tag{26}$$

Het mag duidelijk zijn dat $f(x) \notin D(\nabla)$ en dus is de operator $\nabla : D(\nabla) \subset L^2([0,1])) \to L^2([0,1])$ niet continu.

Definitie. Een operator $A : D(A) \subset X \to Y$ is gesloten als voor elke rij $\{x_n\}$ in $D(A)$ met $x_n \to x \in X$ en $Ax_n \to y \in Y$, geldt dat $x \in D(A)$ en $Ax = y$.

In paragraaf 3.3 wordt bewezen dat differentiaal operatoren wel gesloten kunnen zijn. We laten hier eerst zien dat wanneer een operator $A : D(A) \subset X \to Y$ gesloten is, dat de bijbehorende inverse begrensd is. Voordat we dit echter kunnen bewijzen hebben we eerst wat voorbereiding nodig. Hierbij heb ik voornamelijk gebruik gemaakt van [11].

Definitie. Een open bal $B(r, x_0)$ in een metrische ruimte X met metriek d is gedefinieerd als $B(r, x_0) = \{x \in X : d(x, x_0) < r\}$.

Stelling 3.2.1. *(Stelling van Baire) Laat X een volledige metrische ruimte zijn en $\{U_n\}_1^\infty$ een rij open dichte deelverzamelingen van X. Dan is $\cap_1^\infty U_n$ dicht in X*

Bewijs. We willen bewijzen dat als we een niet-lege open verzameling W hebben, dat $W \cap \cap_1^\infty U_n$ niet leeg is. Aangezien $W \cap U_1$ niet-leeg en open is, bevat de verzameling een open bal $B(r_0, x_0)$. We mogen aannemen dat $0 < r_0 < 1$. Voor $n > 0$ kiezen we $x_n \in X$ en $r_n \in (0, \infty)$ inductief als volgt: Als we x_j en r_j hebben gekozen voor $j < n$, dan weten we dat $U_n \cap B(r_{n-1}, x_{n-1})$ open en niet-leeg is en dus kunnen we x_n en r_n zo kiezen dat $0 < r_n < 2^{-n}$ en $\overline{B(r_n, x_n)} \subset U_n \cap B(r_{n-1}, x_{n-1})$. Dan geldt dat als $n, m \geq N$, dat $x_n, x_m \in B(r_N, x_N)$ en omdat $r_n \to 0$ is $\{x_n\}$ een Cauchy rij. Omdat X volledig is bestaat het limiet $x_n \to x \in X$. Aangezien $x_n \in B(r_N, x_N)$ als $n \geq N$ hebben we nu: $x \in \overline{B(r_N, x_N)} \subset U_N \cap B(r_1, x_1) \subset U_N \cap W$ voor alle N. En dus is de stelling bewezen.

Een gevolg van de stelling van Baire is de volgende stelling:

Stelling 3.2.2. *Laat X een volledige metrische ruimte zijn, dan is X niet te schrijven als een aftelbare verzameling van nergens dichte verzamelingen.*

Bewijs. Stel $\{A_n\}$ is een rij nergens dichte deelverzamelingen van X. Dan is $\{(\overline{E}_n)^c\}$ een rij open dichte verzamelingen. In stelling 3.2.1 hebben we al gezien dat nu geldt: $\cap(\overline{E}_n)^c \neq \emptyset$. En dus hebben we $\cup E_n \subset \cup \overline{E}_n \neq X$.

Als X en Y topologische ruimtes zijn, dan noemen we een afbeelding $T : X \to Y$ open als voor alle open verzamelingen $U \in X$ geldt dat dan ook $T(U) \in Y$ open is. Als X en Y metrische ruimtes zijn betekent dit dat voor elke open bal $B(r, x_0) \subset X$, $T(B(r, x_0) \subset Y$ een open bal $B(s, T(x_0))$ bevat. Als nu X en Y genormeerde ruimtes zijn en T een lineaire transformatie, dan is T open als dan en slechts dan als $T(B(1, 0))$ een open bal rond het punt $0 \in Y$ bevat.

Stelling 3.2.3. *Laat X en Y Banachruimtes zijn. Als T een surjectieve lineaire transformatie van X naar Y is, dan is T open.*

Bewijs. Laat B_r de open bal rond het punt $0 \in X$ zijn met straal r. We willen nu dus laten zien dat $T(B_1)$ een open bal bevat rond het punt $0 \in Y$. Aangezien $X = \cup_{n=1}^\infty B_n$ en T surjectief is, weten we dat $Y = \cup_{n=1}^\infty T(B_n)$. Y is een volledige ruimte en de afbeelding $y \mapsto ny$ is een homeomorfisme dat $T(B_1)$ op $T(B_n)$ afbeeldt. We weten nu uit stelling 3.2.2 dat er een $y_0 \in Y$ en een $s > 0$ moeten bestaan zodat de open bal $B(4s, y_0)$ in $\overline{T(B_1)}$ bevat is. Kies nu een $y_1 = T(x_1) \in T(B_1)$ zodat $||y_1 - y_0|| < 2s$. Dan geldt dat $B(2s, y_1) \subset B(4s, y_0) \subset \overline{T(B_1)}$. En dus wanneer $||y|| < 2s$: $y = T(x_1) + (y - y_1) \in \overline{T(x_1 + B_1)} \subset \overline{T(B_2)}$. Als we nu beide kanten van deze vergelijking door 2 delen, zien we dat er een $s > 0$ bestaat zodat als $||y|| < s$ dat $y \in \overline{T(B_1)}$. Maar wat we nu nog moeten aantonen is dat dan ook geldt dat $y \in T(B_1)$. We weten dat als $||y|| < s2^{-n}$ dat $y \in \overline{T(B_{2^{-n}})}$. Stel nu dat we hebben dat $||y|| < s/2$, dan kunnen we een $x_1 \in B_{1/2}$ vinden zodat $||y - T(x_1)|| < s/4$, en zo kunnen we voor elke n een $x_n \in B_{2^{-n}}$ vinden zodat $||y - \sum_{j=1}^n T(x_j)|| < s2^{-n-1}$. Aangezien X volledig is, weten we dat de rij $\sum_{n=1}^{\infty} x_n$ convergeert. Zeg $x_n \to x$. Maar dan geldt: $||x|| < \sum_{n=1}^{\infty} 2^{-n} = 1$ en $y = T(x)$. Ofwel we weten nu dat $T(B_1)$ alle punten y met $||y|| < s/2$ bevat. En dus is de stelling bewezen.

Dit betekent dat als T een bijectieve lineaire transformatie is, dat T^{-1} ook een lineaire transformatie is. De continuïteit van T^{-1} is namelijk equivalent aan de openheid van T.

Nu zijn we klaar om te bewijzen dat wanneer een operator $A : D(A) \subset X \to Y$ gesloten is, dat de bijbehorende inverse begrensd is. Dit doen we aan de hand van het boek [5].

Definitie. De graaf $\Gamma(A)$ van een operator $A : D(A) \subset X \to Y$ is de deelverzameling van $X \times Y$ gedefinieerd door:

$$\Gamma(A) = \{(x, y) | x \in D(A) \text{ en } y = Ax\} \tag{27}$$

Stelling 3.2.4. *(Gesloten grafiek stelling). Laat X en Y Banach ruimtes zijn en A een gesloten lineaire transformatie van X naar Y, dan is A begrensd.*

Bewijs. Definieer M en N als de projecties van $\Gamma(A)$ naar X en Y, respectievelijk. In andere woorden: $M(x, Ax) = x$ en $N(x, Ax) = Ax$. Beide projecties zijn lineaire transformaties. Aangezien X en Y volledige ruimtes zijn, is $X \times Y$ ook volledig en dus is $\Gamma(A)$ ook volledig, want A is gesloten. De afbeelding M is een bijectie van $\Gamma(A)$ naar X en dus is M^{-1} begrensd. Dit volgt uit stelling 3.2.3. Maar dit betekent dat $A = N \circ M^{-1}$ ook begrensd is.

Merk op dat elke begrensde operator gesloten is. En elke gesloten operator met $D(A) = X$ is begrensd, maar er zijn vele gesloten operatoren met $D(A) \neq X$.

Definitie. Als de operator $A : D(A) \subset X \to Y$ bijectief is, dan definiëren we de inverse operator $A^{-1} : Y \to X$ door $A^{-1}y = x$ dan en slechts dan als $Ax = y$.

Stelling 3.2.5. *Als X, Y Banach ruimtes zijn en $A : D(A) \subset X \to Y$ is een gesloten lineaire operator met $R(A) = Y$ en $N(A) = \{0\}$, dan $A^{-1} \in B(Y, X)$.*

Bewijs. Wanneer we de norm op X gebruiken is $D(A)$ een genormeerde vectorruimte. Wanneer A echter niet begrensd is, is $D(A)$ onder deze norm geen volledige ruimte. We kiezen daarom een andere norm:

$$||x||_A = ||x|| + ||Ax|| \tag{28}$$

Onder deze norm is $D(A)$ wel een volledige ruimte. Als $\{x_n\}$ een Cauchy rij in $D(A)$ is dan is $\{x_n\}$ een Cauchy rij in X en $\{Ax_n\}$ een Cauchy rij in Y.

Dus bestaan er $x \in X$ en $y \in Y$ zodat $x_n \mapsto x$ en $Ax_n \mapsto y$. Aangezien A gesloten is geldt nu $x \in D(A)$ en $Ax = y$. Ofwel $||x_n - x||_A \to 0$. Wanneer we nu de operator A beschouwen van de Banach ruimte $D(A)$ (met de hierboven gedefinieerde norm) naar Y, vinden we: $A \in B(D(A), Y)$, aangezien:

$$||Ax|| \leq ||x||_A \tag{29}$$

$A \in B(D(A), Y)$ is bijectief en dus inverteerbaar. $A^{-1} : D(A^{-1}) = Y \to D(A)$ en dus is $\Gamma(A^{-1})$ gesloten. Nu kunnen we de closed graph theorem toepassen en vinden we $A^{-1} \in B(Y, D(A))$.

3.3 Zwakke afgeleiden

We hebben het tot nu toe bijna alleen nog maar over differentiaal operatoren gehad die werken op continu differentieerbare functies. Deze operatoren hoeven echter niet te voldoen aan een aantal belangrijke eigenschappen, zoals geslotenheid. Om operatoren te verkrijgen die wel over deze belangrijke eigenschappen beschikken, moeten we het domein van de 'klassieke' differentiatie uitbreiden met functies waarvan de zwakke afgeleide tot L^2 behoort. In deze paragraaf zullen de zwakke L^2-afgeleide kort introduceren.

Definitie. De functie $u \in L^2(\mathbb{R})$ heeft een zwakke afgeleide $v = u' \in L^2(\mathbb{R})$ als $\forall \chi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ geldt:

$$\langle u(x), \chi'(x) \rangle = -\langle v(x), \chi(x) \rangle \tag{30}$$

De Solobev ruimte $H^k(\mathbb{R})$ is als volgt gedefinieerd:

$$H^k(\mathbb{R}) = \{u \in L^2(\mathbb{R}) | u, u', ..., u^{(k)} \in L^2(\mathbb{R})\} \tag{31}$$

met de volgende norm en inprodukt:

$$||u||_{H^k} = \left(\int_{\mathbb{R}} \{|u|^2 + |u'|^2 + ... + |u^{(k)}|^2\} dx \right)^{1/2} \tag{32}$$

$$\langle u, v \rangle_{H^k} = \int_{\mathbb{R}} \{\bar{u}v + \bar{u}'v' + ... + \bar{u}^{(k)}v^{(k)}\} dx \tag{33}$$

Voorbeeld. De differentiaal operator $\nabla : H^1(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ is gesloten. Stel namelijk dat $u_n \mapsto u$ en $\nabla u_n \mapsto v$ in $L^2(\mathbb{R})$. Dan hebben we $\forall \chi \in C_c^\infty(\mathbb{R})$:

$$\langle v, \chi \rangle = \lim_{n \to \infty} \langle u_n', \chi \rangle = \lim_{n \to \infty} -\langle u_n, \chi' \rangle = -\langle u, \chi' \rangle \tag{34}$$

Dus $u \in H^1(\mathbb{R})$ en $\nabla u = v$ en dus is ∇ gesloten.

De geslotenheid van ∇ impliceert dat $H^k(\mathbb{R})$ volledig is en dus een Hilbert ruimte. Als $\{u_n\}$ een Cauchy rij in H^k is, dan is $\{u_n^{(j)}\}$ een Cauchy rij in L^2 $\forall j \leq k$. Aangezien L^2 volledig is, bestaan er functies $v, v_j \in L^2$ zodat $u_n \mapsto v$ en $u_n^{(j)} \mapsto v_j$ als $n \mapsto \infty$. Omdat ∇ gesloten is, volgt hieruit dat $v_j = v^{(j)}$ $\forall j \leq k$ zodat $u_n \mapsto v$ in H^k.

3.4 Greense functies

We beschouwen de operator A gegeven in vergelijking (22) met

$$Au = f, u(0) = u(a) = 0 \tag{35}$$

Met $f : [0, a] \to \mathbb{C}$ een gegeven continue functie. We zoeken voor dit probleem een oplossing in de vorm: $u(x) = \int_0^a g(x, y)f(y)dy$, Met $g : [0, a] \times [0, a] \to \mathbb{C}$ een geschikte functie die we de Greense functie zullen noemen.

In deze paragraaf zullen we laten zien dat wanneer de operator A inverteerbaar is, ofwel wanneer vergelijking (35) voor elke gegeven f een unieke oplossing u heeft, de integraal operator $R : H \to D(A)$ gegeven door:

$$Rf(x) = \int_0^a g(x, y)f(y)dy \tag{36}$$

de inverse van operator A is.

Voordat we de definitie van de Greense functie geven zullen we eerst de voorwaarden waaraan de functie $g(x, y)$ moet voldoen om een geschikte functie te zijn bekijken. We maken hiervoor gebruik van de δ-functionaal. De δ-functionaal werkende op een testfunctie χ fungeert als puntevaluatie en is als volgt gedefinieerd:

$$\langle \delta, \chi \rangle = \int \delta(y)\chi(y)dy = \chi(x) \tag{37}$$

Gegeven is dat geldt: $Au(x) = f(x)$. De Greense functie moet dus voldoen aan

$$Au(x) = A \int_0^a g(x, y)f(y)dy = f(x) \tag{38}$$

ofwel

$$Ag(x, y) = \delta(x - y) \text{ met } g(0, y) = g(a, y) = 0. \tag{39}$$

Gebruikmakend van deze voorwaarden kan de Greense functie gedefinieerd worden. We gebruiken hier de definitie zoals gegeven in [10].

Definitie. Een functie $g : [0, a] \times [0, a] \to \mathbb{C}$ is een Greense functie voor bovenstaand probleem, als deze aan de volgende voorwaarden voldoet:

1. g is continu op $0 \leq x, y \leq a$, en twee keer continu differentieerbaar naar x op $0 \leq x \leq y \leq a$ en $0 \leq y \leq x \leq a$
2. g voldoet aan de differentiaalvergelijking met betrekking to x en de randvoorwaarden.
3. De sprong in g_x over de lijn $x = y$ wordt gegeven door: $g_x(x^+, x) - g_x(x^-, x) = 1/b(x)$, waarbij de subscript x voor de partiële afgeleide staat en $g_x(x^+, x) = \lim_{y \to x} +g_x(x, y)$ en $g_x(x^-, x) = \lim_{y \to x} -g_x(x, y)$

Stelling 3.4.1. *$Rf(x)$, zoals gegeven in vergelijking* (36)*, is een oplossing van probleem* (35)*.*

Bewijs. We hebben:

$$u(x) = \int_0^x g(x,y)f(y)dy + \int_x^a g(x,y)f(y)dy \tag{40}$$

en aangezien $g(x,y)$ en continue functie is krijgen we

$$\begin{aligned}\frac{du}{dx} &= g(x,x)f(x) + \int_0^x g_x(x,y)f(y)dy - g(x,x)f(x) + \int_x^a g_x(x,y)f(y)dy \\ &= \int_0^x g_x(x,y)f(y)dy + \int_x^a g_x(x,y)f(y)dy \end{aligned}\tag{41}$$

Rekening houdend met de sprong over de $x = y$ lijn en gebruik makend van het feit dat g een oplossing is van de homogene vergelijking met $f = 0$, krijgen we

$$\begin{aligned}\frac{d^2u}{dx^2} &= g_x(x,x^-)f(x) + \int_0^x g_{xx}(x,y)f(y)dy - g_x(x,x^+)f(x) + \int_x^a g_{xx}(x,y)f(y)dy \\ &= \frac{1}{b(x)}\left(f(x) - c(x)\frac{d}{dx}\int_0^a g(x,y)f(y)dy - \int_0^a d(x)g(x,y)f(y)dy\right) \\ &= \frac{1}{b(x)}\left(f(x) - c(x)\frac{du(x)}{dx} - d(x)u(x)\right). \end{aligned}\tag{42}$$

$u(x)$ voldoet dus inderdaad aan de differentiaalvergelijking en voldoet ook aan de randvoorwaarden aangezien $g(x,y)$ zo gedefinieerd is.

3.5 Compacte operatoren

In deze paragraaf definiëren we compacte operatoren. Vervolgens geven we een aantal stellingen die later van belang zullen zijn bij het onderzoek naar het spectrum van differentiaal operatoren.

Definitie. Laat X, Y genormeerde ruimtes zijn. Een lineaire transformatie T is compact wanneer voor elke begrensde rij $\{x_n\}$ in X, de rij $\{Tx_n\}$ in Y een convergente deelrij bevat.

Stelling 3.5.1. *Laat X, Y genormeerde ruimtes zijn en laat T een begrensde operator van X naar Y zijn. Als T een eindige rang heeft dan is T compact.*

Bewijs. Aangezien T een eindige rang heeft is de ruimte $R(T)$ een eindig dimensionale genormeerde ruimte. Voor elke begrensde rij $\{x_n\}$ in X is de rij $\{Tx_n\}$ begrensd in $R(T)$, dus (Bolzano-Weierstrass Theorem) moet deze rij een convergente deelrij bevatten. En dus is T compact.

Stelling 3.5.2. *Laat X een genormeerde ruimte zijn en Y een Banach ruimte. Laat $\{T_n\}$ een rij compacte operatoren zijn met $T_n : X \to Y$ convergerend naar een begrensde operator $T : X \to Y$. Dan is de operator T compact.*

Bewijs. Laat $\{x_k\}$ een begrensde rij in X zijn met $||x_k|| \leq C$. T_1 is een compacte operator en dus heeft $\{x_k\}$ een deelrij, zeg $\{x_{k1}\}$, zodat $\{T_1 x_{k1}\}$ convergeert. Ook T_2 is compact en dus heeft $\{x_{k1}\}$ een deelrij $\{x_{k2}\}$ zodat $\{T_2 x_{k2}\}$ convergeert. Als we zo verder gaan zien we dus dat er een deelrij $\{x_{kn}\}$ bestaat van $\{x_{k(n-1)}\}$ zodat $\{T_n x_{kn}\}$ convergeert. Laat $z_i = x_{ki}$. De rij $\{T_n z_i\}$ convergeert dus wanneer $i \to \infty$ voor elke T_n. We hebben dus:

$$\begin{aligned} ||Tz_j - Zz_i|| &\leq ||Tz_j - T_n z_j|| + ||T_n z_j - T_n z_i|| + ||T_n z_i - Tz_i|| \\ &\leq 2C||T - T_n|| + ||T_n z_j - T_n z_i||. \end{aligned} \tag{43}$$

$\forall \epsilon > 0$ kunnen we n zo groot nemen dat geldt:

$$2C||T - T_n|| < \frac{\epsilon}{2} \tag{44}$$

En aangezien $\{T_n z_i\}$ convergeert, kunnen we i, j zogroot nemen dat:

$$||T_n z_j - T_n z_i|| < \frac{\epsilon}{2} \tag{45}$$

En dus is $\{Tz_i\}$ een Cauchy rij en aangezien Y een Banach ruimte is, vinden we dus dat T een compacte operator is.

Merk op dat het in het algemeen niet zo is dat elke compacte operator een limiet van operatoren van eindige rang is. In een Hilbert ruimte is dit wel zo.

3.6 Hilbert-Schmidt operatoren

In deze paragraaf wordt de Hilbert-Schmidt operator gedefinieerd en zullen we bewijzen dat dit een compacte operator is. Dit is van belang omdat de Greense functie ook een Hilbert-Schmidt operator is, en dus ook een compacte operator is. In de volgende paragraaf zullen we bekijken welke belangrijke eigenschappen compacte operatoren hebben, om het gebied van de spectraaltheorie.

Definitie. Laat $\{e_\alpha\}$ met $\alpha \in A$ een orthonormale basis in de Hilbert ruimte H zijn. Een begrensde lineaire operator T is een Hilbert-Schmidt operator als geldt:

$$||T|| = \{\sum_{\alpha \in A} ||Te_\alpha||^2\}^{1/2} < \infty \tag{46}$$

Voor het bewijs dat er voor elke Hilbert ruimte ook inderdaad een orthonormale basis gekozen kan worden verwijs ik graag naar [3].

Stelling 3.6.1. *Een Hilbert-Schmidt operator is compact.*

Bewijs. Laat $\{e_\alpha\}$ met $\alpha \in A$ een orthonormale basis in de Hilbert ruimte H zijn en T een Hilbert-Schmidt operator. Aangezien geldt:

$$||T|| = \{\sum_{\alpha \in A} ||Te_\alpha||^2\}^{1/2} < \infty \tag{47}$$

zijn er een aftelbaar aantal elementen $|Te_\alpha|^2$ ongelijk aan 0. Ook geldt dat voor elke integer n een eindige deelverzameling $A_n \subset A$ bestaat zodat

$$\sum_{\alpha \notin A} ||Te_\alpha||^2 < \frac{1}{n^2} \tag{48}$$

Laat voor elke n de lineaire operator T_n als volgt gedefinieerd zijn: $T_n e_\alpha = Te_\alpha$ als $\alpha \in A_n$ en $T_n e_\alpha = 0$ als $\alpha \notin A_n$. Het bereik van T_n is nu eindig dimensionaal en dus is T_n compact. Verder geldt:

$$||T - T_n||^2 = \sum_{\alpha \notin A} ||Te_\alpha||^2 < \frac{1}{n^2} \tag{49}$$

en dus: $|T - T_n| \leq ||T - T_n|| < \frac{1}{n}$. Ofwel T is compact.

Voor de volgende stelling heb ik gebruik gemaakt van [3]. In dit boek is voor de belangstellende ook meer te vinden over integraal operatoren.

Stelling 3.6.2. *De operator* $R : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ *gedefinieerd door* $Rf(x) = \int_a^b g(x,y)f(y)dy$ *met* $\int_{-\infty}^{\infty} |g(x,y)|^2 dxdy < \infty$ *is een Hilbert-Schmidt operator.*

Bewijs. Laat $\{e_\alpha\}$ met $\alpha \in A$ weer een orthonormale basis in de Hilbert ruimte H. Voor elke $x \in [a,b]$ en $\alpha \in A$ hebben we:

$$(Re_\alpha)(x) = \int_a^b g(x,y)e_\alpha(y)dy = (g_x, \overline{e}_\alpha) \tag{50}$$

Hierbij is $\overline{e}_\alpha$ de complex geconjungeerde van e_α, De rij $\{\overline{e}_\alpha\}$ is dus ook een orthonormale basis. En dus

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha \in A} ||Re_\alpha||^2 &= \sum_{\alpha \in A} \int_a^b |(g_x, \overline{e}_\alpha)|^2 dx \\ &= \int_a^b \sum_{\alpha \in A} |(g_x, \overline{e}_\alpha)|^2 dx \\ &= \int_a^b ||g_x||^2 ds < \infty \end{aligned} \tag{51}$$

En dus is R een Hilbert-Schmidt operator.

3.7 Het spectrum

Definitie. Laat K, H complexe Hilbert ruimtes zijn, laat I de identiteitsoperator zijn en $A : D(A) \subset K \to H$. Het spectrum van A, aangegeven met $\sigma(A)$, is als volgt gedefinieerd:

$$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} : (A - \lambda I) \text{ is niet inverteerbaar}\} \tag{52}$$

Er zijn twee mogelijkheden waarom $(A - \lambda I)$ niet inverteerbaar zou kunnen zijn. Ten eerst zou het kunnen zijn dat $(A - \lambda I)$ een kern heeft. Als dit zo is zeggen we dat λ tot het discrete spectrum van A, $\sigma_d(A)$, behoort. Of het kan zijn dat de operator $(A - \lambda I)$ wel injectief is maar niet surjectief. In dat geval zeggen we dat λ tot het continue spectrum van A, $\sigma_c(A)$, behoort.

We zien dat de operator A alleen inverteerbaar is als $\lambda = 0$ niet in het spectrum van A voorkomt.

Definitie. Laat K, H complexe Hilbert ruimtes zijn en $A : D(A) \subset K \to H$. De resolvent verzameling van A, aangegeven met $\rho(A)$, is als volgt gedefinieerd:

$$\rho(A) = \mathbb{C} \backslash \sigma(A) \tag{53}$$

Stelling 3.7.1. *Laat H een complexe Hilbert ruimte zijn en $A : D(A) \subset H \to H$ een zelfgeadjungeerde operator dan is het spectrum van A reëel.*

Bewijs. Zeg $Ax = \lambda x$ met $x \neq 0$. Er geldt:

$$\lambda\langle x, x\rangle = \langle x, Ax\rangle = \langle Ax, x\rangle = \bar{\lambda}\langle x, x\rangle \tag{54}$$

ofwel $\lambda = \bar{\lambda}$ en dus $\lambda \in \mathbb{R}$

Stelling 3.7.2. *Laat K een Hilbertruimte zijn, met T een compacte operator op K. Dan geldt voor elke reële $t > 0$ dat de verzameling van alle distincte eigenwaarden λ van T met $\lambda \geq t$ eindig is.*

Bewijs. We stellen dat er een $t_0 > 0$ bestaat waarvoor er een oneindige rij distincte eigenwaarden $\{\lambda_n\}$ van T, met $|\lambda \geq t_0|$ voor alle n is. Laat $\{e_n\}$ een willekeurige rij met corresponderende eenheidseigenvectoren zijn. We contrueren nu, met behulp van inductie, een geordende rij van eenheidseigenvectoren $\{y_n\}$. Zeg $\{y_1 = e_1\}$. Voor $k \geq 1$ geldt dat de verzameling $\{e_1, \ldots, e_k\}$ lineair onafhankelijk is en dus is de verzameling $M_k = \mathrm{Sp}\{e_1, \ldots, e_k\}$ k-dimensionaal en gesloten. Elk element $e \in M_k$ kan geschreven worden als: $e = a_1 e_1 + \cdots + a_k e_k$. We hebben nu:

$$(T - \lambda_k I)\, e = a_1 (\lambda_1 - \lambda_k)\, e_1 + \cdots + a_{k-1} (\lambda_{k-1} - \lambda_k)\, e_{k-1} \tag{55}$$

en dus geldt als $e \in M_k$:

$$(T - \lambda_k I)\, e \in M_{k-1} \tag{56}$$

en dus ook:

$$Te \in M_k \tag{57}$$

Omdat M_k een gesloten deelverzameling van M_{k+1} is en ongelijk aan M_{k+1}, is het orthogonaal complement van M_k ook een niet triviale deelverzameling van M_{k+1}. Er bestaat dus een eenheidseigenvector $y_{k+1} \in M_{k+1}$ zodat voor alle $e \in M_k$ geldt: $(y_{k+1}, e) = 0$ en $||y_{k+1} - e|| \geq 1$. Dit proces herhalend stellen we een geordende rij $\{y_n\}$ op. Met deze constructie van $\{y_n\}$ geldt nu voor alle m, $n \in \mathbb{N}$ met $n > m$,

$$||Ty_n - Ty_m|| = |\lambda_n| ||y_n - \lambda_n^{-1} [-(T - \lambda_n)y_n + Ty_m] || \geq |\lambda_n| \geq t_0 \tag{58}$$

aangezien $-(T - \lambda_n)y_n + Ty_m \in M_{n-1}$.
Hieruit volgt dat de rij $\{Ty_n\}$ geen convergente deelrij kan bevatten en dus dat T niet compact is. Dit is een tegenspraak.

Stelling 3.7.3. *Laat K een Hilbertruimte zijn, met T een compacte operator op K. De verzameling $\sigma_d(T)$ is hoogstens aftelbaar. Als $\{\lambda_n\}$ een rij distincte eigenwaarden van T is geldt* $\lim_{n\to\infty} \lambda_n = 0$.

Bewijs. We verkrijgen deze stelling door de vereniging van de eindige verzamelingen eigenwaarden λ uit stelling (3.7.2) te nemen met $|\lambda| \geq r^{-1}$, $r = 1, 2, \ldots$.

3.8 De resolvent operator

We bekijken het probleem:

$$-pu'' + qu = \lambda u, \ u(0) = u(a) = 0 \tag{59}$$

waarbij p, q gegeven reële functies zijn met $p > 0$ en $\lambda \in \mathbb{C}$. Definieer $A : D(A) \subset L^2([0, a]) \to L^2([0, a])$ door

$$Au = -pu'' + qu \tag{60}$$

$$D(A) = \{u \in H^2((0, a)) | u(0) = u(a) = 0\} \tag{61}$$

In deze paragraaf zullen we het spectrum van A bestuderen.

Definitie. Als $\mu \in \rho(A)$, dan definiëren we de resolvent operator $R_\mu : H \to H$ door:

$$R_\mu = (\mu I - A)^{-1} \tag{62}$$

Eerst zullen we aantonen dat voor λ negatief genoeg, de oplossing van probleem (59) $u = 0$ is, ofwel dat λ dan geen eigenwaarde van A is. We nemen het inprodukt van probleem (59) met u en krijgen:

$$\int_0^a \{p|u'|^2 + q|u|^2\} dx = \lambda \int_0^a |u|^2 dx \tag{63}$$

Zeg $\alpha = \min_{0 \leq x \leq a} p(x)$ en $\beta = \min_{0 \leq x \leq a} q(x)$. Wanneer we deze constanten in het resultaat verwerken krijgen we:

$$\alpha \int_0^a |u'|^2 dx + (\beta - \lambda) \int_0^a |u|^2 dx \leq 0 \tag{64}$$

Hierin zien we dus dat wanneer $\lambda < \beta$ dat de enige mogelijke oplossing $u = 0$ is. Ofwel de kernel van $A - \lambda I$ is $\{0\}$ en dus bestaat de Greense functie g_λ van $A - \lambda I$. En dus geldt voor $\lambda < \beta$ dat $\lambda \in \rho(A)$.

Voorbeeld. We bekijken de operator $-\nabla^2 : H^2((0,a)) \subset L^2([0,a]) \to L^2([0,a])$. We nemen dus $p = 1$ en $q = 0$ in probleem (59) en vinden dat $\lambda \in \rho(-\nabla^2)$ $\forall \lambda < 0$.

De zelfgeadjungeerde resolvent operator R_λ wordt gegeven door:

$$R_\lambda = (\lambda I - A)^{-1} : L^2([0,a]) \to L^2([0,a]), R_\lambda f(x) = -\int_0^a g_\lambda(x,y) f(y) dy \tag{65}$$

Aangezien g_λ continu is vinden we:

$$\int_0^a \int_0^a [g_\lambda(x,y)]^2 dx dy < \infty \tag{66}$$

Dit betekent dat R_λ een Hilbert-Schmidt operator is en dus compact.

Volgens de spectraaltheorie voor compacte, zelfgeadjungeerde operatoren is er een orthonormale basis van $L^2([0,a])$ bestaande uit eigenvectoren $\{u_n | n \in \mathbb{N}\}$ van R_λ met eigenwaarden $\{\mu_n | n \in \mathbb{N}\}$ zodat $\mu_n \mapsto 0$ als $n \to \infty$. Omdat geldt: $(\lambda I - A) R_\lambda = I$ hebben we $u_n \in D(A)$ en $A u_n = \lambda_n u_n$ met

$$\beta \leq \lambda_n = \lambda - \frac{1}{\mu_n} \tag{67}$$

zodat $\lambda_n \to \infty$ wanneer $n \to \infty$. Ofwel de gedefinieerde operator A heeft een complete orthonormale verzameling eigenvectoren die een basis van $L^2([0,a])$ vormen.

3.9 Variatie van constanten

Hoewel het bepalen van het spectrum met behulp van de Greense functie mijns inziens een hele mooie methode is, is het niet altijd even makkelijk in gebruik. Een makkelijker toepasbare methode om spectra te bepalen is het oplossen van de vergelijking:

$$(A - \lambda I) u = f \tag{68}$$

waarbij A wederom gedefinieerd als in vergelijking (22), λ een constante en $f \in L^2$ een gegeven functie. Deze inhomogene vergelijking kunnen we oplossen met behulp van de methode van variatie van constanten, die hieronder verder toegelicht zal worden. Na deze vergelijking opgelost te hebben, kijken we voor welke waarden van λ er bij een gegeven f *geen* unieke oplossing $u \in L^2$ gevonden kan worden. Als er namelijk geen unieke oplossing is, is de operator $(A - \lambda I)$ *niet* inverteerbaar en geldt per definitie dan $\lambda \in \sigma(A)$.

Wellicht vraagt u zich af waarom er hier niet voor gekozen wordt de homogene vergelijking op te lossen. Dit heeft twee redenen, ten eerste in de homogene vergelijking de vergelijking die hoort bij een discreet spectrum en ten tweede is het na het vinden van eigenwaarden aan de hand van de homogene vergelijking erg lastig om vervolgens te bepalen of de gehele verzameling eigenwaarden gevonden is.

We zullen nu bespreken hoe we differentiaalvergelijkingen op kunnen lossen met behulp van de methode van variatie van constanten. Tevens laten we zien hoe dit gerelateerd is aan Greense functies.

Elke lineaire n^e orde differentiaalvergelijking is om te schrijven naar een 1^e orde differentiaalstelsel gegeven door:

$$Y' - B(x)Y = F, \text{ met } Y(s) = Y_0 \tag{69}$$

Hierbij is $B(x)$ een $(n \times n)$-matrix en zijn Y en F n-vectoren.

Voorbeeld. Stel we willen de differentiaalvergelijking:

$$y'' - b(x)y' - c(x)y = f(x) \tag{70}$$

waarbij $b \in C^1(\mathbb{R})$, $c \in C(\mathbb{R})$ en $f \in L^2$ een gegeven functie, als een 1^e orde stelsel schrijven. We maken dan gebruik van de substitutie

$$y' = v \tag{71}$$

zodat

$$y'' = v' = b(x)v + c(x)y + f \tag{72}$$

We verkrijgen dan het 1^e orde stelsel:

$$Y' - A(x)Y = F \tag{73}$$

waarbij $Y = \begin{bmatrix} y \\ v \end{bmatrix}$, $A(x) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ c(x) & b(x) \end{bmatrix}$ en $F = \begin{bmatrix} 0 \\ f(x) \end{bmatrix}$.

Het oplossen van zo een 1^e orde stelsel kunnen we in verschillende stappen doen. Eerst lossen we op:

$$Y_s' = B(x)Y_s \quad \text{met} \quad Y_s(s) = I \tag{74}$$

waarbij I de identiteit is. De oplossing van dit stelsel wordt ook wel de fundamentele oplossing genoemd en de oplossing $Y_s(x)$ wordt gegeven door $\Omega(x, s)$.

De volgende stap is het oplossen van het homogene stelsel. Deze oplossing is hetzelfde als de fundamentele oplossing, maar nu komt er een keuze van parameter $Y(s) = Y_0$ bij. De oplossing wordt gegeven door:

$$Y(x) = \Omega(x, s)Y_0 \tag{75}$$

Stap drie is het oplossen van de inhomogene oplossing, gegeven in vergelijking (69). Deze oplossing wordt gegeven door de zogenaamde 'variatie van constanten' formule.

$$Y(x) = \Omega(x, s)Y_0 + \int_s^x \Omega(x, u)F(u)du \tag{76}$$

Hierbij kunnen Y_0 en $F(u)$ vrij gekozen worden.

De relatie met Greense functie vinden nu door $Y_0 = 0$ te kiezen en het stelsel onafhankelijk van F te maken. We krijgen dan de vergelijking:

$$Y' = B(x)Y + \delta(x - u) \quad \text{met} \quad Y(0) = 0 \tag{77}$$

De oplossing van dit probleem wordt gegeven door de Greense functie:

$$Y(x) = G_u(x, 0) \quad \text{met} \quad G_u(0, 0) = 0 \tag{78}$$

Wanneer we vervolgens vergelijking (69) oplossen, met Y(0)=0, dan vinden we de oplossing:

$$Y(x) = \int_0^x G_u(x, 0)f(u)du \tag{79}$$

En dit is precies de Greense functie zoals we deze in paragraaf 3.4 hebben gezien.

3.10 De WKB benadering

Soms worden oplossingen van differentiaalvergelijkingen gegeven door ingewikkelde reeksen. Omdat het lastig is om hiervan het verloop te bepalen, is het soms makkelijker om gebruik te maken van benaderingen. Een veel gebruikte benadering is de WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) methode. In deze paragraaf zullen we de werking van deze methode in het kort toelichten. Hierbij heb ik gebruik gemaakt van [1].

We bekijken de differentiaalvergelijking

$$\psi'' + k^2(x)\psi = 0 \tag{80}$$

waarbij $k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E - V(x))}$. Hierbij gaan we ervan uit dat $E > V(x)$. Over het algemeen is ψ een complexe functie in de vorm:

$$\psi(x) = e^{i\phi(x)} \tag{81}$$

We kunnen nu vergelijking (80) schrijven als:

$$\left[i\phi''(x) - (\phi'(x))^2 + k^2(x)\right] e^{i\phi(x)} = 0 \tag{82}$$

De WKB benadering is nu als volgt:

$$|\phi''(x)| \ll \begin{cases} (\phi'(x))^2 \\ k^2(x) \end{cases} \tag{83}$$

We lossen op:

$$-(\phi'(x))^2 + k^2(x) = 0 \tag{84}$$

En vinden:

$$\phi(x) = \pm \int k(x)dx \tag{85}$$

Vervolgens stoppen de $\phi''(x) = \pm k'(x)$ weer terug in vergelijking (82) en verkrijgen:

$$\phi(x) = \pm \int \sqrt{\pm ik'(x) + k^2(x)}dx \tag{86}$$

Tenslotte maken we de benadering $k'(x) \ll k(x)$ en vinden we:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \pm \int \sqrt{\pm \frac{ik'(x)}{k^2(x)} + 1}k(x)dx \\ &\simeq \pm \int \left[1 \pm \frac{i}{2}\frac{k'(x)}{k^2(x)} + \dots\right] k(x)dx \\ &\simeq \pm \int k(x)dx + \frac{i}{2}\int \frac{k'(x)}{k^2(x)}dx + \dots \\ &\simeq \pm \int k(x)dx + \frac{i}{2}\log k(x) \end{aligned} \tag{87}$$

Dus geldt:

$$\begin{aligned} e^{i\phi(x)} &\simeq e^{\pm i\int k(x)dx}e^{-\frac{1}{2}\log(k(x))} \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{k(x)}}e^{\pm i\int k(x)dx} \end{aligned} \tag{88}$$

Zo zien we dat we als algemene WKB benadering krijgen:

$$\psi_{WKB}(x) = A_1\frac{1}{\sqrt{k(x)}}e^{+i\int k(x)dx} + A_2\frac{1}{\sqrt{k(x)}}e^{-i\int k(x)dx} \tag{89}$$

Voor $E < V(x)$ definiëren we:

$$\kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V(x) - E)} \tag{90}$$

Op dezelfde manier vinden we de WKB benadering voor $E < V(x)$:

$$\psi_{WKB}(x) = A_1'\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}e^{+\int \kappa(x)dx} + A_2'\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}e^{-\int \kappa(x)dx} \tag{91}$$

Deze WKB benaderingen werken prima zolang $E < V(x)$ of $E > V(x)$, maar rond de zogenaamde draaipunten, waar $E \simeq V(x)$ gaat deze benadering naar

oneindig en is het een erg slechte benadering. Daar moet dus nog wat aan gedaan worden. We lossen dit probleem op met het gebruik van zogenaamde plakfuncties.
We bekijken het draaipunt x_0 en gaan er vanuit dat $E < V(x)$ links van x_0 en $E > V(x)$ rechts van x_0. Omdat we de potentiaal alleen dichtbij het draaipunt bekijken kunnen we de potentiaal hier lineair benaderen:

$$V(x) \simeq E + V'(x_0)(x - x_0) \tag{92}$$

We lossen de Schrödingervergelijking op aan de hand van deze lineaire potentiaal. Laat $z = \alpha(x - x_0)$ zijn, waarbij $\alpha = \left[\frac{2m|V'(x_0)|}{\hbar^2}\right]^{1/3}$. Dan kunnen we de Schrödingervergelijking herschrijven tot:

$$\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \tag{93}$$

Deze vergelijking is beter bekend als de Airy vergelijking, met als oplossingen Airy functies, die we $Ai(z)$ en $Bi(z)$ zullen noemen. In de tabel hieronder staan een aantal eigenschappen van de Airy functies.

Differentiaalvergelijking:		$\frac{d^2y}{dz^2} = zy$	
Oplossingen:		Lineaire combinaties van de Airy functies	
Integraal representatie:		$Ai(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)ds$	
		$Bi(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[e^{-\frac{s^3}{3}+sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)\right]ds$	
Asymptotisch gedrag:			
$Ai(z) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}}$	$z \gg 0$	$Ai(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$	$z \ll 0$
$Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{\frac{2}{3}z^{3/2}}$		$Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$	

De golffunctie, ofwel plakfunctie, die de WKB benaderingen nu als het ware aan elkaar moet plakken, wordt nu gegeven door:

$$\psi_p(x) = aAi(z) + bBi(z) \tag{94}$$

De constanten, gegeven in vergelijkingen (89) en (91), zijn niet geheel onafhankelijk van elkaar. We zullen nu deze afhankelijkheid bekijken. Hiervoor gebruiken we nog steeds de lineaire benadering van de potentiaal. We kunnen de vergelijkingen (89) en (91) in het geval van de lineaire potentiaal schrijven als respectievelijk:

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{A_1}{(-z)^{1/4}}e^{i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}} + \frac{A_2}{(-z)^{1/4}}e^{-i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}} \tag{95}$$

en

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{A_1'}{z^{1/4}}e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} + \frac{A_2'}{z^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \tag{96}$$

Als we vergelijking (96) nu vergelijken met de plakfunctie voor $z \gg 0$:

$$\psi_p(x) = \frac{a}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \tag{97}$$

Dan zien we dat moet gelden:

$$A_1' = \frac{b}{\sqrt{\pi}} \quad \text{en} \quad A_2' = \frac{a}{2\sqrt{\pi}} \tag{98}$$

Voor de plakfunctie $z \ll 0$ geldt:

$$\begin{aligned}
\psi_p &= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{b}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \\
&= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left(e^{i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}} e^{i\frac{\pi}{4}} - e^{-i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}} e^{-i\frac{\pi}{4}}\right) \\
&\quad + \frac{b}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \frac{1}{2} \left(e^{i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}} e^{i\frac{\pi}{4}} + e^{-i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}} e^{-i\frac{\pi}{4}}\right) \\
&= \left(\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2}\right) e^{i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{1}{(-z)^{1/4}} (e^{i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}}\right) \\
&\quad + \left(-\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2}\right) e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{1}{(-z)^{1/4}} (e^{-i\frac{2}{3}(-z)^{3/2}}\right)
\end{aligned} \tag{99}$$

Dit betekent voor de constanten A_1 en A_2 dat:

$$A_1 = \left(\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2}\right) e^{i\frac{\pi}{4}} \quad \text{en} \quad A_2 = \left(-\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2}\right) e^{-i\frac{\pi}{4}} \tag{100}$$

De constanten A_1' en A_2' kunnen vervolgens voor elk individueel probleem berekend worden.

3.11 Voorbeelden

In deze paragraaf komen we terug op de voorbeelden die we in hoofdstuk 2 besproken hebben. Dit keer zal ik echter met behulp van de theorie die we in dit hoofdstuk besproken hebben, berekenen welk soort spectrum bij elk probleem hoort.

3.11.1 De oneindige potentiaalput

We beschouwen het kwantummechanisch probleem van de oneindige potentiaalput, zoals in paragraaf 2.1 gedefinieerd. We hebben dus te maken met het volgende probleem

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} \quad , \quad \psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{101}$$

waarbij $H : H^2((0,a)) \subset L^2([0,a]) \to L^2([0,a])$.

Dit is hetzelfde probleem als we in paragraaf 3.8 hebben besproken, maar we hebben hier $p = \frac{\hbar^2}{2m}$ en $q = 0$ genomen. We zien dus gelijk dat $\beta = 0$ en alle eigenwaarden van H positief moeten zijn. Verder heeft H dus een complete orthonormale verzameling eigenvectoren die een basis van $L^2([0,a])$ vormen. Ofwel het spectrum van H is oneindig discreet.

Om het spectrum te berekenen moeten we nagaan voor welke λ $(H-\lambda I)\psi(x) = g(x)$ voor een gegeven $g(x)$ geen unieke oplossing $\psi(x)$ heeft. Als $(H-\lambda I)\psi(x) = g(x)$ geen unieke oplossing heeft geldt namelijk dat $(H-\lambda I)$ niet inverteerbaar is en dat $\lambda \in \sigma(H)$.

We kunnen $(H-\lambda I)\psi(x) = g(x)$ schrijven als het 1^e orde stelsel:

$$\frac{d\Psi}{dx} = A\Psi(x) + G(x) \tag{102}$$

waarbij $\Psi = \begin{bmatrix} \psi \\ v \end{bmatrix}$, $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\lambda & 0 \end{bmatrix}$ en $G = \begin{bmatrix} 0 \\ -g(x) \end{bmatrix}$.

De fundamentele oplossing wordt gegeven door e^{Ax} en dus vinden we de homogene oplossing:

$$\Psi_h(x) = \psi_0 e^{Ax} \tag{103}$$

Met behulp van de methode van variatie van constanten vinden we nu de inhomogene oplossing:

$$\Psi(x) = \psi_0 e^{Ax} + \int_0^x e^{A(x-u)} G(u) du \tag{104}$$

Verder geldt: $\det(\mu I - A) = \mu^2 + \lambda$. De twee eigenwaarden van A zijn dus: $\mu_1 = i\sqrt{\lambda}$ en $\mu_2 = -i\sqrt{\lambda}$. We kunnen de e-macht schrijven als:

$$e^{Ax} = \frac{1}{\mu_2 - \mu_1} \begin{bmatrix} \mu_2 e^{\mu_1 x} - \mu_1 e^{\mu_2 x} & e^{\mu_2 x} - e^{\mu_1 x} \\ \mu_1\mu_2 \left(e^{\mu_1 x} - e^{\mu_2 x}\right) & \mu_2 e^{\mu_2 x} - \mu_1 e^{\mu_1 x} \end{bmatrix} \tag{105}$$

Omdat alleen $\psi(x)$ belangrijk voor ons is herschrijven we (104) als:

$$\psi(x) = \psi_{01} e^{i\sqrt{\lambda}x} + \psi_{02} e^{-i\sqrt{\lambda}x} - \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_0^x \frac{e^{i\sqrt{\lambda}(x-u)} - e^{-i\sqrt{\lambda}(x-u)}}{2i} g(u) du \tag{106}$$

We kunnen deze vergelijking apart bekijken voor $\lambda > 0$ en voor $\lambda < 0$.
Voor $\lambda < 0$ krijgen we:

$$\psi_{\lambda<0} = \psi_1' \sinh\sqrt{|\lambda|}x + \psi_2' \cosh\sqrt{|\lambda|}x - \frac{1}{\sqrt{|\lambda|}} \int_0^x \sinh\sqrt{|\lambda|}(x-u) g(u) du \tag{107}$$

En voor $\lambda > 0$ krijgen we:

$$\psi_{\lambda>0} = \psi_1 \sin\sqrt{\lambda}x + \psi_2 \cos\sqrt{\lambda}x - \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_0^x \sin\sqrt{\lambda}(x-u) g(u) du \tag{108}$$

Vervolgens kijken we naar de gegeven randvoorwaarden: $\psi(0) = \psi(a) = 0$.
We bekijken eerst het geval dat $\lambda < 0$. We vinden:

$$\psi_2' = 0 \quad \text{en} \quad \psi_1' = \frac{-\frac{1}{\sqrt{|\lambda|}} \int_0^a \sinh\sqrt{|\lambda|}(a-u) g(u) du}{\sinh\sqrt{|\lambda|}a} \tag{109}$$

We schrijven voor vergelijking (107) :

$$\psi_{\lambda<0} = \frac{-\int_0^a \sinh\sqrt{|\lambda|}(a-u)g(u)du}{\sqrt{|\lambda|}\sinh\sqrt{|\lambda|}a}\sinh\sqrt{|\lambda|}x - \frac{\int_0^x \sinh\sqrt{|\lambda|}(x-u)g(u)du}{\sqrt{|\lambda|}} \tag{110}$$

We willen weten of $\psi_{\lambda<0} \in L^2([0,a])$. Het enige waar we naar moeten kijken is de noemer van de coëfficient van de homogene oplossing. Deze noemer is enkel 0 als $\lambda = 0$ en dus hoeven we ons daar geen zorgen over te maken. Ofwel $\psi_{\lambda<0} \in L^2([0,a])$ voor alle $\lambda < 0$ en dus $\lambda \in \rho(H)$ voor $\lambda < 0$.
Vervolgens bekijken we $\lambda > 0$. We vinden dat:

$$\psi_2 = 0 \quad \text{en} \quad \psi_1 = \frac{-\frac{1}{\sqrt{\lambda}}\int_0^a \sin\sqrt{\lambda}(a-u)g(u)du}{\sin\sqrt{\lambda}a} \tag{111}$$

We krijgen voor vergelijking (108) :

$$\psi_{\lambda>0} = \frac{-\int_0^a \sin\sqrt{\lambda}(a-u)g(u)du}{\sqrt{\lambda}\sin\sqrt{\lambda}a}\sin\sqrt{\lambda}x - \frac{\int_0^x \sin\sqrt{\lambda}(x-u)g(u)du}{\sqrt{\lambda}} \tag{112}$$

Nu willen we weten of $\psi_{\lambda>0}$ een element van $L^2([0,a])$ is. Omdat $x \in [0,a]$ en we weten al dat $\psi(0) = \psi(a) = 0$ hoeven we weer enkel te kijken naar de noemer van de coëfficient van de constante van de homogene oplossing. Deze noemer is gelijk aan 0 voor $\sqrt(\lambda)a = n\pi$ met $n = 1, 2, 3, \ldots$. Dus voor $\lambda = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$ met $n = 1, 2, 3, \ldots$ geldt $\psi_{\lambda>0} \notin L^2([0,a])$ en dus $\lambda \in \sigma(H)$.
Voor $\sqrt(\lambda)a \neq n\pi$ hebben we een mooie analytische functie en geldt: $\psi_{\lambda>0} \in L^2([0,a])$.
We hebben dus te maken met een positief oneindig discreet spectrum, met waarden:

$$\lambda = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad \text{met} \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{113}$$

Voor de volledigheid zullen we ook de Greense functie $g(x,y)$ construeren. Doordat we hier te maken hebben met een randvoorwaarde probleem, is de Greense functie niet moeilijk te construeren. We constueren de Greense functie door
$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \lambda\right)\psi = 0$ tweemaal te integreren, waarbij we uitgaan van $\psi(x) = \int_0^a g(x,y)\psi(y)dy$. Na eenmaal integreren vinden we:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\psi}{dx} = \int_0^x \lambda\psi(x)dx + C \tag{114}$$

waarbij C de onbekende waarde van $\psi'(0)$. Na de tweede integratie krijgen we:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi = \int_0^x (x-y)\psi(y)dy + Cx + D \tag{115}$$

waarbij $D = \psi(0) = 0$. Gebruikmakend van de randvoorwaarde $\psi(a) = 0$ vinden we C en kunnen we ψ als volgt uitdrukken:

$$\psi(x) = \int_0^x \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\frac{y}{a}(a-x)\psi(y)dy + \int_x^a \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\frac{x}{a}(a-y)\psi(y)dy \tag{116}$$

Voor de Greense functie $g(x,y)$ vinden we dus:

$$g(x,y) = \begin{cases} \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\frac{y}{a}(a-x) & y < x \\ \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\frac{x}{a}(a-y) & y > x \end{cases} \tag{117}$$

3.11.2 Het vrije deeltje

Zoals eerder besproken is dit het zelfde probleem als het probleem van de oneindige potentiaalput, maar met andere randvoorwaarden. Vergelijkingen (108) en (107) zijn dus ook voor dit probleem geldig. We kijken naar de randvoorwaarde $\psi \in L^2(\mathbb{R})$.

Voor $\lambda < 0$ is de oplossing gegeven in vergelijking (107). De particuliere oplossing is de integraal over een onbegrensde functie en dus is de integraal zelf onbegrensd. De fundamentele oplossing bestaat uit een sinh en een cosh en is dus ook onbegrensd. Door de onbegrensdheid van de fundamentele oplossing, kunnen we de constanten ψ_1' en ψ_2' zo kiezen dat de homogene oplossing voor de onbegrensdheid van de particuliere oplossing compenseerd. De gehele oplossing kunnen we dus voor iedere $g(u)$ in $L^2(\mathbb{R})$ kiezen. Hieruit volgt dat $(H - \lambda I)$ inverteerbaar is voor alle $g(u)$ en dus geldt $\lambda \in \rho(H)$ voor $\lambda < 0$.

Voor $\lambda > 0$ is de oplossing gegeven in vergelijking (108). De particuliere oplossing bestaat uit een integraal over het product van een sinus en een element uit L^2: $g(u)$. Het product hiervan ligt weer in L^2, maar de integraal hierover kan onbegrensd zijn. De fundamentele oplossing bestaat uit een sin en een cos, en deze oplossing is dus begrensd. Omdat de fundamentele oplossing begrensd is kunnen ψ_1 en ψ_2 uit de homogene oplossing niet zo gekozen worden dat de homogene oplossing de onbegrensdheid van de particuliere oplossing compenseert. $\psi_{\lambda>0}(x)$ is dus niet perse een element van $L^2(\mathbb{R})$ en dus bestaat $(H - \lambda I)^{-1}$ niet voor $\lambda > 0$.
Dit betekent dat $\lambda \in \sigma(H)$ voor alle $\lambda > 0$.

Merk op dat de homogene oplossing van dit probleem, gegeven in vergelijking (103), geen element van $L^2(\mathbb{R})$ is, maar van $L^\infty(\mathbb{R})$. De reden dat $(H - \lambda I)$ voor $\lambda > 0$ niet inverteerbaar is, is niet omdat $(H - \lambda I)$ een kern heeft, maar omdat $(H - \lambda I)$ niet surjectief is. Het spectrum van H is dus een positief oneindig continu spectrum.

3.11.3 De harmonische oscillator

Zoals in paragraaf 2.3 besproken, heeft de harmonische oscillator een discreet spectrum waarbij de eigenfuncties uitgedrukt kunnen worden in Hermite functies. Het is echter lastig om hier mee te rekenen en dus zullen we het spectrum van de harmonische oscillator berekenen met de WKB benadering. Hoewel dit een benadering is kunnen de eigenwaarden van dit probleem met deze methode exact gevonden worden.

We beginnen weer met het oplossen van de homogene vergelijking. We schrijven deze homogene vergelijking eerst zoals in vergelijking (80) beschreven. We krijgen:

$$\psi''(x) + g(x)\psi(x) = 0 \tag{118}$$

waarbij voor $E > \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

$$g(x) = k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \tag{119}$$

en voor $E < \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

$$g(x) = -\kappa^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - E\right) \tag{120}$$

Voor $E < 0$ zijn en geen keerpunten en vinden we de WKB benadering:

$$\psi_{WKB} = \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(A_1 e^{\int_0^x \kappa(x)dx} + A_2 e^{-\int_0^x \kappa(x)dx}\right) \tag{121}$$

Voor $E > 0$ vinden we twee keerpunten: $x_1 = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ en $x_2 = +\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$. We bekijken eerst de benadering rond het punt x_1. Links van het keerpunt geldt $E < V$ en rechts geldt $E > V$, we vinden dus:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(A_1' e^{\int_x^{x_1} \kappa(x')dx'} + A_2' e^{-\int_x^{x_1} \kappa(x')dx'}\right) & x \leq x_1 \\ \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left(\left[\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2}\right] e^{i\int_{x_1}^{x} k(x')dx' + \frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2}\right] e^{-i\int_{x_1}^{x} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}}\right) & x_1 \leq x \end{cases} \tag{122}$$

Hierbij heb ik gebruik gemaakt van de relatie tussen de coëfficiënten gegeven in vergelijking (100).
Op dezelfde manier kunnen we de WKB benadering rond het punt x_2 geven.

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left(\left[\frac{B_2'}{i} + \frac{B_1'}{2}\right] e^{i\int_{x}^{x_2} k(x')dx' + \frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{B_2'}{i} + \frac{B_1'}{2}\right] e^{-i\int_{x}^{x_2} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}}\right) & x \leq x_2 \\ \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(B_1' e^{\int_{x_2}^{x} \kappa(x')dx'} + B_2' e^{-\int_{x_2}^{x} \kappa(x')dx'}\right) & x_2 \leq x \end{cases} \tag{123}$$

Dit zijn de homogene oplossingen zonder nog rekening te houden met de randvoorwaarden. We zijn echter geinteresseerd in het inhomogene probleem. We lossen dit op met behulp van variatie van constanten. We vinden voor $E < 0$

$$\begin{aligned} \psi_{WKB} = {} & \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(A_1 e^{\int_0^x \kappa(x)dx} + A_2 e^{-\int_0^x \kappa(x)dx}\right) \\ & + \int_0^x \frac{2}{\sqrt{\kappa(x-u)}} \cosh\left(\int_0^{x-u} \kappa(x)dx\right) g(u)du \end{aligned} \tag{124}$$

Vervolgens doen we hetzelfde voor $E > 0$ en vinden we de volgende inhomogene vergelijkingen:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(A_1' e^{\int_x^{x_1} \kappa(x')dx'} + A_2' e^{-\int_x^{x_1} \kappa(x')dx'} \right) \\ \quad + \int_0^x \frac{2}{\sqrt{\kappa(x-u)}} \cosh\left(\int_{x-u}^{x_1} \kappa(x')dx' \right) g(u)du \\ \hfill x \leq x_1 \\ \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(\left[\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2} \right] e^{i \int_{x_1}^x k(x')dx' + \frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{A_2'}{i} + \frac{A_1'}{2} \right] e^{-i \int_{x_1}^x k(x')dx' - \frac{\pi}{4}} \right) \\ \quad + \int_0^x \frac{2}{\sqrt{k(x-u)}} \cos\left(\int_{x_1}^{x-u} k(x')dx' + \frac{\pi}{4} \right) g(u)du \\ \hfill x_1 \leq x \end{cases} \tag{125}$$

en

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(\left[\frac{B_2'}{i} + \frac{B_1'}{2} \right] e^{i \int_x^{x_2} k(x')dx' + \frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{B_2'}{i} + \frac{B_1'}{2} \right] e^{-i \int_x^{x_2} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}} \right) \\ \quad + \int_0^x \frac{2}{\sqrt{k(x-u)}} \cos\left(\int_{x-u}^{x_2} k(x')dx' + \frac{\pi}{4} \right) g(u)du \\ \hfill x \leq x_2 \\ \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(B_1' e^{\int_{x_2}^x \kappa(x')dx'} + B_2' e^{-\int_{x_2}^x \kappa(x')dx'} \right) \\ \quad + \int_0^x \frac{2}{\sqrt{\kappa(x-u)}} \cosh\left(\int_{x_2}^{x-u} \kappa(x')dx' \right) g(u)du \\ \hfill x_2 \leq x \end{cases} \tag{126}$$

Nu is het tijd om naar de voorwaarden te kijken. De enige randvoorwaarde gegeven is dat moet gelden $\psi \in L^2(\mathbb{R})$.

Voor $E < 0$ hebben we een onbegrensde pariculiere oplossing, maar ook een onbegrensde homogene oplossing en dus kunnen de coëfficiënten A_1 en A_2 zo gekozen worden dat de onbegrensde particuliere oplossing door de homogene oplossing gecompenseerd wordt. En dus geldt voor $E < 0$ dat $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ en dus geldt $\forall E < 0$ dat $E \in \rho(H)$.

Voor $E > 0$ ligt het wat ingewikkelder. Als we kijken naar de gebieden $x \leq x_1$ en $x \geq x_2$ zien we ook hier dat de onbegrensde particuliere oplossingen gecompenseerd kunnen worden door de constanten A_1', A_2', B_1' en B_2'. Hier gaan we er dan vanuit dat de constanten in de twee gebieden onafhankelijk van elkaar zijn. In het gebied $x_1 \leq x \leq x_2$ is de oplossing gegeven door vergelijking (125) voor $x \geq x_1$ of door vergelijking (126) voor $x \leq x_2$. Omdat we het hier over een eindig interval hebben, zijn beide oplossingen begrensd. Als we echter naar vergelijking (125) voor $x \geq x_1$ óf naar vergelijking (126) voor $x \leq x_2$ kijken zullen we niet persee een continue functie vinden, hoewel de losse oplossingen wel in $L^2(\mathbb{R})$ zitten.
Als we echter op zoek gaan naar een continue functie vinden we dat de benadering bekeken vanuit het punt x_1 gelijk moet zijn aan de benadering bekeken vanuit het punt x_2. Een gebonden toestand in een 1-dimensionale ruimte kan

namelijk niet ontaard zijn.

Stelling 3.11.1. *Een gebonden toestand in een 1-dimensionale ruimte is niet ontaard.*

Bewijs. Stel we hebben twee verschillende eigenfunties, $\psi_1(x)$ en $\psi_2(x)$, met dezelfde energie E. Er geldt dan:

$$\frac{d\psi_1}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi_1 \quad \text{en} \quad \frac{d\psi_2}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi_2 \tag{127}$$

Voor de Wronskiaan geldt nu: $W = \psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2 = 0$. De Wronskiaan is dus onafhankelijk van x. En aangezien $W \to 0$ voor $x \to \infty$ is de Wronskiaan overal gelijk aan 0. Dit betekent dat ψ_1 en ψ_2 lineair afhankelijk zijn.

De vergelijkingen (125) voor $x \geq x_1$ en (126) voor $x \leq x_2$ kunnen aan elkaar gelijk gekozen worden als voor alle x geldt:

$$\int_{x_1}^{x} k(x')dx' + \frac{\pi}{4} = -\int_{x}^{x_2} k(x')dx' - \frac{\pi}{4} + n\pi \tag{128}$$

Hieruit vinden we:

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi \tag{129}$$

Door vervolgens werkelijk de integraal te berekenen vinden we:

$$\begin{aligned}
\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx &= \int_{x_1}^{-x_1} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}dx \\
&= \int_{x_1}^{-x_1} \frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{x_1^2 - x^2}dx \\
&= \frac{m\omega}{\hbar}\frac{\pi}{4}(2x_1^2) \\
&= \frac{\pi E}{\hbar\omega}
\end{aligned} \tag{130}$$

Wanneer we deze twee resultaten samen bekijken vinden we dus de volgende waarden: $E = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega$ voor $n = 1, 2, 3, \ldots$. Voor deze waarden is ψ een continue functie geworden. De constanten A_1', A_2', B_1' en B_2' aan beide kanten zijn nu echter niet meer onafhankelijk van elkaar. En hierdoor kunnen de constanten niet meer voor elke functie $g(x)$ aan beide kanten $x \leq x_1$ en $x \geq x_2$ de onbegrensde integraal compenseren en geldt er dat de gevonden WKB benadering bij waarden $E > 0$ alleen voor $E = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega$ voor $n = 1, 2, 3, \ldots$ geen element van $L^2(\mathbb{R})$ is. We vinden dus dat voor $E > 0$ de waarden $E = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega$ voor $n = 1, 2, 3, \ldots$ het oneindige discrete spectrum vormen.

Het gevonden spectrum $E = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega$ voor $n = 1, 2, 3, \ldots$ komt inderdaad overeen met het verwachte spectrum gegeven in hoofdstuk 2.

3.11.4 Het waterstofatoom

In paragraaf 2.4 hebben we gezien dat de Schrödingervergelijking geschreven kan worden als:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + V_l(r)\psi(r) = E\psi(r) \tag{131}$$

waarbij

$$\begin{aligned} V_l(r) &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \end{aligned} \tag{132}$$

De eigenfuncties die bij dit probleem horen worden uitgedrukt in Laguerre polynomen. Aangezien het lastig is om met deze polynomen te werken, maken we net als bij de harmonische oscillator gebruik van de WKB benadering. Dit mag omdat het 3-dimensionaal probleem sferisch symmetrisch is en we het als een 1-dimensionaal probleem kunnen behandelen. Voor de inhomogene vergelijking krijgen we:

$$\psi''(r) + f(r)\psi(r) = g(r) \tag{133}$$

waarbij voor $E > V_l(r)$

$$f(r) = k^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\right) \tag{134}$$

en voor $E < V_l(r)$

$$f(r) = -\kappa^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} - E\right) \tag{135}$$

We zullen dit probleem eerst behandelen voor $l > 0$. Het geval dat $l = 0$ is een speciaal geval en dit geval zullen we bewaren tot het eind.

We merken op dat $r \in [0, \infty)$ en dat de golffunctie $\psi(r)$ rond het punt nul dus sterk naar 0 moet gaan. In sommige gevallen kan er voor gekozen worden om in het punt $r = 0$ een oneindige potentiaalmuur te kiezen, wat vaak een redelijke benadering oplevert. In dit geval voor $l > 0$ hebben we echter al te maken met een potentiaal met de eigenschap $V(r) \to \infty$ voor $r \to 0$ en in dit geval hoeven we ons hier dus geen zorgen over te maken.

Voor $l > 0$ heeft de functie $V_l(r)$ een minimum van $V_{min} = -\frac{m}{2\hbar^2}\frac{1}{l(l+1)}\left(\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\right)^2$ bij $r = \frac{\hbar^2}{m}l(l+1)\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}$. Voor $E < V_{min}$ geldt dus dat er geen keerpunten zijn. Voor $r \to \infty$ geldt dat $V_l(r) \to 0$ en dus bestaat er voor $E > 0$ één keerpunt. In het gebied $V_{min} < E < 0$ zijn er twee keerpunten. We zullen deze drie gebieden dus apart behandelen.

/noindent Ten eerste kijken we naar $E < V_{min}$. In dit gebied zijn er zoals gezegd geen keerpunten. De homogene oplossing met behulp van de WKB benadering wordt dan gegeven door:

$$\psi_{WKB} = \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}}\left(A_1 e^{\int_0^r \kappa(r')dr'} + A_2 e^{-\int_0^r \kappa(r')dr'}\right) \tag{136}$$

We bepalen de particuliere oplossing van dit probleem met behulp van de variatie van constanten formule en zodanig verkrijgen we de volgende inhomogene oplossing.

$$\begin{aligned}\psi_{WKB} = &\frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}}\left(A_1 e^{\int_0^r \kappa(r')dr'} + A_2 e^{-\int_0^r \kappa(r')dr'}\right)\\ &+ \int_0^r \frac{2}{\sqrt{\kappa(r-u)}}\cosh\left(\int_0^{r-u}\kappa(r')dr'\right)g(u)du\end{aligned} \tag{137}$$

We hebben hier te maken met een onbegrensde particuliere oplossing. De homogene oplossing is echter ook onbegrensd en dus kunnen de constanten uit de homogene oplossing de onbegrensdheid van de particuliere oplossing compenseren.
Er geldt hier dus: $\psi_{WKB} \in L^2([0,\infty))$. Ofwel $E \in \rho(H)$ voor $E < V_{min}$.

Vervolgens bekijken we het geval dat $E > 0$. In dit geval hebben we te maken met één keerpunt. Dit keerpunt wordt gegeven door:

$$r_0 = -\frac{1}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} - \sqrt{\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 + 2E\frac{\hbar^2}{m}l(l+1)}\right) \tag{138}$$

In dit geval benaderen we $\psi(r)$ apart links en rechts van r_0 en verkrijgen als homogene oplossing:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}}\left(A_3 e^{\int_r^{r_0}\kappa(r')dr'} + A_4 e^{-\int_r^{r_0}\kappa(r')dr'}\right) & r \leq r_0 \\ \frac{1}{\sqrt{k(r)}}\left(\left[\frac{A_4}{i} + \frac{A_3}{2}\right] e^{i\int_{r_0}^r k(r')dr' + i\frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{A_4}{i} + \frac{A_3}{2}\right] e^{-i\int_{r_0}^r k(r')dr' - i\frac{\pi}{4}}\right) & r \geq r_0 \end{cases} \tag{139}$$

Op dezelfde manier als hierboven bepalen we met behulp van de variatie van constanten formule een particuliere oplossing en we verkrijgen hieruit de volgende inhomogene oplossing:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}}\left(A_3 e^{\int_r^{r_0}\kappa(r')dr'} + A_4 e^{-\int_r^{r_0}\kappa(r')dr'}\right) \\ \quad + \int_0^r \frac{2}{\sqrt{\kappa(r-u)}}\cosh\left(\int_{r-u}^{r_0}\kappa(r')dr'\right)g(u)du \\ \hfill r \leq r_0 \\ \frac{1}{\sqrt{k(r)}}\left(\left[\frac{A_4}{i}+\frac{A_3}{2}\right]e^{i\int_{r_0}^{r}k(r')dr'+i\frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{A_4}{i}+\frac{A_3}{2}\right]e^{-i\int_{r_0}^{r}k(r')dr'-i\frac{\pi}{4}}\right) \\ \quad + \int_0^r \frac{2}{\sqrt{k(r-u)}}\cos\left(\int_{r_0}^{r-u}k(r')dr'+\frac{\pi}{4}\right)g(u)du \\ \hfill r \geq r_0 \end{cases} \tag{140}$$

We zullen weer bekijken of deze inhomogene oplossing met behulp van het kiezen van de coëfficiënten als element van $L^2([0,\infty))$ gekozen kan worden. We zien dat rechts van het punt r_0 de particuliere oplossing onbegrensd is. De homogene oplossing hierbij is echter een begensde oplossing. De coëfficiënten uit de homogene oplossing kunnen dus nooit zo gekozen worden dat ze de particuliere oplossing kunnen compenseren. Deze golfvergelijking is dus geen element van $L^2([0,\infty))$ en dus geldt dat de operator $(H - EI)$ niet inverteerbaar is en dus dat $\forall E > 0\ E \in \sigma(H)$.

Tenslotte kijken we nog naar het gebied $V_{min} < E < 0$. Dit is wellicht het lastigste gebied en heeft twee keerpunten gegeven door:

$$r_1 = -\frac{1}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} + \sqrt{\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 + 2E\frac{\hbar^2}{m}l(l+1)}\right) \tag{141}$$

en

$$r_2 = -\frac{1}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} - \sqrt{\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 + 2E\frac{\hbar^2}{m}l(l+1)}\right) \tag{142}$$

Net als bij de harmonische oscillator benaderen we $\psi(r)$ zowel links en rechts van het punt r_1 als links en rechts van het punt r_2. We krijgen rond het punt r_1:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}}\left(A_5 e^{\int_r^{r_1}\kappa(r')dr'} + A_6 e^{-\int_r^{r_1}\kappa(r')dr'}\right) \\ \hfill r \leq r_1 \\ \frac{1}{\sqrt{k(r)}}\left(\left[\frac{A_6}{i}+\frac{A_5}{2}\right]e^{i\int_{r_1}^{r}k(r')dr'+i\frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{A_6}{i}+\frac{A_5}{2}\right]e^{-i\int_{r_1}^{r}k(r')dr'-i\frac{\pi}{4}}\right) \\ \hfill r \geq r_1 \end{cases} \tag{143}$$

Rond het punt r_2 geldt:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k(r)}} \left(\left[\frac{B_6}{i} + \frac{B_5}{2} \right] e^{i \int_r^{r_2} k(r')dr' + i\frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{B_6}{i} + \frac{B_5}{2} \right] e^{-i \int_r^{r_2} k(r')dr' - i\frac{\pi}{4}} \right) \\ \hfill r \leq r_2 \\ \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}} \left(B_5 e^{\int_{r_2}^r \kappa(r')dr'} + B_6 e^{-\int_{r_2}^r \kappa(r')dr'} \right) \\ \hfill r \geq r_2 \end{cases} \tag{144}$$

De inhomogene oplossingen rond de punten r_1 en r_2 worden vervolgens gegeven door:

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}} \left(A_5 e^{\int_r^{r_1} \kappa(r')dr'} + A_6 e^{-\int_r^{r_1} \kappa(r')dr'} \right) \\ \quad + \int_0^r \frac{2}{\sqrt{\kappa(r-u)}} \cosh \left(\int_{r-u}^{r_1} \kappa(r')dr' \right) g(u)du \\ \hfill r \leq r_1 \\ \frac{1}{\sqrt{k(r)}} \left(\left[\frac{A_6}{i} + \frac{A_5}{2} \right] e^{i \int_{r_1}^{r} k(r')dr' + i\frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{A_6}{i} + \frac{A_5}{2} \right] e^{-i \int_{r_1}^{r} k(r')dr' - i\frac{\pi}{4}} \right) \\ \quad + \int_0^r \frac{2}{\sqrt{k(r-u)}} \cos \left(\int_{r_1}^{r-u} k(r')dr' + \frac{\pi}{4} \right) g(u)du \\ \hfill r \geq r_1 \end{cases} \tag{145}$$

en

$$\psi_{WKB} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k(r)}} \left(\left[\frac{B_6}{i} + \frac{B_5}{2} \right] e^{i \int_r^{r_2} k(r')dr' + i\frac{\pi}{4}} + \left[-\frac{B_6}{i} + \frac{B_5}{2} \right] e^{-i \int_r^{r_2} k(r')dr' - i\frac{\pi}{4}} \right) \\ \quad + \int_0^r \frac{2}{\sqrt{k(r-u)}} \cos \left(\int_{r-u}^{r_2} k(r')dr' + \frac{\pi}{4} \right) g(u)du \\ \hfill r \leq r_2 \\ \frac{1}{\sqrt{\kappa(r)}} \left(B_5 e^{\int_{r_2}^r \kappa(r')dr'} + B_6 e^{-\int_{r_2}^r \kappa(r')dr'} \right) \\ \quad + \int_0^r \frac{2}{\sqrt{\kappa(r-u)}} \cosh \left(\int_{r_2}^{r-u} \kappa(r')dr' \right) g(u)du \\ \hfill r \geq r_2 \end{cases} \tag{146}$$

In de gebieden links van r_1 en rechts van r_2 zien we dat de onbegrensde particuliere oplossing gecompenseerd kan worden door de onbegrensde homogene oplossing. Hier gaan we ervan uit dat de coëfficiënten A_5, A_6, B_5 en B_6 onafhankelijk van elkaar zijn. De golfvergelijking in het interval (r_1, r_2) kan gegeven worden door zowel de benadering in vergelijking (145) als de benadering in vergelijking (146). Wanneer we deze oplossingen apart bekijken hebben we te maken met begrensde maar discontinue oplossingen.
Er bestaat enkel één continue oplossing, zoals bewezen in de vorige paragraaf, en dit is de oplossing waarbij de golfvergelijkingen uit de vergelijkingen (145) en (146) aan elkaar gelijkgesteld worden.
De twee golfvergelijkingen kunnen aan elkaar gelijk gekozen worden als geldt:

$$\int_{r_1}^{r} k(r')dr' + \frac{\pi}{4} = -\int_{r}^{r_2} k(r')dr' - \frac{\pi}{4} + n\pi \tag{147}$$

Hieruit vinden we:

$$\int_{r_1}^{r_2} k(r)dr = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi \tag{148}$$

Vervolgens willen we deze integraal $\int_{r_1}^{r_2} k(r)dr$ ook werkelijk berekenen. We merken op dat geldt:

$$r_1 r_2 = -\frac{1}{E}\frac{\hbar^2}{2m}l(l+1) \tag{149}$$

en zo ook:

$$r_1 + r_2 = -\frac{1}{E}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{150}$$

Aan de hand van deze twee gelijkheden is het gemakkelijker de integraal te evalueren. We vinden:

$$\begin{aligned}
\int_{r_1}^{r_2} k(r)dr &= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{E - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}}dr \\
&= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\frac{1}{r}\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}dr \\
&= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}\frac{\pi}{2}\left(\sqrt{r_2}-\sqrt{r_1}\right)^2 \\
&= \frac{\sqrt{2m}\pi}{2\hbar}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|E|} - \pi\sqrt{l(l+1)}
\end{aligned} \tag{151}$$

Wanneer we deze oplossingen aan elkaar gelijkstellen zien we dat moet gelden:

$$E_{nl} \simeq -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{\left(n - \frac{1}{2} + \sqrt{l(l+1)}\right)^2} \tag{152}$$

Voor deze waarden van E zijn coëfficiënten in het linker en het rechter gebied niet langer onafhankelijk van elkaar, en kunnen ze niet langer zo gekozen worden dat de golffunctie zowel aan de linkerkant als aan de rechter kant in elk geval naar 0 gaat. Voor de gevonden E-waarden is de bijbehorende golffunctie dus geen element van L^2 en dus zijn de E-waarden uit oplossing (152) de discrete eigenwaarden van H. We zien dat oplossing (152) niet gelijk is aan de precieze eigenwaarden gegeven in vergelijking (20). We verkrijgen echter wel een goede benadering voor $n \gg l$ en $n \gg \frac{1}{2}$.

Nu is het tijd om naar het geval $l = 0$ te kijken. De centrifugale term $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$ valt nu in z'n totaal weg en we houden over:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \tag{153}$$

Het gedrag van deze potentiaal dichtbij het punt $r = 0$ verschilt van het gedrag van de potentiaal met centrifugale term. De potentiaal gaat dichtbij dit punt niet naar oneindig, maar naar min oneindig. We moeten er hier dus extra rekening mee houden dat $r \in [0, \infty)$ en dus kiezen we een oneindige potentiaalmuur in het punt $r = 0$. Op dezelfde manier als hierboven gedaan voor $l > 0$ gaan we nu op zoek naar het bijbehorende spectrum.

We delen de energie waarden op in twee gebieden. Ten eerste het gebied $E > 0$, waar zich één keerpunt bevindt en wel het keerpunt $r_0 = 0$. En tenslotte dus het gebied $E < 0$, waar zich twee keerpunten bevinden $r_1 = 0$ en $r_2 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E}$.

In het gebied $E > 0$ hebben we één keerpunt. Zoals we eerder hebben gezien betekent dit dat de inhomogene oplossing van de WKB benadering onbegrensd is en dus dat de oplossing geen element is van L^2. Ofwel $\forall E > 0\ E \in \sigma(H)$.

In het gebied $E < 0$ hebben we twee keerpunten en we verwachten daar discrete energiewaarden aan te treffen. We hebben eerder gezien dat de oplossingen van de WKB bendaringen, wanneer we een gebied met twee keerpunten bekijken, elementen zijn van L^2 behalve als de twee benaderingen, rechts van het linker keerpunt en links van het rechter keerpunt, aan elkaar gelijk zijn. We zullen hier dus enkel nog het geval bekijken dat deze twee benaderingen aan elkaar gelijk zijn. We bekijken hier het geval dat:

$$\int_{r_1}^{r_2} k(r)dr = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi \tag{154}$$

Het feit dat we in de oplossing van de integraal een factor $\frac{1}{4}$ verkrijgen in plaats van $\frac{1}{2}$ komt doordat we nu niet meer met twee hellende potentiaalmuren te maken hebben, maar met één hellende muur en één rechte muur. Dit is af te leiden uit de eerder besproken Airy functies. Als we de werkelijke integraal oplossen vinden we:

$$\begin{aligned}\int_0^{r_2} k(r)dr &= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar^2}\int_0^{r_2}\sqrt{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}}dr \\ &= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar^2}\int_0^{r_2}\frac{1}{r}\sqrt{r_2 r - r^2}dr \\ &= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar^2}\frac{r_2}{2}\left(\frac{\pi}{2} + 2k\pi\right) \\ &= \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}\hbar}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{|E|}}\left(\frac{\pi}{2} + 2k\pi\right)\end{aligned} \tag{155}$$

Als we deze twee vergelijkingen nu aan elkaar gelijkstellen vinden we de volgende energiewaarden:

$$E = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\left(\frac{2n + \frac{1}{2}}{n - \frac{1}{4}}\right)^2 \tag{156}$$

Deze benaderde eigenwaarden zijn echter *fout!*. Dus wat is er nu misgegaan? Werkt de WKB benadering niet? De fout zit niet in de theorie van de WKB benaderingen, maar hier in de toepassing ervan. Zelfs bij $l > 0$ hebben we de WKB benadering fout gebruikt. Daar is de fout echter minimaal. De fout komt pas echt aan het licht wanneer we het geval $l = 0$ bekijken. De fout zit in het gebruik van vergelijking (133). Deze vergelijking lijkt veel op de wel goede vergelijking (80), maar is toch essentieel verschillend door de verschillen in domein van r en x. We lossen dit probleem op door in vergelijking (133) de twee substituties

$$r = e^x \quad \text{en} \quad \psi = e^{x/2}u \tag{157}$$

toe te passen. Dit levert ons een nieuwe (homogene) vergelijking en wel:

$$u''(x) + f(x)u(x) = 0 \tag{158}$$

waarbij:

$$f(x) = k^2(x) = \frac{2mE}{\hbar^2}e^{2x} + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}e^x - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \tag{159}$$

Voor $E > V$. Net als het eerste probleem, voor $l > 0$, is dit probleem weer in drie gebieden te verdelen. Het gebied $E > 0$ heeft 1 keerpunt en we hebben al gezien dat de benadering dan niet in L^2 zal zitten. Het gebied $E < V_{min}$ bevat geen keerpunten en de E-waarden uit dit gebied zijn allemaal in de resolvent verzameling te vinden. Ofwel de benaderingen in dit gebied zitten in L^2.

Voor ons het meest van belang is echter het derde gebied; $V_{min} < E < 0$. Hier bevinden zich twee keerpunten:

$$x_1 = \ln\left[-\frac{1}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \pm \sqrt{\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 + 2E\frac{\hbar^2}{m}\left[l + \frac{1}{2}\right]^2}\right)\right] \tag{160}$$

en

$$x_2 = \ln\left[-\frac{1}{2E}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \pm \sqrt{\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right]^2 - 2E\frac{\hbar^2}{m}\left[l + \frac{1}{2}\right]^2}\right)\right] \tag{161}$$

We bekijken weer het geval dat de twee benaderingen, rechts van het linker keerpunt en links van het rechter keerpunt, gelijk zijn. We hebben weer dat dan moet gelden:

$$\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi \tag{162}$$

De integraal rekenen we ook uit. We maken hierbij gebruik van de substitutie: $y = e^x$. Ook maken we gebruik van de twee handige gelijkheden:

$$y_1y_2 = -\frac{1}{E}\frac{\hbar^2}{2m}\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \tag{163}$$

en

$$y_1 + y_2 = -\frac{1}{E}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \tag{164}$$

We krijgen:

$$
\begin{aligned}
\int_{x_1}^{x_2} k(x)dx &= \int_{y_1}^{y_2} \frac{1}{y} k(y)dy \\
&= \int_{y_1}^{y_2} \frac{1}{y} \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \sqrt{-y^2 - \frac{1}{E}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} y + \frac{\hbar^2}{2mE}\left(l+\frac{1}{2}\right)^2} dy \\
&= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \int_{y_1}^{y_2} \frac{1}{y} \sqrt{-y^2 + (y_1+y_2)y - y_1 y_2} dy \\
&= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \int_{y_1}^{y_2} \frac{1}{y} \sqrt{(y-y_1)(y_2-y)} dy \\
&= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \frac{\pi}{2} (\sqrt{y_2} - \sqrt{y_1}) \\
&= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{\pi}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|E|} - \pi \left(l + \frac{1}{2}\right) \qquad (165)
\end{aligned}
$$

Deze twee oplossingen voor de integraal kunnen we weer aan elkaar gelijkstellen en dan vinden we de E-waarden:

$$
E = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right] \frac{1}{(n+l)^2} \qquad (166)
$$

Deze E-waarden leveren een goede benadering voor $n \gg l$ en zelfs een exacte oplossing voor $l = 0$. Een exacte oplossing voor alle $l > 0$ kunnen we met de WKB-benadering jammer genoeg niet vinden.

4 Literatuur

1 David J. Griffith, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, Inc. 1994.

2 Stephen J. Gustafson, Israel M. Sigal, *Mathematical Concepts of Quantum Mechanics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.

3 Bryan P. Rynne, Martin A. Youngson, *Linear Functional Analysis*, Springer-Verlag London Limited, 2000.

4 Piotr Garbaczewski, Witold Karwowski, *Impenetrable barries and canonical quantization*, American Journal of Physics, Vol. 72, No. 7, pp. 924-933, juli 2004.

5 Martin Schechter, *Principles of Functional Analysis*, American Mathematical Society, 2002.

6 Rudolph E. Langer, *On the Connection Formulas and the Solutions of the Wave Equation*, Phys. Rev. 51, 669, 1937.

7 Cornelius Lanczos, *Linear Differential Operators*, Dover Publications, Inc., 1997.

8 F.B. Hildebrand, *Methods of Applied Mathematics*, Prentice-Hall, Inc., 1952.

9 Ivar Stakgold, *Green's Functions and Boundary Value Problems*, John Wiley & Sons, Inc., 1979.

10 J.K. Hunter, B. Nachtergaele, *Applied Analysis*, World Scientific Pub Co Inc., 2001.

11 G.B. Folland, *Real Analysis, Modern Techniques and Their Applications*, second edition, John Wiley & Sons, Inc., 1999.

12 J.S. Geronimo, O. Bruno, W. Van Assche, *WKB and turning point theory for second-order difference equations* Spectral methods for operators of mathematical physics, 101–138, Operator Theory: Advances and Applications, 154, Birkhuser, Basel, 2004.

13 A.S. Fokas, *Differential forms, spectral theory, and boundary value problems.* The legacy of the inverse scattering transform in applied mathematics (South Hadley, MA, 2001), 69–92, Contempary Mathematics, 301, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2002.