URENHETER I EN-DIMENSJONALE KRYSTALLER

HOVEDOPPGAVE
FOR
STUD.TECHN. GUNNAR TARALDSEN
AVD. VII, NTH

15.april 1988

Til Svanhild

Denne hovedoppgaven er blitt til ved avdeling for fysikk og matematikk, universitetet i Trondheim - Norges Tekniske Høgskole. Faglig ansvarlig for oppgaven var Helge Holden, institutt for matematikk.

Institutt for datateknikk fortjener en vennlig tanke fordi de lot meg skrive ut dette LaTeX dokumentet på deres laserskriver. Siste versjon er skrevet ut på laserskriveren på datalaben til matematisk institutt. Jeg takker alle ved institutt for matematikk som har tatt seg tid til å høre på mine spørsmål. Spesielt vil jeg takke Harald Hanche Olsen som har vært mitt orakel når det gjelder bruk av PC.

Helt til slutt vil jeg rette en takk til Helge Holden, min veileder på denne hovedoppgaven.

Trondheim 20. januar 2000

Gunnar Taraldsen

Innhold

Figurer

Kapittel 1

Om innholdet i hovedoppgaven

Jeg vil nå kort beskrive innholdet i 5 av de 6 delene som hovedoppgaven består av[1]:

1. Litt kvantemekanikk.
2. Matematisk grunnlag.
3. Stykkevis konstant potensial i en dimensjon.
4. Konkrete modeller.
5. Appendiks.

"Litt kvantemekanikk" består av to deler. Den første delen presenterer en formell formulering av kvantemekanikken, som er vanlig å finne i fysikk litteraturen. Der innføres "bra" og "ket" notasjonen til Dirac sammen med fullstendighetsrelasjonen, $I = \sum_n |n\rangle \langle n|$, for egenvektorene $|n\rangle$ til en selvadjungert operator. Jeg må presisere at denne generelle formuleringen av kvantemekanikken ikke gir seg ut for å være matematisk korrekt. Til det er den for upresis. Et matematisk korrekt resultat som tilsvarer fullstendighetsrelasjonen er spektralteoremet for selvadjungerte operatorer. Grunnen til at denne formalismen blir presentert her er først og fremst fordi jeg synes den er tiltalende. Den er intuitiv og gir de viktigste ideene i kvantemekanikken.

Den andre delen gir seg heller ikke ut for å være en matematisk presis formulering. I denne delen tar jeg opp noen av de viktigste begrepene en møter i en kvantemekanisk beskrivelse av et elektron i et krystall. Det viktigste her er Blochs teorem. Det sier at alle løsninger til Schrödingers likning for et periodisk potensial er på formen $u_k(x)\exp(ikx)$. Her er u_k funksjoner med samme periodisitet som gitteret. Kravet om at Blochimpulsen k er reell kommer inn hvis man krever at bølgefunksjonen skal være begrenset for $x \to \pm\infty$. Ved endelige krystall eller andre defekter i krystallet er det nettopp Blochløsningene for komplekse k som blir viktige. At Blochløsningene for reelle k gir energier i spekteret til den tilhørende Hamiltonoperator er ikke uten videre matematisk klart. Den korrekte matematiske formalisme er her gitt ved å innføre en spektraldekomposisjon [17] av Hamiltonoperatoren. Denne leder tilbake til de periodiske funksjonene u_k som opptrer i Blochløsningene.

Delen "Matematisk grunnlag" er blitt omfattende. Her har jeg antagelig vært for grundig. Grunnen til det store volum denne delen har fått er at jeg har brukt mye av min tid på å

[1] Del VI er referanselisten.

lære nettopp dette stoffet. Min lærebok har vært [23] og teorien er hentet direkte fra denne kilden. Jeg satte meg som mål å bevise alle teorem jeg hadde med uten å måtte referere for mange ganger til bakenforliggende teorem som ikke var bevist. Kvantemekanikken refererer jeg bare unntaksvis til. Det viktigste kapittelet for de konkrete modeller jeg senere skulle se på er utvilsomt "Konkrete operatorer, spesielt noen Schrödinger operatorer". Her defineres Hamiltonoperatorer som inneholder delta- og/eller deltaderivert-potensial. Det viktigste resultatet er at det essensielle spekter til en Hamiltonoperator er uforandret ved pertubasjon med et endelig antall m av slike punktinteraksjoner, og at antall nye egenverdier i de enkelte energigap er begrenset av m. Hovedoppgaven hadde blitt 50 sider kortere hvis denne matematikken hadde vært kjent stoff for meg i utgangspunktet.

"Stykkevis konstant potensial i en dimensjon" er den praktisk viktigste delen av hovedoppgaven. Der innføres transfer matrisene M som et hjelpemiddel til å løse Schrödingers likning. Først finnes M matrisene for de potensial som ønskes studert senere. Deretter studeres de generelle egenskapene til matrisene. Den viktigste egenskapen her er at de alle har determinant lik 1. Jeg peker også på en morsom[2] analogi mellom M matrisene og de homogene Lorentz transformasjonene L, som er hovedindegrensen i Einsteins spesielle relativitetsteori. Denne delen avsluttes med en generell drøfting av hvordan M matrisene kan brukes til å studere spekteret til den tilhørende Hamiltonfunksjon.

"Konkrete modeller" er delen hvor resultatene for noen utvalgte modeller er samlet. Den viktigste modellen her er gitt ved et periodisk gitter med deltafunksjoner. Dette gitteret perturberes ved at en ekstra deltafunksjon legges til potensialet. Styrken β til urenheten og posisjonen gitt ved avstanden z til et av gitterpunktene er vilkårlige. Tidligere kjente resultat for $z = 0$ og $z = 1/2$ bekreftes. Det spesielle med disse to enkle tilfellene er at egenverdiene p.g.a. pertubasjonen bare kommer i enkelte gap, f.eks. i hver annet gap. Det viktigste resultatet er at en ved en generell z finner egenverdier i et gitt gap n både for positive og negative urenheter. Jeg finner spesielt for hvilke z verdier urenhetsnivået i et gitt gap forsvinner. Resultatet er essensielt at egenverdiene forsvinner for et gitt fortegn på urenheten for et diskret antall z verdier, og dette antallet øker proposjonalt med nummeret til det gapet som studeres. Energigapene nummereres fra lave energier og oppover.

Utover denne modellen hadde jeg håpet å gjøre analytiske beregninger på andre mulige modeller. Det fikk jeg for dårlig tid til.

I appendiks har jeg plassert en rekke figurer som ble benyttet ved diskusjonen av de enkelte modeller. Disse figurene er alle sammen produsert ved hjelp av programmet Matlab som jeg benyttet flittig på en av instituttets PC'er. I forbindelse med denne bruken laget jeg et menystyrt Matlab program,"hovedmnu.m". Programlisting og kommentarer til dette programmet finnes i appendiks. Enkelte nye modeller og fenomen er og drøftet grafisk i denne delen. Dette er samtidig et eksempel på hva "hovedmnu.m" kan prestere. Desverre gikk det ikke fullt så smertefritt å få all grafikk ut på papiret som det burde. Dette skyldes en feil i Matlab-rutinene som skal konvertere grafikken på skjermen over til PostScrip filer som kan skrives ut på en laserskriver. Noen figurer er derfor skrevet ut på en matriseskriver med dertil dårligere oppløsning.

[2]Det mener i hvert fall jeg.

Kapittel 2

Innledende bemerkninger

Synes det er berettiget å skrive noen ord om min begrunnelse for valget av oppgave, da dette utvilsomt har preget besvarelsen. Begrunnelsen er tosidig. Den har en matematisk side og en fysisk.

Det matematiske grunnlaget for kvantemekanikken ble , etter min mening, for dårlig dekket av fagene ved studieretningen for teoretisk fysikk. Det formelle grunnlaget er godt dekket, men presiseringene mangler. En skiller f.eks. aldri på Hermiteske, symmetriske og selvadjungerte operatorer. Dette skyldes at definisjonsområdet til de samme operatorer heller aldri blir definert. Det overnevnte lar seg kanskje forsvare ved at utgangspunktet for fysikkstudier er å forstå fysikken, ikke de matematiske detaljer(?). For meg er denne oppgaven en innføring i studiet av selvadjungerte operatorer definert tett på Hilbertrom. Dette er grunnen til at en vil finne repetert/oppramset noe av det matematiske grunnlaget i det følgende.

Fysikken i oppgaven har kanskje større allmen interesse. I utgangspunktet forsøker man å beskrive et metalls fysikk. Da har man et umulig kvantemekanisk problem med N ($\sim 10^{23}$) vekselvirkende elektron og atomkjerner (ioner).

Den første tilnærmelsen (Born-Oppenheimer) skiller elektrondelen fra ionedelen. Fysikken til ionene[1] forlates herved.

Den enkleste beskrivelse av elektrondelen er som en klassisk fri (d.v.s. ikke vekselvirkende) gass. Det var essensen i Drudes teori fra år 1900, [2, side 2]. En forbedring er overgangen til en kvantemekanisk fri gass som i Sommerfeld's teori, hvor hovedpoenget er Pauli's eksklusjonsprinsipp: Ingen elektron med like kvantetall (f.eks. impuls og spinn).

Neste tilnærmelse består i å ta hensyn til vekselvirkningene på enklest tenkelig måte. En benytter en midlere felt approksimasjon. Tanken er at et elektron effektivt beveger seg i et midlere potensial fra resten av partiklene. Dermed har man igjen redusert problemet til et en-partikkelproblem. Hvis ionene er periodisk fordelt blir det resulterende potensial og periodisk. En slik antagelse fører til båndteorien for metaller, hvor det nye er forbudte gap i energispekteret. Dette siste fører videre til inndelingen av krystalinske stoff i metaller, halvmetaller og isolatorer, halvledere, [7, s.V.30].

Temaet i denne oppgaven er et avvik fra det overnevnte periodiske tilfellet. Spesielt vil f.eks. et fremmedatom plassert inn i et ellers periodisk gitter representere et slikt avvik.

For å gjøre livet enkelt er oppgaven begrenset til det endimensjonale tilfellet. Problemene er allikevel store nok.

[1] Beskrives ved fononer (lydpartikler) analogt fotoner (lyspartikler). Samtidig en pen inngang til kvantefeltteori...

Dette endimensjonale tilfellet kan og brukes som en kvalitativ modell for de såkalte supergitter. Et supergitter er en ny type halvledere. De kan lages ved å gro tynne (tykkelse noen hundre atom) lag med halvledermateriale på hverandre. Denne teknikken har mange interessante anvendelser i faste stoffers fysikk. En referanse her er [Dö].

Del I

Litt kvantemekanikk

Kapittel 3

Formell formulering av kvantemekanikken

Følgende formulering av den ikke relativistiske kvantemekanikken følger [8]. Den er formell og må spesifiseres mere konkret for gitte problem. Understreker at dette <u>ikke</u> er en matematisk teori. Mere presise formuleringer kan finnes i [22, 10].

La $\mathcal{H}$ være et komplekst Hilbertrom og $\mathcal{H}'$ det duale rommet[1]. Vektorer i $\mathcal{H}$ representeres med symbolet $|a\rangle$. $|a\rangle \in \mathcal{H}$ tilordner en $\langle a| \in \mathcal{H}'$. Ved Riesz teorem er hele $\mathcal{H}'$ gitt på denne måten når den kontinuerlige lineærfunksjonalen $\langle a| : \mathcal{H} \to \mathbf{C}$ er gitt ved indreproduktet:

$$|b\rangle \mapsto \langle a| \cdot |b\rangle = \langle a|b\rangle \tag{3.1}$$

Dirac kaller en $|a\rangle$ for en "ket" og en $\langle a|$ for en "bra". Dette kommer naturlig fra det engelske ordet "bracket",$\langle bra|ket\rangle$.

Til en lineær operator A gitt ved $|a\rangle \mapsto A\,|a\rangle \equiv |Aa\rangle$ på $\mathcal{H}$ tilordnes en adjungert operator A^* ved at:

$$\langle a| \cdot A\,|b\rangle = (\langle b| \cdot A^*\,|a\rangle)^* \tag{3.2}$$

$D(A^*)$ er gitt ved at overstående skal gjelde for alle $|b\rangle \in D(A)$.

A er selvadjungert hvis $A = A^*$. For en selvadjungert operator gjelder derfor:

$$\langle a|\,A\,|b\rangle = \langle a|Ab\rangle = \langle Aa|b\rangle\,,\ |a\rangle\,,|b\rangle \in D(A) \tag{3.3}$$

$$\langle a|\,A\,|a\rangle = (\langle a|\,A\,|a\rangle)^* \tag{3.4}$$

Nå kan Kvantemekanikken formuleres:

Postulat 3.1 *Til hver observerbar fysisk størrelse svarer en selvadjungert operator $A(p,q)$. Posisjonsoperatoren $q = (q_j)$ og impulsoperatoren $p = (p_j)$ er selvadjungerte og oppfyller*[2]*:*

[1] En kan operere med riggede rom hvor $\mathcal{H}$ ikke er et Hilbertrom. Det duale er alltid et komplett rom fordi $\mathbf{C}$ er komplett.

[2] Det er bare i denne fysikkformuleringen av kvantemekanikken at jeg eksplisitt har med de fysiske konstanter som inngår. Senere vil disse hensiktsmessig settes lik 1.

$$[p_j, q_k] \stackrel{def}{=} p_j q_k - q_k p_j = -i\hbar\delta_{j,k} \tag{3.5}$$

Postulat 3.2 *Tilstanden til et fysisk system er en* $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ *som oppfyller* $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. *Tidsutviklingen til en tilstand* $|\Psi\rangle$ *er gitt ved Schrödingerlikningen:*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle \tag{3.6}$$

$H = H(p,q)$ *er energioperatoren til systemet.*

Postulat 3.3 *Ved målinger av en fysisk størrelse svarende til operatoren* $A(p,q)$ *er middelverdien gitt ved:*

$$\langle A\rangle = \langle\Psi| A |\Psi\rangle \tag{3.7}$$

når systemet er i en tilstand $|\Psi\rangle$.

Postulat 3.4 *De eneste mulige verdier som en eksakt måling av en observabel* A *kan gi er verdier i spekteret* $\sigma(A) \subset \mathbf{R}^3$ *til* A. *Formelt er* $\lambda \in \sigma(A)$ *hvis det finnes en* $|\lambda\rangle$ *slik at:*

$$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{3.8}$$

Kommentarer til Postulatene over kan lett fylle en bok. Jeg må forsøke å være kortfattet. Ser i det følgende på tilfellet med en partikkel i en dimensjon slik at p og q bare har en komponent. Generaliseringen til flere dimensjoner er likefrem.

Det er ikke helt klart hvordan Postulat 3.1 skal realiseres. Hvis en klassisk har gitt en fysisk størrelse $A(p,q,t)$ ved tid t som en funksjon av impulsene p og koordinatene q til et partikkelsystem, så er det ikke uten videre klart hvordan operatoren A skal defineres[4]. Antar i det følgende at operatorene er veldefinerte og selvadjungerte.

Tidsutviklingen til en tilstand $|\Psi\rangle$ er nå gitt ved Postulat 3.2. Hvis $|\psi\rangle$ var tilstanden til systemet ved tid $t=0$, så er tilstanden ved tid t gitt ved den formelle løsning av (**??**):

$$|\Psi\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle \tag{3.9}$$

Dette motiverer en til å se på den stasjonære Schrödinger likningen:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{3.10}$$

I Kvantemekanikken antar en at alle fysiske operatorer har et komplett sett av generaliserte egenfunksjoner. Hvis $\{|n\rangle\}$ er Hamiltonoperatorens ortonormerte egenfunksjoner, så betyr dette spesielt:

[3] Likning (**??**) sørger for at spekteret er reelt.
[4] Spektralteoremet hjelper en et stykke på vei.

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle\,,\ |\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{3.11}$$

"Summen" i likningen går over alle n tilsvarende en E_n i spekteret til H. Da spekteret kan være kontinuerlig vil "summen" i realiteten ofte være et integral. I slike tilfeller vil en heller ikke nødvendigvis ha alle $|n\rangle \in \mathcal{H}$. $\{|n\rangle\}$ kalles derfor generaliserte egenfunksjoner.

Med en slik representasjon for tilstanden $|\psi\rangle$ ved tid $t = 0$ gir (**??**):

$$|\Psi\rangle = \sum_n e^{-i\omega_n t} c_n |n\rangle\,,\ \hbar\omega_n = E_n \in \sigma(H) \tag{3.12}$$

Ved ortonormaliseringsbetingelsen $\langle n|m\rangle = \delta(n-m)$, hvor $\delta(\cdot)$ er deltadistribusjonen i det kontinuerlige tilfellet og Kroenecker delta i det diskret tilfellet, gir (**??**):

$$\langle n|\psi\rangle = \langle n| \sum_k c_k |k\rangle = c_n \tag{3.13}$$

Ved å løse den tidsuavhengige Schrödingerlikning for en tidsuavhengig H finnes derfor den generelle løsning til Schrödingerlikningen.

Omvendt ved innsetting av (**??**) i (**??**) ser man at $\{|n\rangle\}$ bare er et komplett sett hvis:

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle\,, \forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \text{ eller} \tag{3.14}$$

(3.15)

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I \tag{3.16}$$

At operatoren $\sum_n |n\rangle \langle n| = I$, d.v.s. identiteten på $\mathcal{H}$, kalles for fullstendighetsrelasjonen. Dette er en sum av formelle ortogonale projeksjoner, som har sin presise realisering i spektralteoremet.

Se så på Postulat 3.3. La $\{|\lambda\rangle\}$ være det totale ortonormerte egenvektorsett for operatoren A med spekter $\{\lambda\}$. Anta at systemet ved $t = 0$ er gitt ved:

$$|\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda |\lambda\rangle \tag{3.17}$$

Da er middelverdien til A gitt ved:

$$\langle A\rangle = \sum_{\lambda,\lambda'} \langle \lambda'| A |\lambda\rangle c^*_{\lambda'} c_\lambda = \sum_\lambda |c_\lambda|^2 \lambda \tag{3.18}$$

Postulat 3.4 gir at $\lambda \in \sigma(A)$ er de eneste mulige resultat ved en måling av (den fysiske størrelsen svarende til) A. Hvis p_λ[5]. er sannsynligheten for å måle verdien λ må man og ha:

[5] I det kontinuerlige tilfellet er p_λ en sannsynlighetstetthet.

$$\langle A \rangle = \sum_\lambda p_\lambda \lambda \tag{3.19}$$

Ved sammenlikning finnes:

$$p_\lambda = |c_\lambda|^2 = |\langle \lambda|\psi\rangle|^2 \tag{3.20}$$

Spesielt hvis $|\psi\rangle = |\lambda\rangle$ så må man finne verdien λ med sannsynlighet $|\langle\lambda|\lambda\rangle|^2 = 1$.

Noen spesialtilfeller for A er spesielt interessante:

For $A = H$, d.v.s. Hamiltonoperatoren finnes sannsynligheten for en energi E_n lik $|\langle n|\psi\rangle|^2$ når $\{|n\rangle\}$ er det ortonormerte egenvektorsettet til H. Spesielt hvis systemet er i en tilstand $|\psi\rangle = |n'\rangle$, så er energien lik $E_{n'}$ med sannsynlighet $|\langle n'|n'\rangle|^2 = 1$. (**??**) gir da at systemet med sannsynlighet 1 vil beholde denne energien ved alle t. Egentilstandene til H kalles derfor stasjonære.

For $A = x$, d.v.s. posisjonsoperatoren, har man $x\,|x'\rangle = x'\,|x'\rangle$ hvor $\{|x'\rangle\}$ er det ortonormerte settet svarende til posisjonene $\sigma(x) = \{x'\}$. Hvis alle posisjoner x' er tilatte må man ha $\{x'\} = \mathbf{R}$ i følge Postulat 3.4. Resultatet over gir da at $|\langle x'|\psi\rangle|^2$ er sannsynligheten[6] for at partikkelen finnes i posisjon x' ved en måling.

I utgangspunktet var $\langle a|b\rangle$ bare definert for vektorer i $\mathcal{H}$. $\langle x'|\psi\rangle$ er et komplekst tall for alle $x' \in \mathbf{R}$. $|\psi\rangle$ definerer dermed en funksjon ved:

$$x' \mapsto \langle x'|\psi\rangle \equiv \psi(x') \tag{3.21}$$

Fullstendighetsrelasjonen gir da:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{x'} \langle\psi|\,|x'\rangle\,\langle x'|\,|\phi\rangle = \sum_{x'} \psi(x')^*\phi(x'), \tag{3.22}$$

$$|\psi\rangle\,,|\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{3.23}$$

Dermed er et mulig indreprodukt på $\mathcal{H}$ gitt ved gjenkjenning av indreproduktet på $L_2(\sigma(x))$! $\phi(x')$ er x' komponenten til vektoren $|\phi\rangle$ i posisjonsrepresentasjonen.

En kan ta utgangspunkt i egenvektorsettet $\{|p'\rangle\}$ til impulsoperatoren. Som for posisjonsoperatoren finnes da[7]:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{p'} \langle\psi|\,|p'\rangle\,\langle p'|\,|\phi\rangle = \sum_{p'} \hat{\psi}(p')^*\hat{\phi}(p'), \tag{3.24}$$

$$|\psi\rangle\,,|\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{3.25}$$

Her ender man da opp med et indreprodukt på $L_2(\sigma(p))$.

Hvordan er så sammenhengen mellom $\langle p'|\psi\rangle$ og $\langle x'|\psi\rangle$? Fullstendighetsrelasjonen sier:

[6] Dette blir en sannsynlighetstetthet når x' kan ha alle verdier i $\mathbf{R}$.

[7] Har satt en hatt på funksjonene. Dette er for å understreke at $\psi(x') \neq \hat{\psi}(p')$ generelt selv om tallene x' og p' er like.

$$\langle p'|\psi\rangle = \sum_{x'} \langle p'|\,|x'\rangle \langle x'|\,|\psi\rangle \text{ eller } \hat{\psi}(p') = \sum_{x'} \langle p'|x'\rangle\, \psi(x') \tag{3.26}$$

Dette likner svært på en Fouriertransformasjon. Formelt kan det vises at så er tilfelle. Postulat 3.1 gir:

$$\langle x'|\,(px - xp)\,|x''\rangle = \langle x'|\,(-i\hbar)\,|x''\rangle = -i\hbar\delta(x' - x'') \tag{3.27}$$

Ved å benytte at x er selvadjungert finnes så:

$$(x'' - x')\,\langle x'|\,p\,|x''\rangle = -i\hbar\delta(x' - x'') \tag{3.28}$$

Identiteten $\delta(z) = -z\delta'(z)$ gir dermed:

$$\langle x'|\,p\,|x''\rangle = -i\hbar\delta'(x' - x'') \tag{3.29}$$

Dette kan benyttes til å beregne $\langle p'|x'\rangle = \langle x'|p'\rangle^*$:

$$p'\,|p'\rangle = p\,|p'\rangle \Rightarrow \tag{3.30}$$

$$p'\,\langle x'|p'\rangle = \langle x'|\,p\,|p'\rangle = \sum_{x''} \langle x'|\,p\,|x''\rangle \langle x''|\,|p'\rangle \tag{3.31}$$

$$= -i\hbar \sum_{x''} \frac{\partial}{\partial x'}\delta(x' - x'')\,\langle x''|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\,\langle x'|p'\rangle \tag{3.32}$$

Denne førsteordens differensiallikningen løses enkelt. Med:

$$\langle x'|p'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ip'x'/\hbar} \tag{3.33}$$

har man og oppfylt:

$$\langle p'|p''\rangle = \sum_{x'} \langle p'|\,|x'\rangle \langle x'|\,|p''\rangle = (2\pi\hbar)^{-1} \sum_{x'} e^{i(p''-p')x'/\hbar} = \delta(p'' - p') \tag{3.34}$$

Dermed har man "oppdaget" Fouriertransformasjonen.

Vil så vende tilbake til problemet i Postulat 3.1. Hvordan skal operatorene realiseres? Velger da det konkrete tilfellet hvor $\mathcal{H} = L_2(\sigma(x))$, d.v.s. mengden av de kvadratisk integrable funksjoner[8]. I posisjonsrepresentasjonen finnes[9]:

$$(x\,|\Psi\rangle)(x) = \langle x|\,x\,|\Psi\rangle = x\,\langle x|\,|\Psi\rangle \text{ eller } (x\Psi)(x) = x\Psi(x) \tag{3.35}$$

[8] Underslår den tidsvariable t. Skal ha $\Psi(\cdot, t) \in L_2(\sigma(x))$ for alle fikserte t

[9] I denne formelle formuleringen jeg nå gjennomfører er det typisk at jeg f.eks. utelater å spesifisere definisjonsområde til de definerte operatorene.

Og fra (**??**):

$$\langle x|\, p\,|x'\rangle = -i\hbar\delta'(x-x') \Rightarrow \tag{3.36}$$

$$(p\,|\Psi\rangle)(x) = \langle x|\, p\,|\Psi\rangle = \sum_{x'} \langle x|\, p\,|x'\rangle \langle x'|\,|\Psi\rangle \tag{3.37}$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\,|\Psi\rangle \text{ eller } (p\Psi)(x) = -i\hbar\Psi'(x) \tag{3.38}$$

Energien til en partikkel i posisjon x med impuls p er klassisk gitt ved Hamiltonfunksjonen:

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{3.39}$$

hvor $V(x)$ er potensialet som partikkelen beveger seg i. Schrödinger operatoren H defineres naturlig ved:

$$(H\Psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) \tag{3.40}$$

Spektralteoremet sin:

$$Tf = \int t dE(t) f \tag{3.41}$$

er lik denne formelle formuleringen sin:

$$H\,|f\rangle = \sum_E E\,|E\rangle \langle E|f\rangle \tag{3.42}$$

Forskjellen er ikke uvesentlig. Spektralteoremet kan bevises presist!

Kapittel 4

Blochs teorem og det periodiske gitter

Vil raskt oppsummere noen begreper og resultat som er velkjente i faste stoffers fysikk [2, 7]. En matematisk orientert framstilling kan finnes i [17].

Et Bravaisgitter B i $d \leq 3$ dimensjoner er gitt ved d[1] lineært uavhengige vektorer $\{a_i\}$:

$$B = \left\{ R : R = \sum_i n_i a_i, \ n_i \in \mathbf{Z} \right\} \tag{4.1}$$

Vektorene a_i kalles primitive gittervektorer. For et gitt gitter vil det i alminnelighet finnes flere mulige sett med primitive gittervektorer. En primitiv enhetscelle er et volum som fyller hele rommet (uten overlapping eller tomrom) når det translateres med alle gittervektorer R. Volumet som tre primitive gittervektorer utspenner er alltid en primitiv enhetscelle. Wigner-Seitz cellen omkring et gitterpunkt P defineres som det område av rommet som ligger nærmere P enn noe annet gitterpunkt. Denne primitive cellen er entydig gitt av gitteret.

La $V(x)$ være et potensial med periodisitet som Bravaisgitteret:

$$(T_R V)(x) = V(x + R) = V(x), \ \forall R \in B \tag{4.2}$$

Schrödingerlikningen for 1 elektron som beveger seg i et slikt potensial er:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{4.3}$$

Felix Bloch kom i 1928 fram til:

Teorem 4.1 (Bloch) *Egenfunksjonene til et elektron i et periodisk potensial har (kan velges til å ha) fasongen:*

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad x, k \in \mathbf{R}^d \tag{4.4}$$

[1] I denne generelle framstillingen er det ingen spesiell grunn til å holde seg til en dimensjon.Her er det bare en understreking av at ideen i formalismen like godt kommer fram i en dimensjon... En klassifisering av Bravaisgitter er selvsagt vanskeligere i 3 dimensjoner enn i 1.

Her er k Bloch-impulsen til elektronet og funksjonene u_k har samme periodisitet som det periodiske potensial:

$$u_k(x+R) = u_k(x), \quad \forall R \in B \tag{4.5}$$

Bevis. Med $R \in B$ er det klart at $[T_R, H] = 0$. Operatorer som kommuterer har felles egenfunksjoner[2]. Det er derfor tilstrekkelig å løse egenverdiproblemet:

$$(T_R\psi)(x) = \psi(x+R) = \lambda\psi(x) \tag{4.6}$$

Med kravet om at bølgefunksjonen skal være endelig ved $x \to \pm\infty$ følger det at $|\lambda| = 1$:

$$\lambda = e^{i\epsilon(R)}, \; \epsilon(R) \in \mathbf{R} \tag{4.7}$$

Identiteten $T_{R_1}T_{R_2} = T_{R_1+R_2}$ gir da $\epsilon(R_1) + \epsilon(R_2) = \epsilon(R_1 + R_2)$. Dermed er $\epsilon(R)$ lineær og $\epsilon(0) = 0$ gir da at det finnes en k slik at:

$$\epsilon(R) = kR \tag{4.8}$$

Dermed har man:

$$\psi(x+R) = e^{ikR}\psi(x) \text{ eller} \tag{4.9}$$

$$\psi(x) = e^{-ikR}\psi(x+R) = e^{ikx}u_k(x) \text{ med} \tag{4.10}$$

$$u_k(x) = e^{-ik(R+x)}\psi(x+R) = e^{-ikx}\psi(x) = u_k(x+R) \tag{4.11}$$

Kravet om at k skulle være reell kom inn fordi en krevde at eksponentsielt voksende løsninger skulle forkastes. Man vil fortsatt ha u_k funksjoner med den periodiske egenskapen der hvor gitteret er perfekt. $\boxed{\hbar}$

Blochs Teorem har også et konstruktivt bevis som følger ved en Fourierutvikling av potensialet $V(x)$. Det beviset er meget instruktivt [7, s.V.3], men sløyfes her.

Over er egenfunksjonene til T_R funnet. Man har:

$$T_R\psi_k(x) = \psi_k(x+R) = e^{ik(R+x)}u_k(R+x) = e^{ikR}\psi_k(x) \tag{4.12}$$

Egenverdien $\exp(ikR)$ til T_R gir ingen entydig k. En $k' = k + K$ hvor $\exp(iKR) = 1$ gir samme egenverdi og derfor samme egenrom til denne egenverdien.

Til et Bravaisgitter B er et resiprokt gitter G gitt. Dette defineres ved:

$$G = \left\{K : e^{iKR} = 1 \text{ for alle } R \in B\right\} \tag{4.13}$$

[2]Ved degenerasjon av egenverdiene kan de velges til å ha felles egenfunksjoner.

I det endimensjonale tilfellet er $b = 2\pi/a$ den primitive gittervektor for G. I tre dimensjoner er det flere mulige primitive gittervektorer for G, men følgende tre gjør nytten:

$$b_{S(1)} = \frac{2\pi}{v_E}(a_{S(2)} \times a_{S(3)}) \text{ for alle sykliske } S \tag{4.14}$$

$$v_E = a_1(a_2 \times a_3) \text{ d.v.s. volumet til en enhetscelle} \tag{4.15}$$

De sykliske S er gitt ved:

$$(S(1), S(2), S(3)) \in \{(1,2,3), (2,3,1), (3,1,2)\} \tag{4.16}$$

Ved hjelp av det resiproke gitter kan en nå definere en entydig k som gir egenverdien $\exp(ikR)$ til operatoren T_R for alle $R \in B$. Man restrikterer k til Wigner-Seitz cellen (omkring origo) til det resiproke gitter. Denne cellen kalles første Brillouinsone B_r. For en $k' \in R^d$ finnes det da alltid en $K_0 \in G$ slik at $k = k' + K_0 \in B_r$.

Ved innsetting av $u_k(x)\exp(ikx)$ i Schrödingerlikningen finnes egenverdiproblemet for $u_k(x)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta + ik)^2 + V(x)\right] u_k(x) = E(k) u_k(x) \tag{4.17}$$

P.g.a. de periodiske randbetingelsene $u_k(x+R) = u_k(x)$ er det tilstrekkelig å lete etter løsninger $u_{k,n}(x)$ definert på en primitiv enhetscelle i det periodiske gitteret. En Fourierrekkeutvikling er den kanoniske løsningsmetoden[3]. For fikserte k vil egenverdiproblemet p.g.a. de periodiske randbetingelsene ha et diskret sett med egenfunksjoner $u_{k,n}(x)$ og egenverdier $E_n(k)$ $n \in \mathbf{N}$. Når k varierer over hele Brillouinsonen varierer $E_n(k)$ over et energiområde som gjerne kalles energibånd n. Slike energibånd kan overlappe.

I det virkelige liv vil en krystall være endelig. Anta at krystallen består av $N = N_1 \cdots N_d$ primitive enhetsceller. Et alternativ er da å løse Scrödingerlikningen med de periodiske randbetingelser:

$$\psi(x + N_i a_i) = \psi(x), \; i = 1, \ldots, d \tag{4.18}$$

Innsatt i Blochløsningen ser en at dette begrenser k til verdiene:

$$k = \frac{n_1}{N_1} b_1 + \cdots + \frac{n_d}{N_d} b_d \tag{4.19}$$

hvor b_i er primitive vektorer i det resiproke gitter og n_i heltall. Fordi k bare er interessant på en resiprok gittervektor nær vil det være tilstrekkelig å la n_i gå over N_i verdier. For k i første Brillouinsone vil derfor k ha N mulige verdier. Hvis man tar hensyn til at en elektronbølgefunksjon også har en spinndel har man resultatet:

<u>Et Bravaisgitter med N primitive enhetsceller gir $2N$ en-elektrontilstander i hvert energibånd.</u>

[3]Energigapene kan finnes perturbativt med et slikt utgangspunkt

Ved utledningen av Blochs teorem kom kravet om at k skulle være reell inn fordi krystallen var uendelig. Ved endelige krystall kan en få løsninger med komplekse k som tilsvarer elektrontilstander lokalisert til randen av krystallet. Komplekse k verdier er og stikkordet når man skal se på nye mulige tilstander når krystallet har andre defekter.

Antallet elektrontilstander per k-volum per energibånd er gitt ved at det er $2N$ jevnt fordelte tilstander på et k-volum $(2\pi)^d/(v_E)$ som er volumet til en primitiv celle i det resiproke gitter, j.m.f. (**??**). Dette gir en tilstandstetthet i k-rommet per energibånd n:

$$\rho_n(k) = \frac{2V}{(2\pi)^d},\ V = Nv_E \tag{4.20}$$

I mange sammenhenger, f.eks. ved bruk av statistisk mekanikk, er man mer opptatt av en tilstandstetthet $g_n(E)$ på energiskalaen. Antall tilstander per volum per energiintervall p.g.a. bånd n må være gitt av:

$$\int_{\epsilon=0}^{E_n(k)} g_n(\epsilon)d\epsilon = \int_{k'^2\leq k^2} \frac{2}{(2\pi)^d} d^dk',\ \text{for alle k i første Brillouinsone} \tag{4.21}$$

i grensen $V \to \infty$. Formelt ser man da at:

$$g_n(\epsilon) = \int \frac{2d^dk'}{(2\pi)^d}\delta(\epsilon - E_n(k')) \tag{4.22}$$

hvor integralet over går over første Brillouinsone [2, s.143]. I en dimensjon kan dette forenkles[4] ved identiteten:

$$\delta(g(x)) = \frac{1}{|g'(x_0)|}\delta(x),\ x_0 \text{ eneste nullpunkt til } g \tag{4.23}$$

Anta at $E_n(k_0) = \epsilon$ for bare en k_0 og at $E_n'(k_0) \neq 0$. Da finnes:

$$g_n(\epsilon) = \frac{2}{2\pi E_n'(k_0)},\ E_n(k_0) = \epsilon \tag{4.24}$$

Ved å definere $E_n(k) = K_n^2$ har man alternativt (j.m.f. [9, s.277]):

$$g_n(\epsilon) = \frac{1}{2\pi K_n}k'(K_n) \tag{4.25}$$

Singulariteter i integranden i (**??**) kalles van Hove singulariteter. I en dimensjon svarer dette til $\frac{\partial}{\partial k}E_n(k) = 0$ slik at også g_n blir singulær i en dimensjon.

[4] Kan generaliseres til flere dimensjoner [2, s.144].

Del II

Matematisk grunnlag

I det følgende vil noen av basiselementene i den matematiske behandlingen av kvantemekanikken bli gjennomgått. Da dette i seg selv er et ganske stort program vil jeg begrense meg til noe som svarer til en første halvdel (optimistisk!). Denne halvdel vil da alt vesentlig bestå i en oppbygning av det matematiske apparat. Teorem som ligger noe på siden av det egentlige tema (Kvantemekanikk) vil derfor forekomme, f.eks. hvis jeg synes resultatet (eller beviset) er pent.

Mitt leksikon i denne forbindelsen har vært [23, kap.4-9], men jeg har og støttet meg til [17, 12, 20]. Notasjonen vil stort sett følge førstnevnte referanse.

En motivasjon for å studere de matematiske aspektene ved kvantemekanikken (fra en fysikers synsvinkel) synes jeg ligger i tittelen på kapittel VIII.5 i [17]:

> 'Formal manipulation is a touchy business:Nelsons example'

For den som ikke er overbevist følger et sitat fra samme kapittel:

> Let D be a dense domain of essential self-adjointness for A and B. Suppose further that $A : D \to D$ and $B : D \to D$. Then, if $AB\phi - BA\phi = 0$ for all $\phi \in D$, A commutes with B (FALSE!).

Kapittel 5

Lineære operatorer og deres adjungerte

5.1 Basisbegrep

La $\mathcal{H}_i$ være vektorrom over $\mathbf{K}$. En operator T definert på $D(T) \subset \mathcal{H}_1$ til $\mathcal{H}_2$ er lineær hvis:

$$T(af) = aT(f), \quad a \in \mathbf{K}, f \in D(T) \tag{5.1}$$

$$T(f+g) = Tf + Tg, \qquad f, g \in D(T) \tag{5.2}$$

$D(T)$ er definisjonsområdet til T og $R(T) = T(D(T)) = \{Tf : f \in D(T)\} \subset \mathcal{H}_2$ er verdiområdet. Hvis $\mathcal{H}_2 = \mathbf{K}$ er T en lineærfunksjonal. I det følgende vil alle operatorer være lineære og ordet "lineær" utelates heretter. Unntakene er tilfeller hvor jeg finner det på sin plass å understreke nettopp denne egenskapen.

Hvis $Tf = 0 \Rightarrow f = 0$, så kan T^{-1} defineres ved:

$$D(T^{-1}) = R(T), \quad T^{-1}g = f \text{ når } g = Tf \tag{5.3}$$

Denne definisjonen er entydig ved at det til hver $g \in R(T)$ kun svarer en $f \in D(T)$;$Tf_1 - Tf_2 = T(f_1 - f_2) = 0 \Rightarrow f_1 = f_2$.

En lineærkombinasjon av to operatorer er definert ved:

$$D(aT + bS) = D(T) \cap D(S), \quad (aT + bS)f = aTf + bSf \tag{5.4}$$

Av overstående er det klart at mengden av alle operatorer fra $\mathcal{H}_1$ til $\mathcal{H}_2$ med definisjonsmengde $D \subset \mathcal{H}_1$ er et vektorrom.

Produktet defineres ved:

$$D(ST) = \{f \in D(T) : Tf \in D(S)\}, \quad (ST)f = S(Tf) \tag{5.5}$$

Begge disse definisjonene er eksempler på maksimalt definerte operatorer. Hvis man utelater å spesifisere definisjonsområdet til en operator, vil det maksimalt store definisjonsområdet være underforstått. Det er verdt å understreke at i symbolet T for en operator så er virkning og definisjonsområde inneholdt på lik linje. Dette er på samme måte som ved en referanse til et Hilbertrom $\mathcal{H}_1$, hvor en implisitt referer til $(\mathcal{H}_1, \langle\cdot|\cdot\rangle_1)$.

La S, T være operatorer fra $\mathcal{H}_1$ til $\mathcal{H}_2$. En sier at $S \subset T$ hvis $D(S) \subset D(T)$ og $Tf = Sf$ når $f \in D(S)$. T er da en ekstensjon til S og S en restriksjon av T. En definerer grafen til T ved $G(T) = \{(f, Tf) \in \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 : f \in D(T)\}$. Har da $S \subset T \Leftrightarrow G(S) \subset G(T)$ som forklarer notasjonen med mengdesymbolet $\subset$. Det er ikke uvanlig å definere operatoren nettopp ved grafen til operatoren.

Underrommet $N(T) = \{f \in D(T) : Tf = 0\}$ kalles nullrommet eller kjernen til T. Det er forbausende hvor mye informasjon om en lineær funksjonal som ligger i $N(T)$:

Teorem 5.1 *La $\mathcal{H}$ være et vektorrom over $\mathbf{K}$ og $T, T_1, \ldots, T_n$ lineærfunksjonaler ,$D(T) = D(T_i) = \mathcal{H}$. Hvis $D(T) \supset \cap_{i=1}^n D(T_i)$, så finnes konstanter $a_i \in \mathbf{K}$ slik at:*

$$T = \sum_{i=1}^{n} a_i T_i \tag{5.6}$$

Bevis. Et induksjonsbevis velges.

Basis steget: Anta $n = 1$. Hvis $T_1 = 0$ må også $T = 0$ fordi $N(T) \supset N(T_1) = \mathcal{H}$. Hvis $T_1 \neq 0$ finnes en f_0 slik at $T_1 f_0 = 1$. For alle f vil da $T_1(f - T_1(f)f_0) = 0$. Fordi $N(T) \supset N(T_1)$ vil derfor $Tf = T(f_0)T_1 f$.

Induksjonstrinnet: Anta så at påstanden gjelder for $n-1, n > 1$. Hvis $N(T_n) \supset \cap_{i=1}^{n-1} N(T_i)$, så gjelder $N(T) \supset \cap_{i=1}^n N(T_i) = \cap_{i=1}^{n-1} N(T_i)$ og påstanden holder per induksjonsantagelse. La så $N(T_n) \not\supset \cap_{i=1}^{n-1} N(T_i)$. Da finnes en $f_0 \in \cap_{i=1}^{n-1} N(T_i)$ slik at $T_n f_0 = 1$. Lar $T_0 = T - T(f_0)T_n$ og viser at $N(T_0) \supset \cap_{i=1}^{n-1} N(T_i)$. Da er man framme etter induksjonsantagelsen. Antar $f \in \cap_{i=1}^{n-1} N(T_i)$. Da vil $T_n(f - T_n(f)f_0) = T_n f - T_n f = 0$ og $T_i(f - T_n(f)f_0) = 0 - 0 = 0$ for $i = 1, \ldots, n-1$. Har at $T_0 f = T(f - T_n(f)f_0)$ og at $N(T) \supset \cap_{i=1}^n N(T_i)$. Altså $f - T_n(f)f_0 \in N(T)$ og $T_0 f = 0$. $\boxed{\hbar}$

5.2 Kontinuerlige operatorer

La nå $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$ være normerte rom. $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ er kontinuerlig hvis $\|f_n\|_1 \to 0$ gir $\|Tf_n\|_2 \to 0$. Dette stemmer overens med den mere generelle definisjonen av kontinuitet: En avbildning er kontinuerlig hvis det inverse bildet til åpne mengder er åpne mengder. For en lineær avbildning er det klart at det er tilstrekkelig å se på egenskapen i origo. Jeg understreker at kontinuiteten (selvsagt) avhenger av topologien til $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$. Innføringen av distribusjoner som kontinuerlige lineær funksjonaler på $C_0^\infty(X)$ er et eksempel på dette. Der er ikke topologien på funksjonsrommet definert via noen av de vanlige integralnormene.

En operator T er begrenset hvis det finnes en $C \geq 0$ slik at $\|Tf\|_2 \leq C\|f\|_1$ for alle $f \in D(T)$. For en begrenset operator defineres normen:

$$\|T\| = \inf\{C : \|Tf\| \leq C\|f\| \text{ for alle } f \in D(T)\} \tag{5.7}$$

Det er klart at en begrenset operator er kontinuerlig; $\|Tf_n\| \leq \|T\|\,\|f_n\| \to 0$ hvis $f_n \to 0$. Det motsatte er også tilfelle! For motsigelse antas at T er ubegrenset. Da finnes en f_n for alle

n slik at $\|Tf_n\| > n\,\|f_n\|$. Hvis ikke dette gjaldt for $n = n'$ ville n' være en begrensning av T. Uten tap av generalitet kan det antas at $\|f_n\| = 1/n$; $f_n = f_n'/(n\,\|f_n'\|)$. Tilsammen vil $\|Tf_n\| > 1$ og $f_n \to 0$ som er i strid med kontinuitet.

Teorem 5.2 *La T være en lineær begrenset operator fra et normert rom $\mathcal{H}_1$ til et Banach rom $\mathcal{H}_2$. T har da en unik utvidelse S definert på $\overline{D(T)} = D(S)$.*

Bevis. Alt følger ved å se på en (f_n) fra $D(T)$ hvor $f_n \to f \in D(S)$, og ved definisjonen $Sf = \lim Tf_n$. T kontinuerlig sikrer entydigheten og $\mathcal{H}_2$ Banach sørger for at grensen eksisterer. $\boxed{\hbar}$

For mengden av begrensede operatorer fra $\mathcal{H}_1$ til $\mathcal{H}_2$ med hele $\mathcal{H}_1$ som definisjonsområde benyttes betegnelsen $B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$. Betegnelsen $C(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ er heller ikke uvanlig da kontinuerlig er identisk med begrenset for lineære operatorer. Forkortelsen $B(\mathcal{H}) = B(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ benyttes for operatorer på $\mathcal{H}$. Hvis $\mathcal{H}$ er komplett, er det ikke vanskelig å vise at $B(\mathcal{H})$ blir en Banach algebra, d.v.s. en normert komplett algebra.

Vil nå se på $B(\mathcal{H}, \mathbf{K})$, d.v.s. mengden av de kontinuerlige lineærfunksjonaler. $B(\mathcal{H}, \mathbf{K})$ kalles det duale rom til $\mathcal{H}$ (normert rom) og skiller seg fra det algebraiske duale til $\mathcal{H}$ (vektorrom) ved kravet om kontinuitet. Hvis $\mathcal{H}$ er et Hilbertrom vil alle $g \in \mathcal{H}$ definere en kontinuerlig funksjonal ved $T_g f = \langle g|f\rangle$, men i tillegg vil alle kontinuerlige funksjonaler være på denne måten:

Teorem 5.3 (F.Riesz) *La $\mathcal{H}$ være et Hilbertrom. Alle $g \in \mathcal{H}$ induserer en $T_g \in B(\mathcal{H}, \mathbf{K})$, $\|T_g\| = \|g\|$. Denne avbildningen fra $\mathcal{H}$ til $B(\mathcal{H}, \mathbf{K})$ er bijektiv og antilineær, $T_{ah+bg} = a^* T_h + b^* T_g$.*

Bevis. La først $g \in \mathcal{H}$ være gitt og se på operatoren $T_g(\cdot) = \langle g|\cdot\rangle$. T_g er opplagt en lineær funksjonal. En har fra Schwarz ulikhet $|T_g f| \leq \|g\|\,\|f\|$ slik at $\|T_g\| \leq \|g\|$. Av $T_g g = \|g\|^2$ følger det at $\|T_g\| \geq \|g\|$ slik at $\|T_g\| = \|g\|$. Dermed er T_g også kontinuerlig. Avbildningen $g \mapsto T_g$ er injektiv fordi overstående gir $T_g = 0 \Rightarrow g = 0$ og den er antilineær; $cg + h \mapsto T_{cg+h}(\cdot) = \langle cg + h|\cdot\rangle = c^* T_g + T_h$. Det gjenstår å vise at til alle $T \in B(\mathcal{H}, \mathbf{K})$ svarer en g. Velg en $g \in N(T)^\perp$ slik at $\|g\| = \|T\|$. Dette valget er mulig fordi $\mathcal{H}$ er et Hilbertrom; $T = 0$ gir $g = 0$ og $T \neq 0$ gir $N(T)^\perp \neq \{0\}$. Anta så at $T \neq 0$. Fordi $N(T) \subset N(T_g)$ følger det at det finnes en $a \in \mathbf{K}$ slik at $T_g = aT$. Ved $T_g g = \|T\|^2 = aTg$ finnes $a = \frac{\|T\|^2}{Tg}$ og $T = T_g/a = T_{g/a^*}$. $\boxed{\hbar}$

5.3 Hilbert-adjungering

Anta så at $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$ er Hilbertrom. To operatorer $S : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ og $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ er formelt adjungerte [1] til hverandre hvis:

$$\langle f|Tg\rangle = \langle Sf|g\rangle\,, \quad \text{for alle } g \in D(T), f \in D(S) \tag{5.8}$$

[1] Mer presist: Hilbert adjungerte.

Fra det ovenstående er det klart at en operator kan ha mange formelt adjungerte. En ønsker ut fra en operator å definere en unik adjungert operator. Det naturlige er å søke en maksimal definisjon og en ender opp med at den adjungerte må være en utvidelse til alle formelt adjungerte. For å sikre entydighet begrenser en seg til operatorer T hvor $D(T)$ ligger tett i $\mathcal{H}_1$. Den (Hilbert) adjungerte T^* til T defineres da ved:

$$D(T^*) \stackrel{def}{=} \{g \in \mathcal{H}_2 : \text{ det finnes en } h_g \in \mathcal{H}_1 \tag{5.9}$$
$$\text{slik at } \langle h_g | f\rangle = \langle g|Tf\rangle \text{ for alle } f \in D(T)\} \tag{5.10}$$
$$= \{g \in \mathcal{H}_2 : \text{ funksjonalen } f \mapsto \langle g|Tf\rangle \tag{5.11}$$
$$\text{er kontinuerlig på } D(T)\} \tag{5.12}$$

$$T^*g = h_g, \quad \langle h_g|f\rangle = \langle g|Tf\rangle \text{ for alle } f \in D(T), g \in D(T^*) \tag{5.13}$$

Her er h_g unik fordi T_{h_g} er den unike utvidelseen til funksjonalen gitt ved $f \mapsto \langle g|Tf\rangle$. Entydigheten skyldes altså at T er definert tett. Mere direkte har man: $\langle h_g|f\rangle = \left\langle h'_g|f\right\rangle, \forall f \in D(T) \Rightarrow h_g - h'_g \in D(T)^\perp = \{0\}$.

La nå $U : \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_1, U(f_1, f_2) = (f_2, -f_1)$. For de (jeg f.eks.) som liker å tenke på en operator som dens graf kunne følgende teorem vært tatt som en definisjon av den adjungerte:

Teorem 5.4 *La T være en tett definert operator fra $\mathcal{H}_1$ til $\mathcal{H}_2$. Her er H_i Hilbertrom. Da vil:*

$$G(T^*) = U(G(T)^\perp) = (UG(T))^\perp \tag{5.14}$$

Bevis.

$$G(T^*) = \{(g,h) \in \mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_1 : \langle g|Tf\rangle_2 = \langle h|f\rangle_1 \forall f \in D(T)\} \tag{5.15}$$
$$= \{(g,h) \in \mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_1 : \langle (g|h), (Tf, -f)\rangle_{21} = 0 \forall (f, Tf) \in G(T)\} \tag{5.16}$$
$$= (UG(T))^\perp = U(G(T)^\perp) \tag{5.17}$$

Siste likhet fulgte av at U er en isomorfi. $\boxed{\hbar}$

I det etterfølgende er det og praktisk å definere $V : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_1, V(f_1, f_2) = (f_2, f_1)$. Noen av egenskapene til den adjungerte er inneholdt i følgende teorem:

Teorem 5.5 *La T, S være tett definerte operatorer fra $\mathcal{H}_1$ til $\mathcal{H}_2$.*

1. *$N(T^*) = R(T)^\perp$.*

2. *Hvis T^* også er tett definert,så er $T \subset T^{**}$. Spesielt hvis T er begrenset så er T^{**} den unike utvidelseen til hele $\mathcal{H}_1$.*

3. *T er begrenset hvis og bare hvis $T^* \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$. Hvis T er begrenset vil $\|T^*\| = \|T\|$.*

4. *Hvis $T \subset S$,så er $S^* \subset T^*$.*

5. *Hvis T er injektiv og $R(T)$ er tett, så vil $T^{-1*} = T^{*-1}$.*

6. *$(aT)^* = a^*T^*$ for alle $a \in \mathbf{K} \setminus \{0\}$.*

7. *Hvis $T + S$ er tett definert vil $(T + S)^* \supset T^* + S^*$.*

8. *Hvis $S \in B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ vil $(T + S)^* = T^* + S^*$.*

Bevis.

(a) $\langle g|Tf\rangle = 0 = \langle T^*g|f\rangle$ gjelder for alle $g \in N(T^*) \subset D(T^*), f \in D(T)$ eller hvis og bare hvis $g \in R(T)^\perp, f \in D(T)$. At $\langle T^*g|f\rangle = 0, \forall f \in D(T) \Rightarrow T^*g = 0$ avhenger av at $\overline{D(T)} = \mathcal{H}_1$.

(b) T og T^* er formelt adjungerte til hverandre. Fordi T^{**} er en utvidelse til alle formelt adjungerte til T^* vil spesielt $T \subset T^{**}$. Hvis T er begrenset har den en unik utvidelse og denne må da være lik T^{**}, j.m.f. **c**.

(c) La T være begrenset. Da vil $|\langle g|Tf\rangle| \leq \|g\|\,\|T\|\,\|f\|$. Følgelig er $f \mapsto \langle g|Tf\rangle$ kontinuerlig for alle $g \in \mathcal{H}_2$,d.v.s. $D(T^*) = \mathcal{H}_2$. Videre har man (tillater mulighet for ∞ underveis):

$$\|T^*\| = \sup\{|\langle T^*g|f\rangle| : f \in D(T), g \in \mathcal{H}_2, \|f\| = \|g\| = 1\} \tag{5.18}$$
$$= \sup\{|\langle g|Tf\rangle| : f \in D(T), g \in \mathcal{H}_2, \|f\| = \|g\| = 1\} \tag{5.19}$$
$$= \|T\| \tag{5.20}$$

Hvis $T^* \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$ gir ovenstående også at T må være begrenset.

(d) Anta $T \subset S$. La $g \in D(S^*)$,d.v.s. $f \mapsto \langle g|Sf\rangle$ er kontinuerlig på $D(S)$. Da vil $f \mapsto \langle g|Tf\rangle = \langle g|Sf\rangle$ være kontinuerlig på $D(T) \subset D(S)$. Dermed er $D(S^*) \subset D(T^*)$ og $T^*g = S^*g$ når $g \in D(S^*)$.

(e) Anta at T er injektiv og $R(T)$ er tett. Har da $N(T^*) = R(T)^\perp = \{0\}$ slik at T^* er injektiv.

$$G(T^{*-1}) = V^{-1}G(T^*) = V^{-1}U(G(T)^\perp) \tag{5.21}$$
$$= U^{-1}V(G(T)^\perp) = U^{-1}(VG(T))^\perp \tag{5.22}$$
$$= U^{-1}(G(T^{-1}))^\perp = G(T^{-1*}) \tag{5.23}$$

Overgangen $V(G(T)^\perp) = (VG(T))^\perp$ er korrekt fordi V er en isomorfi. Se på det generelle tilfellet hvor W er en isomorfi fra et Hilbertrom $\mathcal{H}_a$ til et Hilbertrom $\mathcal{H}_b$. Anta at $M \subset \mathcal{H}_a$. Da gjelder:$W(M^\perp) = (WM)^\perp$ [23, s.66].

(f) $f \mapsto \langle g|aTf\rangle = \langle a^*g|Tf\rangle$ gir alt. Merk at dette ikke gjelder for $a = 0$ fordi $(0T)^*$ er definert på hele $\mathcal{H}_2$ mens $0T^*$ bare er definert på $D(T^*)$. Derimot vil $(aT)^* = T^*a^*$ gjelde også for $a = 0$.

(g) $T+S$ tett definert er nødvendig for at $(T+S)^*$ skal være definert. La $g \in D(T^*+S^*) = D(T^*) \cap D(S^*)$. For alle $f \in D(T+S) = D(T) \cap D(S)$ vil da:

$$f \mapsto \langle (T^* + S^*)g|f\rangle = \langle T^*g|f\rangle + \langle S^*g|f\rangle = \langle g|(T+S)f\rangle \tag{5.24}$$

være kontinuerlig. Dermed vil $g \in D((T+S)^*)$ og $(T+S)^*g = T^*g + S^*g$.

(h) $T+S$ er nå tett definert fordi $D(T+S) = D(T)$. Trenger da bare å vise at $D((T+S)^*) \subset D(T^* + S^*) = D(T^*)$. La $g \in D((T+S)^*)$. For alle $f \in D(T)$ gjelder da:

$$\langle (T+S)^*g|f\rangle = \langle g|Tf\rangle + \langle g|Sf\rangle \tag{5.25}$$

Dermed er $g \in D(T^*)$.

$\boxed{\hbar}$

Den adjungerte til produktet av to operatorer er beskrevet ved:

Teorem 5.6 *La $T_1 : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ og $T_2 : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_3$ være tett definerte operatorer.*

1. *Hvis T_2T_1 er tett definert vil $(T_2T_1)^* \supset T_1^*T_2^*$.*
2. *Hvis $T_2 \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3)$ vil $(T_2T_1)^* = T_1^*T_2^*$.*

Bevis.

(a) Viser at T_2T_1 er formelt adjungert til $T_1^*T_2^*$. Da vil også $T_1^*T_2^* \subset (T_2T_1)^*$ fordi $(T_2T_1)^*$ er en utvidelse til alle formelt adjungerte til T_2T_1. La $f \in D(T_2T_1)$ og $g \in D(T_1^*T_2^*)$. Da vil $T_1f \in D(T_2)$ og $T_2^*g \in D(T_1^*)$. Finner:

$$\langle g|T_2T_1f\rangle = \langle T_2^*g|T_1f\rangle = \langle T_1^*T_2^*g|f\rangle \tag{5.26}$$

(b) Hvis $T_2 \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3)$ vil $D(T_2T_1) = D(T_1)$. Det holder da å vise $D((T_2T_1)^*) \subset D(T_1^*T_2^*)$. La $g \in D((T_2T_1)^*)$ og $f \in D(T_2T_1) = D(T_1)$. Fordi $T_2^* \in B(\mathcal{H}_3, \mathcal{H}_2)$ gjelder:

$$\langle (T_2T_1)^*g|f\rangle = \langle g|T_2T_1f\rangle = \langle T_2^*g|T_1f\rangle \tag{5.27}$$

Da må $T_2^*g \in D(T_1^*)$ og $g \in D(T_1^*T_2^*)$.

$\boxed{\hbar}$

La nå T være en operator definert på $\mathcal{H}$. T er Hermitesk eller formelt selvadjungert hvis $\langle Tf|g\rangle = \langle f|Tg\rangle$ for alle $f, g \in D(T)$. Hvis T er Hermitesk og $\overline{D(T)} = \mathcal{H}$ er T symmetrisk. Når $T = T^*$ er T selvadjungert. Fordi T^* er en utvidelse til alle de formelt adjungerte er det klart at T er symmetrisk hvis og bare hvis $T \subset T^*$. Hvis T er Hermitesk vil den kvadratiske formen $\langle f|Tf\rangle = \langle Tf|f\rangle^* = \langle f|Tf\rangle^*$ være reell. For operatorer i $B(\mathcal{H})$ er det ingen forskjell på Hermitesk,symmetrisk og selvadjungert.

For en selvadjungert operator blir den inverse (hvis den finnes) også selvadjungert:

Teorem 5.7 *La $T = T^*$. Hvis T^{-1} eksisterer, så vil T^{-1} også være selvadjungert.*

Bevis. $R(T)^\perp = N(T^*) = N(T) = \{0\}$ slik at T^{-1} er tett definert. $T^{-1*} = T^{*-1} = T^{-1}$. $\boxed{\hbar}$

5.4 Andre konvergensbegrep

Har tidligere innført en topologi (den uniforme) på $B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ ved normen. Blant de mange vanlige topologiene på $B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ er det spesielt to andre som er verdt å nevne:

Den sterke topologien er gitt ved at (T_n) konvergerer sterkt mot T hvis $T_n f \to Tf$ for alle $f \in \mathcal{H}_1$. De vanlige notasjonene er da $T_n \xrightarrow{s} T$ eller $T = s - \lim T_n$.

Den svake topologien er gitt ved at (T_n) konvergerer svakt mot T hvis $\langle g|T_n f\rangle \to \langle g|Tf\rangle$ for alle $f \in \mathcal{H}_1, g \in \mathcal{H}_2$. Notasjonene er $T_n \xrightarrow{w} T$ eller $T = w - \lim T_n$.

Det er klart at $T_n \to T \Rightarrow T_n \xrightarrow{s} T \Rightarrow T_n \xrightarrow{w} T$ som rettferdiggjør språkbruken. Sterke og svake Cauchy følger defineres på den naturlige måten. Hvis både $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$ er komplette vil sterke henholdsvis svake Cauchy følger ha en grense. Bevisene følger ved bruk av Uniformt Begrensethetsteoremet [23, s.74].

La $S, T \in B(\mathcal{H})$ være symmetriske operatorer på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Kan da definere en ordning ved $S \leq T$ hvis $\langle f|Sf\rangle \leq \langle f|Tf\rangle$ for alle $f \in \mathcal{H}$. Følgende teorem er beroligende:

Teorem 5.8 *La $\mathcal{H}$ være et Hilbertrom og (T_n) en begrenset følge med symmetriske operatorer fra $B(\mathcal{H})$.*

1. *Hvis $T_n \xrightarrow{w} T \in B(\mathcal{H})$, så er T symmetrisk.*
2. *Hvis (T_n) er voksende (avtagende), så vil $T_n \xrightarrow{s} T \in B(\mathcal{H})$.*

Bevis.

(a) $\langle f|Tg\rangle = \lim \langle f|T_n g\rangle = \lim \langle T_n f|g\rangle = \langle Tg|f\rangle$.

(b) Følgen $(\langle f|T_n f\rangle)$ er voksende og begrenset for alle $f \in \mathcal{H}$ og følgelig konvergent. Den sesquilineære formen $s(g,f) = \langle g|(T_n - T_m)f\rangle$ er da begrenset av $\|T_n - T_m\| \leq \|T_n\| + \|T_m\| \leq 2\sup\|T_n\| = C$. Schwarz ulikhet gir da (s er ikke-negativ fordi T_n er symmetrisk):

$$\|(T_n - T_m)f\|^2 = \langle (T_n - T_m)f|(T_n - T_m)f\rangle = s((T_n - T_m)f, f) \tag{5.28}$$
$$\leq [s((T_n - T_m)f, (T_n - T_m)f)s(f,f)]^{1/2} \tag{5.29}$$
$$\leq \left[C^3 \|f\|^2 \langle f, (T_n - T_m)f\rangle\right]^{1/2} \to 0,\ n, m \to 0 \tag{5.30}$$

Dermed er T_n en sterk Cauchy-følge.

$\boxed{\hbar}$

5.5 Ortogonale projeksjoner og unitære operatorer

La nå M være et lukket underrom til et Hilbertrom $\mathcal{H}$. Projeksjonsteoremet gir nå at alle $f \in \mathcal{H}$ kan representeres entydig ved $f = g + h$ hvor $g \in M$ og $h \in M^{\perp}$. Den ortogonale projeksjonen P_M på M er definert ved $P_M f = g$. Hvis P er en projeksjon er det klart at P er idempotent,$P^2 = P$. Ved $\langle f_P + f_{I-P} | P(f_P + f_{I-P}) \rangle = \langle f_P + f_{I-P} | f_P \rangle = \langle f_P | f_P \rangle$ hvor $f_P \in R(T)$ og $f_{I-P} \in R(T)^{\perp}$ følger at P er selvadjungert. Det er ikke vanskelig å vise det motsatte,d.v.s. at en operator som er idempotent og selvadjungert er en ortogonal projeksjon.

For ortogonale projeksjoner får ordningen $P_M \leq P_N$ en spesielt hyggelig konsekvens:

Teorem 5.9 *La $\mathcal{H}$ være et Hilbertrom og P_M, P_N ortogonale projeksjoner på de lukkede underrom $M, N \subset \mathcal{H}$. Da vil $P_M \leq P_N$ hvis og bare hvis $M \subset N$. Spesielt er $P_{\mathcal{H}} = I$ slik at $P_M \leq I$.*

Bevis. Anta at $M \subset N$. La $f \in \mathcal{H}$ og $f = g + h$ med $g \in N, h \in N^{\perp}$. Sett videre $g = g_1 + h_1$ hvor $g_1 \in M, h_1 \in M^{\perp}$. Da vil $\langle f | P_N f \rangle = \langle g | g \rangle \geq \langle g_1 | g_1 \rangle = \langle f | P_M f \rangle$, d.v.s. $P_N \geq P_M$.

Anta så $P_M \leq P_N$. Da vil $\|P_M f\|^2 = \langle f | P_M f \rangle \leq \langle f | P_N f \rangle = \|P_N f\|^2$. Dette gir $N(P_N) \subset N(P_M)$ og $M = N(P_M)^{\perp} \subset N(P_N)^{\perp} = N$. $\boxed{\hbar}$

Overstående gir at følgende teorem er rimelig:

Teorem 5.10 *La (P_n) være en monotont voksende følge av ortogonale projeksjoner på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Da finnes en $P = s - \lim P_n$. P er den ortogonale projeksjon på $\overline{\cup_n R(P_n)}$.*

Bevis. Fordi P er en begrenset følge av monotont voksende symmetriske operatorer finnes en sterk grense P som også er symmetrisk. Dette er en ortogonal projeksjon fordi for alle $f, g \in \mathcal{H}$ er $\langle f | P^2 g \rangle = \langle Pf | Pg \rangle = \lim \langle P_n f | P_n g \rangle = \lim \langle f | P_n g \rangle = \langle f | Pg \rangle$. Dermed er P idempotent og symmetrisk.

Må vise $R(P) = \overline{\cup_n R(P_n)}$. La $f \in \overline{\cup_n R(P_n)}^{\perp}$. Da vil $P_n f = 0$ for alle n,d.v.s. $Pf = \lim P_n f = 0$. Dermed er $\overline{\cup_n R(P_n)}^{\perp} \subset N(T)$. La så $f \in \cup_n R(P_n)$. Da vil $Pf = \lim P_n f = f$ og $f \in R(P)$. Dermed vil $R(P) = \overline{\cup_n R(P_n)}$ fordi $R(P)$ er lukket. $\boxed{\hbar}$

La $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ være Hilbertrom. En operator $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ er en isometri hvis $D(U) = \mathcal{H}_1$ og $\|Uf\| = \|f\|$ for alle $f \in \mathcal{H}_1$. Hvis $R(U) = \mathcal{H}_2$ er U en isomorfi[5, s.38] mellom $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$. U er da en unitær operator. Hvis det finnes en isomorfi mellom $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$ sies Hilbertrommene å være isomorfe,$\mathcal{H}_1 \cong \mathcal{H}_2$. U er en partiell isometri hvis det finnes et lukket underrom $M \subset \mathcal{H}_1$ slik at $UM^{\perp} = \{0\}$,og U er en isometri fra M regnet som et Hilbertrom til $R(U)$ regnet som et Hilbertrom. M og $R(U)$ kalles da for henholdsvis initialdomene og sluttdomene til U.

Polarisasjonsidentiteten gir direkte $\langle Uf | Ug \rangle_2 = \langle f | g \rangle_1$ for alle f, g i initialdomene M til U. Fordi $UM^{\perp} = 0$ får man gratis $\langle Uf | Ug \rangle = \langle UP_M f | Ug \rangle = \langle P_M f | g \rangle$ for alle f, g i $\mathcal{H}_1$. Dermed blir $U^*U = P_M$. Ved $\|U^*Uf\| = \|P_M f\| = \|Uf\|$ følger at $\|U^*h\| = \|h\|$ for alle $h \in R(U) = N$. Videre er $N(U^*) = R(U)^{\perp} = N^{\perp}$ slik at U^* er en partiell isometri fra N til M. Da følger $UU^* = (U^*)^*U^* = P_N$.

For spesialtilfellet at U er unitær finnes $U^*U = I_1$ og $UU^* = I_2$.

Kapittel 6

Lukkede lineære operatorer

I det følgende vil alle rom være Hilbertrom. Noen teorem som ikke direkte involverer indreproduktet kunne og blitt bevist for Banachrom. Spesielt gjelder dette Lukket Graf Teoremet[12, s.292].

6.1 Lukket graf teoremet

En operator $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ er lukket hvis $G(T)$ er lukket i $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$. Tillukningen $\overline{T}$ til en operator T defineres ved $G(\overline{T}) = \overline{G(T)}$. $\overline{T}$ er bare definert hvis $\overline{G(T)}$ er en graf. $\overline{G(T)}$ er en graf hvis og bare hvis $\overline{G(T)}$ er et underrom til $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ med egenskapen $(0, g) \in \overline{G(T)} \Rightarrow g = 0$.

La T være en lukket operator med domene $D(T)$. $D \subset D(T)$ er en 'core'[1]

til T hvis $T = \overline{T|_D}$. Hvis T er en lukkbar operator vil $D(T)$ være en 'core' til $\overline{T}$.

For en lineær operator er følgende kun en reformulering. T er lukket hvis og bare hvis: La $f_n \to f$ hvor (f_n) ligger i $D(T)$ og anta at (Tf_n) er konvergent i $\mathcal{H}_2$. Da vil $f \in D(T)$ og $Tf_n \to Tf$.

På $D(T)$ defineres grafnormen via grafindreproduktet:

$$\langle f|g\rangle_T = \langle f|g\rangle + \langle Tf|Tg\rangle \tag{6.1}$$

Da er det klart at T er en lukket operator hvis og bare hvis $(D(T), \langle\cdot|\cdot\rangle_T)$ er et Hilbertrom. Et underrom X til et Hilbertrom er et Hilbertrom hvis og bare hvis X er lukket. En annen vanlig definisjon av grafnormen er:

$$\|f\|_\Gamma = \|f\| + \|Tf\| \tag{6.2}$$

Disse to normene er ekvivalente ved at:

$$\|f\|_T{}^2 \leq \|f\|_\Gamma{}^2 \leq 2\|f\|_T{}^2 \tag{6.3}$$

For begrensede operatorer er situasjonen spesielt enkel:

[1] Vet ikke om dette er standardisert norsk betegnelse. Etter en runde i miljøet på Matematisk Institutt fikk jeg ingen forslag til en standardisert betegnelse. De fleste falt tilbake til 'core'. På norsk synes jeg 'core' er litt for langt ute på kanten av det tillatte.

Teorem 6.1 *Alle begrensede operatorer er lukkbare. En begrenset operator T er lukket hvis og bare hvis $D(T)$ er lukket. $\overline{T}$ er den entydige utvidelsen av T til $\overline{D(T)}$.*

Bevis. La T være begrenset og anta at (f_n) er en følge fra $D(T)$ slik at $f_n \to 0$ og $Tf_n \to g$. Kontinuiteten til T gir da at $g = 0$. Dermed er T lukkbar. Tillukningen er gitt ved den unike ekstensjonen til $D(T)$: Hvis $f_n \to f$ og $Tf_n \to g$ hvor (f_n) ligger i $D(T)$, så vil $f \in \overline{D(T)}$ og $Sf = g$ hvor S er ekstensjonen til $\overline{D(T)}$. Anta så at T er lukket og begrenset. La $f_n \to f$ hvor $f_n \in D(T)$. Fordi T er kontinuerlig vil $\lim Tf_n$ eksistere. Fordi T er lukket vil dermed $f \in D(T)$ og $D(T)$ er lukket. $\boxed{\hbar}$

Det er viktig å merke seg at den adjungerte til en operator alltid er lukket:

Teorem 6.2 *La $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ være en tett definert operator.*

1. *T^* er lukket.*
2. *T er lukkbar hvis og bare hvis T^* er tett definert: da har man $\overline{T} = T^{**}$.*
3. *Hvis T er lukkbar er $\overline{T}^* = T^*$.*

Bevis.

(a) $G(T^*) = (UG(T))^\perp$ som dermed er lukket.

(b) Hvis $D(T^*)$ er tett definert vil:

$$G((T^*)^*) = U^{-1}(G(T^*)^\perp) = U^{-1}U(G(T)^{\perp\perp}) = \overline{G(T)} \tag{6.4}$$

Dermed er $\overline{G(T)}$ en graf og $\overline{T} = T^{**}$. Hvis T er lukkbar finnes:

$$G(\overline{T}) = G(T)^{\perp\perp} = (U^{-1}G(T^*))^\perp \tag{6.5}$$
$$= \{(f, g) \in \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 : \langle (f|g), (T^*h, -h)\rangle_{12} = 0 \ \forall h \in D(T^*)\} \tag{6.6}$$

For at $(0, g) \in G(\overline{T})$ skal gi $g = 0$ må $D(T^*)^\perp = \{0\}$,d.v.s. at T^* må være tett definert.

(c) Følger direkte som over ved $G(T)^\perp = \overline{G(T)}^\perp$.

$\boxed{\hbar}$

Symmetriske operatorer spiller en stor rolle i kvantemekanikken. De er alltid lukkbare:

Teorem 6.3 *La $T : \mathcal{H} \to H$ være en symmetrisk operator. Da er T lukkbar og $\overline{T}$ er symmetrisk.*

Bevis. Har $T \subset T^*$, d.v.s. at T er inneholdt i en lukket operator. Da vil $\overline{G(T)} \subset G(T^*)$ og $\overline{G(T)}$ må være en graf. At $\overline{T}$ er symmetrisk følger direkte ved å se på $(f, g) \in D(\overline{T})$ og en følge (f_n, g_n) fra $D(T)$ slik at $(f_n, g_n) \to (f, g)$:

$$\left\langle g|\overline{T}f\right\rangle = \lim \langle g_n|Tf_n\rangle = \left\langle \overline{T}g|f\right\rangle \tag{6.7}$$

$D(\overline{T})$ er tett fordi $D(T)$ er tett. $\boxed{\hbar}$

Anta at man har en operator $\mathcal{H}_0$ og kjenner alle dens egenskaper. Det er da rimelig at disse egenskapene skal kunne brukes til å studere operatoren $\mathcal{H}_0 + \lambda V$ hvis λV er en liten pertubasjon til $\mathcal{H}_0$ [11]. Formelt kan man komme langt ved å anta at ved λ tilstrekkelig liten så gir rekkeutviklinger i λ mening [8]. Fermi's Gyldne Regel er et kjent (og nyttig!) eksempel på et slikt resultat i kvantemekanikken. Da 'liten' er for upresist trenger man noen definisjoner.

La $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ og $S : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_3$. S sies å være T-begrenset dersom $D(T) \subset D(S)$ og det finnes en $C > 0$ slik at:

$$\|Sf\| \leq C(\|f\| + \|Tf\|) \stackrel{def}{=} C\,\|f\|_\Gamma \ \text{ for alle } f \in D(T) \tag{6.8}$$

Dersom S er T-begrenset defineres T-begrensningen til S ved infinum til alle tall $b \geq 0$ hvor det finnes en $a \geq 0$ slik at:

$$\|Sf\| \leq a\,\|f\| + b\,\|Tf\|\,, \quad \forall f \in D(T) \tag{6.9}$$

Hvis $S \in B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_3)$ har man $\|Sf\| \leq \|S\|\,\|f\|$ slik at S har T-begrensning 0 for vilkårlig operator $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$.

Følgende teorem gir at hvis S er T-begrenset med T-begrensning mindre enn 1, så vil $T + S$ være lukket hvis T er det:

Teorem 6.4 *La $S, T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ og anta at S er T-begrenset med T-begrensning mindre enn 1. Da er $T + S$ lukket hvis og bare hvis T er lukket.*

Bevis. Ideen er å vise at $\|\cdot\|_T$ og $\|\cdot\|_{T+S}$ er ekvivalente. Av antagelsen følger at det finnes en $b < 1$ og en $a > 0$ slik at $\|Sf\| \leq a\,\|f\| + b\,\|Tf\|$ for alle $f \in D(T)$. Finner da:

$$(1 - b)\,\|Tf\| \leq a\,\|f\| + \|Tf\| - \|Sf\| \leq a\,\|f\| + \|(T + S)f\| \tag{6.10}$$

$$\|(T + S)f\| \leq \|Sf\| + \|Tf\| \leq a\,\|f\| + (b + 1)\,\|Tf\| \tag{6.11}$$

Dermed finnes det en $C > 0$ slik at:

$$\|Tf\| \leq C(\|f\| + \|(T + S)f\|) \tag{6.12}$$

$$\|(T + S)f\| \leq C(\|f\| + \|Tf\|) \tag{6.13}$$

Eksistensen av C følger ved å se på tilfellene $0 \leq a \leq 1$,$1 \leq a \leq 1+b$ og $1+b \leq a$. Kravene blir henholdsvis $C \geq 1/(1 - b) \geq 1 + b$, $C \geq a/(1 - b) \geq b + 1$ og $C \geq a/(1 - b) \geq a$. Den beste C er derfor gitt ved $C = \min\{1/(1 - b), a/(1 - b)\}$.

Da vil:

$$\|f\|_{\Gamma(T)} = \|f\| + \|Tf\| \leq \|f\| + C(\|f\| + \|(S+T)f\|) \leq K\,\|f\|_{\Gamma(S+T)} \tag{6.14}$$
$$\|f\|_{\Gamma(S+T)} \leq \|f\| + C(\|f\| + \|Tf\|) \leq K\,\|f\|_{\Gamma(T)} \tag{6.15}$$

ved bare å velge $K > 0$ stor nok. Det beste valget er $K = C + 1$. Normen $\|\cdot\|_T$ er da ekvivalent med $\|\cdot\|_{S+T}$ på $D(T)$. Da er $(D(T), \|\cdot\|_T)$ komplett hvis og bare hvis $(D(T), \|\cdot\|_{T+S})$ er det. Dette er det samme som at T er lukket hvis og bare hvis $T + S$ er det. $\boxed{\hbar}$

Lukket kan byttes ut med lukkbar i overstående teorem.

Hvis definisjonsområdet til en lukket operator ikke er lukket, så må operatoren være ubegrenset. Dette er et viktig faktum og forklarer hvorfor det er vanskelig å unngå ubegrensede operatorer i kvantemekanikken. Påstanden er en konsekvens av det kjente teoremet [12, s.292]:

Teorem 6.5 (Banach:Lukket graf teorem) *La $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$. Hvis T er en lukket operator og $D(T)$ er lukket, så er T begrenset.*

Bevis. Antar at $D(T) = \mathcal{H}_1$, hvis ikke kunne en se på Hilbertrommet $(D(T), \langle\cdot\rangle_1)$. T^* er dermed definert og det holder å vise at $T^* \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$. Dette vil da gi $T = T^{**} \in B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$. T er lukket slik at $D(T^*)$ er tett i $\mathcal{H}_2$. T^* er lukket. Ser på funksjonalen $L_g f = \langle T^*g|f\rangle$ på $\mathcal{H}_1$ for $\|g\| \leq 1, g \in D(T^*)$. Denne funksjonalen er punktvis begrenset: $|L_g f| = |\langle g|Tf\rangle| \leq \|Tf\|$. Dermed gir uniformt begrensethets teoremet at funksjonalen er uniformt begrenset;$\|T^*g\| = \|L_g\| \leq C$. Altså er T^* begrenset,lukket og tett definert. Da må $T^* \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$. $\boxed{\hbar}$

Lukket graf teoremet har bl.a. konsekvensene:

Korollar 6.6 *La $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ hvor $D(T) = \mathcal{H}_1$ og $D(T^*)$ tett i $\mathcal{H}_2$. Da vil $T \in B(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$. Spesielt hvis $T : \mathcal{H} \to H$ er symmetrisk og $D(T) = \mathcal{H}$ vil $T \in B(\mathcal{H})$. (Hellinger-Toeplitz)*

Bevis. Fordi $D(T^*)$ er tett i $\mathcal{H}_2$ vil T være lukkbar. Da $D(T) = \mathcal{H}_1$ må $D(\overline{T}) = \mathcal{H}_1$,d.v.s. $T = \overline{T}$. T er da begrenset. $T \subset T^*$ gir $D(T^*) = \mathcal{H}$, som er tett i $\mathcal{H}$. $\boxed{\hbar}$

Korollar 6.7 *La $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ være en injektiv operator slik at $R(T) = \mathcal{H}_2$. T er lukket hvis og bare hvis $T^{-1} \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$.*

Bevis. T er lukket hvis og bare hvis T^{-1} er lukket. T^{-1} er lukket hvis og bare hvis $T^{-1} \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$ fordi $D(T^{-1}) = \mathcal{H}_2$. $\boxed{\hbar}$

6.2 Spektralteori

La $\mathcal{H}$ være et Hilbertrom over $\mathbf{K}$ og T en lineær operator på $\mathcal{H}$. $z \in \mathbf{K}$ er en egenverdi og $f \in D(T)$ en tilhørende egenvektor hvis $Tf = zf$. Mengden av egenverdier til T kalles punktspekteret og benevnes med $\sigma_p(T)$. Hvis z er en egenverdi kalles $N(z-T)$ for egenrommet til z. Multiplisiteten $\dim N(z-T)$ [2] gir hvor mange lineært uavhengige egenvektorer som hører til egenverdien. Hvis $z \notin \sigma_p(T)$,så er:

$$R(z,T) = (z-T)^{-1},\ z \in \mathbf{C} \setminus \sigma_p(T) \tag{6.16}$$

veldefinert. Dette kan brukes til å definere resolventmengden $\rho(T)$:

$$\rho(T) = \{z \in \mathbf{K} : z - T \text{ injektiv },R(z,T) \in B(\mathcal{H})\} \tag{6.17}$$

Hvis T ikke er lukket, blir aldri $R(z,T)$ lukket. Resolventmengden blir da tom. Det er derfor vanlig å restriktere seg til lukkede operatorer. Da vil $z \in \rho(T)$ hvis og bare hvis $z - T$ er bijektiv, som en følge av lukket graf teoremet.

Spekteret til T er definert ved:

$$\sigma(T) = \mathbf{K} \setminus \rho(T) \tag{6.18}$$

En opplagt konsekvens er $\sigma_p(T) \subset \sigma(T)$.

Funksjonen $R(\cdot,T) : \rho(T) \to B(\mathcal{H})$ definert på hele $\rho(T)$ kalles resolventen til T.

Spekteret er en lukket mengde. For å bevise det trenger en å vite at hvis $z-T$ er bijektiv, så vil også $z' - T$ være bijektiv for z' tilstrekkelig nær z. Viser det mer generelle teorem som sier at en lukket bijektiv operator forblir bijektiv etter addisjon av en 'ikke for stor' operator:

Teorem 6.8 *La $\mathcal{H}_1$ og $\mathcal{H}_2$ være Hilbertrom,$T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ lukket og bijektiv. Anta videre at $S : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ med $D(S) \supset D(T)$ og $\|ST^{-1}\| < 1$. Da vil $T + S$ være bijektiv og:*

$$(T+S)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n T^{-1}(ST^{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (T^{-1}S)^n T^{-1} \tag{6.19}$$

Summene er konvergente i $B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$.

Bevis. $T + S$ er lukket fordi S har T-begrensning mindre enn 1:
$\|Sf\| = \|ST^{-1}Tf\| \le \|ST^{-1}\| \|Tf\|$ for alle $f \in D(T)$. $T + S$ er injektiv[3] ved:
$\|(T+S)f\| \ge \|Tf\| - \|Sf\| \ge \|Tf\| (1 - \|ST^{-1}\|) > 0$.

De to rekkene er like ledd for ledd. Typisk:$T^{-1}(ST^{-1})(ST^{-1}) = (T^{-1}S)(T^{-1}S)T^{-1}$.

Definerer $A_p = \sum_{n=0}^{p} (-1)^n T^{-1}(ST^{-1})^n$ og viser at (A_p) er Cauchy i $B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$. For $q > p$:

$$\|A_q - A_p\| = \left\| \sum_{n=p+1}^{q} (-1)^n T^{-1}(ST^{-1})^n \right\| \tag{6.20}$$

$$\le \|T^{-1}\| \|ST^{-1}\|^{p+1} \sum_{n=0}^{\infty} \|ST^{-1}\|^n \to 0, p \to \infty \tag{6.21}$$

Dermed finnes det en $A = \lim A_p \in B(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$. For å vise $(T+S)A = I$ vises først:

[2]Dette er Hilbertdimensjonen,d.v.s. kardinaliteten til en ortogonal basis.

[3]Faktisk kontinuerlig invertibel fordi T^{-1} er begrenset.

$$(6.22) \qquad (T+S)A_p \;= \textstyle\sum_{n=0}^{p}(-1)^n((ST^{-1})^n + (ST^{-1})^{n+1})$$

$$(6.23) \qquad = I + (-1)^p(ST^{-1})^{p+1}$$

Dermed vil $\|(T+S)A_p - I\| \leq \|ST^{-1}\|^{p+1} \to 0$ og $(T+S)A_p g \to g$ for alle $g \in \mathcal{H}_2$. Ved å se på grensene $A_p g \to Ag$ og $(T+S)(A_p g) \to g$ for vilkårlig $g \in \mathcal{H}_2$ følger $Ag \in D(T+S)$ og $A = (T+S)^{-1}$ ved at $(T+S)$ er lukket(!). $\boxed{\hbar}$

Overstående teorem gir direkte at $\rho(T)$ er åpen:

Teorem 6.9 *Hvis T er en lukket operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$, så er $\sigma(T)$ lukket. Videre vil $z \in \rho(T)$ hvis det finnes en $z_0 \in \rho(T)$ slik at $|z - z_0| < \|R(z_0,T)\|^{-1}$. Resolventen er en holomorf funksjon med Taylorrekke:*

$$(6.24) \qquad R(z,T) = \sum_{n=0}^{\infty}(z-z_0)^n R(z_0,T)^{n+1}, \quad |z - z_0| < \|R(z_0,T)\|^{-1}$$

Hvis $T \in B(\mathcal{H})$, så vil:

$$(6.25) \qquad \sigma(T) \subset \{z \in \mathbf{K} : |z| \leq \|T\|\}$$

og man har von Neumann rekken:

$$(6.26) \qquad R(z,T) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{-n-1}T^n, \quad |z| > \|T\|$$

Bevis. Foregående teorem benyttes. $z_0 - T$ er lukket og bijektiv for $z_0 \in \rho(T)$. $z - T = (z_0 - T) + (z - z_0)$ er da lukket og bijektiv hvis $\|(z-z_0)R(z_0,T)\| < 1$. Det er oppfylt fordi $\|(z-z_0)R(z_0,T)\| \leq |z - z_0|\,\|R(z_0,T)\| < 1$ per antagelse. Derfor er $z \in \rho(T)$ og $\rho(T)$ er åpen;ethvert punkt i $\rho(T)$ er senteret i en (vilkårlig liten) kule som og er inneholdt i $\rho(T)$. Rekkeutviklingen i foregående teorem gir Taylorrekken med ledd $(-1)^n R(z_0,T)((z - z_0)R(z_0,T))^n$.

Anta så at $T \in B(\mathcal{H})$. $zI \in B(\mathcal{H})$ er lukket og bijektiv når $z \neq 0$. Da vil også $z - T$ være lukket og bijektiv hvis $\|(-T)/z\| < 1$ d.v.s. hvis $\|T\| < |z|$. Leddene i rekken fra foregående teorem blir $(-1)^n z^{-1}((-T)/z)^n = T^n/z^{n+1}$. $\boxed{\hbar}$

Korollar 6.10 *La U være en unitær operator. Da vil $\sigma(U) \subset \{z \in \mathbf{K} : |z| = 1\}$.*

Bevis. Har $\|U\| = \|U^{-1}\| = 1$. Da U er begrenset vil $\sigma(U) \subset \{z : |z| \leq 1\}$. $0 - U$ er bijektiv slik at $0 \in \rho(T)$. Da vil $\{z \in \mathbf{K} : |z - 0| < 1\} \subset \rho(T)$. $\boxed{\hbar}$

Foregående teorem gir direkte at resolventen er kontinuerlig (fordi den er analytisk). Når $z \in \rho(T)$, så er $R(z,T)$ en begrenset operator. Følgende teorem gir en nedre skranke på $\|R(z,T)\|$. Det gir ikke uventet at $\|R(z_n,T)\| \to \infty$ hvis (z_n) er en følge fra resolventmengden som konvergerer mot en $z_0 \in \sigma(T)$.

Teorem 6.11 *La T være en lukket operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Hvis $\sigma(T) \neq \emptyset$,så gjelder:*

$$\|R(z,T)\| \geq \frac{1}{d(z,\sigma(T))}, \quad z \in \rho(T) \tag{6.27}$$

Bevis. La $z \in \rho(T)$. For z' med i $\sigma(T)$ gjelder $|z'-z| \geq \|R(z,T)\|^{-1}$. Dette gir $\|R(z,T)\| \geq \sup\left\{|z-z'|^{-1} : z' \in \sigma(T)\right\}$ som er overstående ved $d(z,\sigma(T)) = \inf_{z'\in\sigma(T)} |z-z'|$. $\boxed{\hbar}$

6.3 Symmetriske og selvadjungerte operatorer

I kvantemekanikken vil fysiske størrelser være representert ved selvadjungerte operatorer. Måleresultater vil ligge i spekteret til den tilhørende operator. Dette gir et krav om at spekteret skal være reelt. Hvis T er symmetrisk vil spekteret være reelt hvis og bare hvis T er selvadjungert [4]. Et stykke på veien til å vise dette kommer en med:

Teorem 6.12 *La T være en Hermitesk operator på pre-Hilbert rommet $\mathcal{H}$. Da vil $\sigma_p(T) \subset \mathbf{R}$ og egenvektorer tilhørende forskjellige egenverdier er ortogonale. Hvis $\mathbf{K} = \mathbf{C}$, så vil $z - T$ være kontinuerlig invertibel for alle $z \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R}$. Spesielt vil $\|R(z,T)\| \leq |\Im(z)|^{-1}$.*

Bevis. Anta $Tf = zf$ for en $f \in D(T) \setminus \{0\}$. Da gjelder $z\langle f|f\rangle = \langle f|Tf\rangle = \langle Tf|f\rangle = z^*\langle f|f\rangle$. Følgelig er $\sigma_p(T) \in \mathbf{R}$.

La så $Tf_1 = z_1f_1, Tf_2 = z_2f_2$. Da vil $z_i \in \mathbf{R}$ og: $(z_1-z_2)\langle f_1|f_2\rangle = \langle Tf_1|f_2\rangle - \langle f_1|Tf_2\rangle = 0$. D.v.s. at $f_1 \perp f_2$ hvis $z_1 \neq z_2$.

Se så på $z = x + iy$ hvor $x, y \in \mathbf{R}$. Ved å utnytte $\|(T+iS)f\|^2 = \|Tf\|^2 + \|Sf\|^2$ for Hermiteske S, T som formelt kommuterer [5] følger:

$$\|(z-T)f\|^2 = \|(x-T)f\|^2 + \|yf\|^2 \geq |y|^2\|f\|^2, \quad f \in D(T) \tag{6.28}$$

Dette gir $\|z-T\| \geq \Im(z)$. Altså er $z-T$ kontinuerlig invertibel med $\|R(z,T)\| \leq |\Im(z)|^{-1}$ hvis $\Im(z) \neq 0$.

$\boxed{\hbar}$

Fysikeres formulering av kvantemekanikken er formell. Ved å følge 'kokeoppskriftene' for å finne operatoren til en fysisk størrelse ender man (som regel) opp med en operator som det er lett å se er symmetrisk. For å sjekke om man har endt opp med en selvadjungert operator er følgende teorem en mulighet:

Teorem 6.13 *La T være en symmetrisk operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Hvis det finnes en $s \in \mathbf{R}$ slik at $\mathcal{H} = N(s-T) + R(s-T)$,så er T selvadjungert. Da vil og $\mathcal{H} = N(s-T) \oplus R(s-T)$.*

[4] Det finnes operatorer med reelt spekter som ikke er selvadjungerte. Se også [23, s.225] for en kommentar angående tidsutviklingen til et kvantesystem.

[5] T, S kommuterer formelt hvis $TSf = STf$ for alle $f \in D(TS) \cap D(ST)$. I dette beviset vil $S = yI$ slik at $D(TS) = D(ST) = D(T)$.

Bevis. Ved $N(T^*) = R(T)^\perp$ og $\overline{T} = T^{**}$ følger $N(s-\overline{T}) = N(s^* - (T^*)^*) = R(s-T^*)^\perp$. Dette gir $N(s-T) \subset R(s-T^*)^\perp \subset R(s-T)^\perp$ ved at $T \subset T^*$. Altså vil $N(s-T) \perp R(s-T)$ og $\mathcal{H} = N(s-T) \oplus R(s-T)$.

Det gjenstår å vise $D(T^*) \subset D(T)$. La derfor $f \in D(T^*)$. Noterer $N(s-T^*) = R(s-T)^\perp = N(s-T) \subset D(T)$. Sett $g = (s-T^*)f$. Fordi $R(s-T^*)^\perp = N(s-\overline{T})$ vil $R(s-T^*) \subset \overline{R(s-T^*)} = N(s-\overline{T})^\perp \subset N(s-T)^\perp = R(s-T)$ og det finnes da en $f_0 \in D(T)$ slik at $(s-T^*)f_0 = (s-T)f_0 = (s-T^*)f$. Dermed $f - f_0 \in N(s-T^*) \in D(T)$ og $f \in D(T)$. $\boxed{\hbar}$

En symmetrisk operator er essensielt selvadjungert hvis $\overline{T}$ er selvadjungert. Ved $T^{**} = \overline{T} = \overline{T}^* = T^*$ følger at T^* er selvadjungert hvis T er essensielt selvadjungert. Noterer spesielt at $\overline{T} = T^*$. Omvendt følger at T symmetrisk er essensielt selvadjungert hvis T^* er symmetrisk: $\overline{T} \subset \overline{T}^* = T^* \subset T^{**} = \overline{T}$ og likhet må gjelde hele veien.

Foregående teorem ga en tilstrekkelig betingelse for at T var selvadjungert. Følgende teorem gir også en nødvendig betingelse og må sies å være en hjørnestein i teorien for selvadjungerte operatorer.

Teorem 6.14 *La T være en symmetrisk operator på det komplekse Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Da er T selvadjungert hvis og bare hvis det finnes $z_\pm \in \mathbf{C}, \Im(z_+) > 0, \Im(z_-) < 0$ slik at $R(z_\pm - T) = \mathcal{H}$. Dette holder da for alle $z_\pm$ slik at $\pm\Im(z_\pm) > 0$.*

Bevis. La først T være selvadjungert og $z \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R}$. Vet da at $R(z,T)$ er lukket og begrenset. Fra lukket graf teoremet følger at $D(R(z,T))$ er lukket. Da vil $R(z-T) = D(R(z,T)) = \mathcal{H}$ hvis $R(z-T)^\perp = 0$. Anta så at $h \in R(z-T)^\perp$. Fordi $N((z-T)^*) = R(z-T)^\perp$ vil $h \in N((z-T)^*) = N(z^* - T) = \{0\}$ fordi $z^* - T$ er invertibel.

Anta så at det eksisterer $z_\pm \in \mathbf{C}, \pm\Im(z_\pm) > 0$ slik at $R(z_\pm - T) = \mathcal{H}$. Fordi T er Hermitesk vil $z_\pm - T$ være injektiv og dermed bijektiv. Operatoren $z - T = (z_+ - T) + (z - z_+)$ vil være bijektiv hvis $\|(z-z_+)(z_+ - T)^{-1}\| < 1$, d.v.s. hvis $|z - z_+| < \Im(z_+)$ hvor det ble benyttet at $\|(z-T)^{-1}\| \leq (\Im(z))^{-1}$ for alle $z \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R}$. Dermed vil det finnes en åpen disk O_{z_+} rundt z_+ slik at $R(z-T) = \mathcal{H}$ for $z \in O_{z_+}$. Denne prosessen kan itereres slik at $R(z-T) = \mathcal{H}$ for alle z i øvre halvplan (velg en kompakt mengde som inneholder z, z_+). Tilsvarende følger at $R(z-T) = \mathcal{H}$ for alle z i nedre halvplan.

Med antagelse som over må det vises at $T = T^*$. Fordi $T \subset T^*$ holder det å vise $D(T^*) \subset D(T)$. La derfor $f \in D(T^*)$ og definer $f_0 = (i-T)^{-1}(i-T^*)f$. Da vil $f_0 \subset D(i-T) = D(T)$ og definisjonen er i orden for alle $f \in D(T^*)$ fordi $(i-T)^{-1} \in B(\mathcal{H})$. Dermed holder det å vise at $f = f_0$. Benytter $(i-T^*)(f-f_0) = (i-T^*)f - (i-T)f_0 = 0$. Altså $f - f_0 \in N((-i-T)^*) = R(-i-T)^\perp = \mathcal{H}^\perp = \{0\}$. $\boxed{\hbar}$

I overstående teorem kan en bytte ut T selvadjungert med T essensielt selvadjungert og $R(z_\pm - T) = \mathcal{H}$ med $\overline{R(z_\pm - T)} = \mathcal{H}$. Følgende er nå en opplagt konsekvens:

Teorem 6.15 *En symmetrisk operator T på det komplekse Hilbertrommet $\mathcal{H}$ er selvadjungert hvis og bare hvis $\sigma(T) \subset \mathbf{R}$.*

Bevis. La $z \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R}$ og anta at T er selvadjungert. Da vil $z - T$ være bijektiv og $z \in \rho(T)$,d.v.s. $\sigma(T) \subset \mathbf{R}$.

Anta så $\sigma(T) \subset \mathbf{R}$ og la $z \in \mathbf{C} \setminus \mathbf{R} \subset \rho(T)$. Da vil $z - T$ være bijektiv og $R(z-T) = \mathcal{H}$ for alle slike z. Dermed er T selvadjungert. $\boxed{\hbar}$

Har tidligere funnet tilstrekkelige betingelser på S for at $T+S$ er en lukket operator hvis T er det. Det er tilstrekkelig at S er T begrenset med T-begrensning mindre enn 1. Hvis T er selvadjungert er det viktig å vite når $T+S$ også er selvadjungert. En tilstrekkelig betingelse er gitt ved:

Teorem 6.16 (Kato-Rellich) *La T være selvadjungert på det komplekse Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Hvis S har T-begrensning mindre enn 1 og er symmetrisk, så er $T+S$ selvadjungert.*

Bevis. Den symmetriske $S+T$ er selvadjungert hvis og bare hvis $(\pm ic - T) - S$ er bijektiv for en $c > 0$. $(\pm ic - T)$ er en lukket bijektiv operator fordi T er selvadjungert. Det holder å vise $\|S(\pm ic - T)^{-1}\| < 1$.

Hvis S er begrenset er situasjonen spesielt enkel. Da gir $\|S(\pm ic - T)^{-1}\| \leq \|S\| \frac{1}{c} < 1$ for stor nok c og man er i mål.

Definerer $f = (\pm ic - T)^{-1} g$ for $g \in \mathcal{H}, f \in D(T)$. Benyttes:

$$\|g\|^2 = \|(\pm ic - T)f\|^2 = c^2 \|f\|^2 + \|Tf\|^2 \tag{6.29}$$

$$= c^2 \left\|(\pm ic - T)^{-1} g\right\|^2 + \left\|T(\pm ic - T)^{-1} g\right\|^2 \tag{6.30}$$

finnes:

$$\left\|(\pm ic - T)^{-1}\right\| \leq 1/c \tag{6.31}$$

$$\left\|T(\pm ic - T)^{-1}\right\| \leq 1 \tag{6.32}$$

Da er man fremme fordi:

$$\left\|S(\pm ic - T)^{-1} g\right\| = \|Sf\| \leq a \|f\| + b \|Tf\| \tag{6.33}$$

$$= a \left\|(\pm ic - T)^{-1} g\right\| + b \left\|T(\pm ic - T)^{-1} g\right\| \tag{6.34}$$

$$\leq (a/c + b) \|g\|, \tag{6.35}$$

$$a > 0, b < 1, (a/c + b) < 1 \tag{6.36}$$

ved tilstrekkelig stor c. $\boxed{\hbar}$

6.4 Normale operatorer

En tett definert operator T på Hilbertrommet $\mathcal{H}$ er en normal operator hvis $D(T) = D(T^*)$ og $\|Tf\| = \|T^* f\|$ for alle $f \in D(T)$.

En normal operator er lukket. Dette fordi $\|\cdot\|_T$ og $\|\cdot\|_{T^*}$ er identiske på $D(T)$ og T^* er lukket. Normale operatorer er maksimalt normale, d.v.s. at hvis $T \subset N$, så vil $T = N$ for normale operatorer T, N. Beviset er kort: $D(T) \subset D(N) = D(N^*) \subset D(T^*) = D(T)$. Det kan også vises at T er normal hvis og bare hvis $TT^* = T^*T$.

Spekteret til en normal og spesielt en selvadjungert operator kan karakteriseres ved:

Teorem 6.17 *Hvis T er en normal operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$, så gjelder:*

$$\rho(T) = \{z \in \mathbf{K} : z - T \text{ er kontinuerlig invertibel } \} \tag{6.37}$$

$$= \{z \in \mathbf{K} : R(z - T) = \mathcal{H}\} \tag{6.38}$$

$$\sigma_p(T) = \left\{z \in \mathbf{K} : \overline{R(z - T)} \neq \mathcal{H}\right\} \tag{6.39}$$

Bevis. Hvis $z \in \rho(T)$, så er $R(z, T) \in B(\mathcal{H})$.

Hvis $z-T$ er kontinuerlig invertibel, så gjelder $R(z-T)^{\perp} = N(z^*-T^*) = N(z-T) = \{0\}$. Dermed vil $R(z - T) = \mathcal{H}$ fordi T er lukket og en finner $z \in \rho(T)$. Hvis $R(z - T) = \mathcal{H}$, så vil $N(z - T) = R(z - T)^{\perp} = \{0\}$. Dermed er $z - T$ invertibel og $z \in \rho(T)$.

Se så på $z \in \sigma_p(T)$. Da vil $R(z - T)^{\perp} = N(z - T) \neq \{0\}$. Dermed er $\overline{R(z - T)} \neq \mathcal{H}$. Anta endelig at $\overline{R(z - T)} \neq \mathcal{H}$. Da vil $N(z - T) = R(z - T)^{\perp} \neq \{0\}$, d.v.s. at $z \in \sigma_p(T)$. $\boxed{\hbar}$

Kapittel 7

Selvadjungerte utvidelser til symmetriske operatorer

Anta at S er en symmetrisk operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Da vil $S \subset S^*$. Et viktig spørsmål er om det finnes en selvadjungert utvidelse T som da vil oppfylle $S \subset T = T^* \subset S^*$. En teori som besvarer dette spørsmålet komplett er von Neumann's utvidelsesteori. Et alternativ er gitt ved å gå veien om sesquilineære former.

7.1 Friedrichs' utvidelsen

En sesquilineær [1] form s på $\mathcal{H}$ er begrenset hvis det finnes en $C \geq 0$ slik at $|s(f,g)| \leq C \|f\| \|g\|$. Normen til s defineres da ved den minste C som over.

For begrensede operatorer gir Riesz teorem nesten umiddelbart:

Teorem 7.1 *Hvis t er en begrenset sesquilineær form på Hilbertrommet $\mathcal{H}$, så finnes en entydig $T \in B(\mathcal{H})$ slik at $s(f,g) = \langle f|Tg\rangle$ for alle $f, g \in \mathcal{H}$. Motsatt vil $T \in B(\mathcal{H})$ alltid gi en begrenset sesquilineær form. En har $\|T\| = \|t\|$.*

Bevis. For fiksert g vil $f \mapsto s(f,g)^*$ være en kontinuerlig lineærfunksjonal. Da vil det finnes en entydig $h \in \mathcal{H}$ slik at $s(f,g)^* = \langle f|h\rangle^*$ for alle $f \in \mathcal{H}$. Kan derfor definere en operator på $\mathcal{H}$ ved $Tg = h$. T er lineær fordi s er lineær i andre argument og den er begrenset fordi:

$$\|T\| = \sup\{|\langle f|Tg\rangle| : \|f\| = \|g\| = 1\} \tag{7.1}$$

$$= \sup\{|s(f,g)| : \|f\| = \|g\| = 1\} = \|s\| \tag{7.2}$$

At $T \in B(\mathcal{H})$ gir en begrenset sesquilineær t er klart. $\boxed{\hbar}$

Når T er ubegrenset er situasjonen adskillig verre. Følgende spesialtilfelle gir en nedtil begrenset operator. Beviset her er et av de mest subtile så langt:

[1] Enogenhalvlineær er i tyngste laget.

Teorem 7.2 *La $(\mathcal{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle)$ være et Hilbertrom. Anta at en for et tett underrom $\mathcal{H}_1 \subset H$ kan definere et skalarprodukt $\langle\cdot|\cdot\rangle_1$ slik at $(\mathcal{H}_1, \langle\cdot|\cdot\rangle_1)$ er et Hilbertrom. Hvis det i tillegg finnes en $\kappa > 0$ slik at $\kappa \|f\|^2 \leq \|f\|_1^{\,2}$ for alle $f \in \mathcal{H}_1$, så kan en selvadjungert operator T defineres ved:*

$$D(T) = \left\{ f \in \mathcal{H}_1 : \exists \tilde{f} \in \mathcal{H} \text{ slik at } \langle f|g\rangle_1 = \left\langle \tilde{f}|g \right\rangle \ \forall g \in \mathcal{H}_1 \right\} \tag{7.3}$$

$$Tf = \tilde{f} \tag{7.4}$$

Videre finnes det kun en selvadjungert T (den over!) slik at:

$$D(T) \subset \mathcal{H}_1, \quad \langle Tf|g\rangle = \langle f|g\rangle_1 \ \forall f \in D(T),\ g \in \mathcal{H}_1 \tag{7.5}$$

Operatoren T er begrenset nedtil av κ.

Bevis. Fordi $\mathcal{H}_1$ er tett i $\mathcal{H}$ vil $\tilde{f}$ være entydig og man har definert en operator. Lineæriteten er klar. T definerer en operator T_0 fra $(\mathcal{H}_1, \langle\cdot|\cdot\rangle_1)$ til $\mathcal{H}$ ved $T_0 f = Tf$ for $f \in D(T_0)$. Definer $J : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_1$ ved $D(J) = \mathcal{H}_1$ og $Jg = g$. En har $\langle T_0 f|g\rangle = \langle f|Jg\rangle_1$ for alle $f \in D(T_0)|g \in \mathcal{H}_1$. Fordi T_0 er maksimalt definert vil $J^* = T_0$.

Vil vise at $T_0 = J^*$ er tett definert (i $\mathcal{H}_1$). Det holder da å vise at $J : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_1$ er lukket. La (f_n) være en følge fra $D(J) = \mathcal{H}_1$ slik at $\lim f_n = f$ (i $\mathcal{H}$) og $\lim Jf_n = \lim f_n = h$ (i $\mathcal{H}_1$). Da vil $\lim f_n = h$ (i $\mathcal{H}$) p.g.a. $\kappa \|f_n - h\|^2 \leq \|f_n - h\|_1^2$,d.v.s. $f = h \in D(J)$, og J er lukket.

$D(T) = D(T_0)$ er da tett i $\mathcal{H}_1$ med hensyn til $\|\cdot\|_1$ og p.g.a. $\kappa \|\cdot\|^2 \leq \|\cdot\|_1^2$ også tett i $\mathcal{H}_1$ med hensyn til $\|\cdot\|$. Fordi $\mathcal{H}_0$ er tett i $\mathcal{H}$ vil derfor $D(T)$ være tett i $\mathcal{H}$. Av $\langle Tf|g\rangle = \langle f|g\rangle_1 = \langle g|f\rangle_1^* = \langle Tg|f\rangle^* = \langle f|Tg\rangle$ følger det da at T er symmetrisk.

At T er selvadjungert følger ved å vise at $R(0+T) = \mathcal{H}$. La $\tilde{f} \in \mathcal{H}$ være vilkårlig. $g \mapsto \left\langle \tilde{f}|g \right\rangle$ vil være en kontinuerlig lineærfunksjonal på Hilbertrommet $\mathcal{H}_1$ fordi: $\left|\left\langle \tilde{f}|g \right\rangle\right| \leq \left\|\tilde{f}\right\| \|g\| \leq \left\|\tilde{f}\right\| \sqrt{1/\kappa}\, \|g\|_1$. Da finnes det en $f \in \mathcal{H}_1$ slik at $\langle f|g\rangle_1 = \left\langle \tilde{f}|g \right\rangle$. Dermed er $f \in D(T)$ og $R(T) = \mathcal{H}$.

At T er nedtil begrenset følger av $\langle Tf|f\rangle = \langle f|f\rangle_1 \geq \kappa \langle f|f\rangle$.

T er maksimalt definert slik at alle S som oppfyller (**??**) må være en restriksjon av T. Hvis S også er selvadjungert vil både S og T være normale. Da må $S \subset T$ gi $S = T$. $\boxed{\hbar}$

Overstående teorem kan brukes til å definere en unik selvadjungert utvidelse til en nedtil begrenset symmetrisk operator. Det kan og brukes til å definere mere formelle operatorer som f.eks. er gitt ved at de definerer en lukkbar sesquilineær form.

La s være en tett definert sesquilineær form. s er semibegrenset hvis det finnes en $\gamma \in \mathbf{R}$ slik at $s(f, f) \geq \gamma \|f\|^2$ for alle $f \in D(T)$. I det følgende vil jeg anta at s er semibegrenset med begrensning $\gamma = 1$ på Hilbertrommet $(H, \langle\cdot|\cdot\rangle)$. Dette er ingen innskrenkning på generaliteten. Hvis q er en semibegrenset sesquilineær form $q(f, f) \geq \gamma \langle f|f\rangle$, så ser man heller på $s(f, g) = q(f, g) + (1 - \gamma) \langle f|g\rangle^2$. s definerer et indreprodukt på $D(s)$ fordi $0 = \langle f|f\rangle_q = s(f, f) \geq \|f\|^2 \Rightarrow f = 0$ og dermed er $(D(s), s(\cdot, \cdot))$ et indreproduktrom. Hvis kompleteringen $\mathcal{H}_s$ av $(D(s), s)$ gir et Hilbertrom som er (isomorft) inneholdt i $\mathcal{H}$, så er s (og q) lukkbar.

[2]Dette sikrer en positiv form selv om $\gamma < 0$.

Se på kompletteringen av $(D(s), s)$ gitt ved (ekvivalensklasser av) $\|\cdot\|_s$ Cauchy-følger (f_n) fra $D(s)$. Hvis (f_n) er en $\|\cdot\|_s$ Cauchy-følge fra $D(s)$, så vil (f_n) også være en Cauchy-følge i $\mathcal{H}$, p.g.a. $\|\cdot\|_s \geq \|\cdot\|$. Se så på to $\|\cdot\|_s$ Cauchy-følger (f_n) og $(\tilde{f}_n)$ slik at $\lim f_n = f$ og $\lim \tilde{f}_n = f$ i $\mathcal{H}$. $\|\cdot\|_s$ er kompatibel med $\|\cdot\|$ hvis dette gir $\lim \left\|\tilde{f}_n - f_n\right\|_s = 0$,d.v.s. hvis de to følgene representerer samme element i $\mathcal{H}_s$. Hvis $\|\cdot\|_s$ er kompatibel med $\|\cdot\|$, så vil avbildningen $U : \mathcal{H}_s \to H$ ved $[(f_n)] \mapsto \lim f_n$ være injektiv. Ved konstruksjonen er U en isometri og dermed en isomorfi mellom $\mathcal{H}_s$ og $R(U)$. Tillukningen til s kan da defineres på $R(U) \supset D(s)$ $\overline{s}(f, g) = \langle U^{-1}f|U^{-1}g\rangle_s$.

Følgende teorem følger nå direkte av foregående teorem. Innholdet er at alle semibegrensede lukkbare sesquilineære former definerer en selvadjungert semibegrenset operator.

Teorem 7.3 *La t være en tett definert sesquilineær form på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Hvis t er semibegrenset av γ nedenfra og $\|\cdot\|_t$ er kompatibel med $\|\cdot\|$, så definerer t entydig en selvadjungert operator T på $\mathcal{H}$ ved:*

$$D(T) \subset \mathcal{H}_t, \quad \langle g|Tf\rangle = t(g, f) \ \ \forall g \in D(t), \ f \in D(T) \cap D(t) \tag{7.6}$$

Her er $(\mathcal{H}_t, \langle\cdot|\cdot\rangle_t)$ kompleteringen av $(D(t), \langle\cdot|\cdot\rangle_t)$. Operatoren T er begrenset nedtil av γ og gitt ved:

$$D(T) = \{f \in \mathcal{H}_t : \exists h \in \mathcal{H} \text{ slik at } \overline{t}(g, f) = \langle g|h\rangle \quad \forall g \in D(t)\} \tag{7.7}$$

$$Tf = h \tag{7.8}$$

Bevis. Definerer $s(g, f) = t(g, f) + (1-\gamma)\langle g|f\rangle$ på $D(s) = D(t)$. Hilbertrommet $\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_t$ gitt ved kompletteringen av $(D(t), s)$ er (isomorft) inneholdt i $\mathcal{H}$ fordi $\|\cdot\|_s \geq \|\cdot\|$ og $\|\cdot\|_t \stackrel{def}{=} \|\cdot\|_s$ er kompatibel med $\|\cdot\|$. Fra foregående teorem definerer da s en selvadjungert operator S ved:

$$D(S) = \{f \in \mathcal{H}_s : \exists h \in \mathcal{H} \text{ slik at } \overline{s}(g, f) = \langle g|h\rangle \quad \forall g \in D(s)\} \tag{7.9}$$

$$Sf = h \tag{7.10}$$

hvor det er benyttet at $D(s)$ ligger tett i $\mathcal{H}_s$.

S er nedtil begrenset av 1 og entydig gitt ved:

$$D(S) \subset \mathcal{H}_s, \quad s(g, f) = \langle g|Sf\rangle \ \ \forall g \in D(s) \ \ f \in D(S) \cap D(s) \tag{7.11}$$

(Hvis s byttes ut med $\overline{s}$ kan $D(S) \cap D(s)$ byttes ut med $D(S)$.)

$Tf = Sf - (1-\gamma)f$ for $f \in D(T) = D(S)$ oppfyller da klart teoremets betingelser. $\boxed{\hbar}$

I overstående teorem er det ikke essensielt at t er begrenset nedenfra. Det følger ved at $-t$ er begrenset ovenfra og gir $-T$ hvis t er som over.

Nå kan en entydig selvadjungert utvidelse T til en semibegrenset symmetrisk S defineres. T er Friedrichsutvidelsen til S og er ikke nødvendigvis den eneste selvadjungerte utvidelsen til S.

Teorem 7.4 (Friedrichs utvidelsen) *La S være en symmetrisk operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Hvis S er nedtil begrenset av γ, finnes en selvadjungert utvidelse T som også er nedtil begrenset av γ. Denne T er entydig gitt ved:*

$$D(T) = D(S^*) \cap \mathcal{H}_s, \quad Tf = S^* f \; \forall f \in D(T) \tag{7.12}$$

Her er $\mathcal{H}_s$ kompletteringen av $(D(S), \langle\cdot|\cdot\rangle_s)$ hvor $s(f,g) = \langle f|Sg\rangle$,$D(s) = D(S)$. T er den eneste selvadjungerte utvidelse som oppfyller $D(T) \subset \mathcal{H}_s$.

Bevis. Viser først at $s(f,g) = \langle f|Sg\rangle$ er en lukkbar sesquilineær form. s er klart en sesquilineær form begrenset nedtil av γ. Kompatibiliteten følger ved:

$$\begin{aligned}
\|f_n\|_s^2 &= \langle f_n|f_n - f_m\rangle_s + \langle f_n|f_m\rangle_s \leq |\langle f_n|f_n - f_m\rangle_s| + |\langle f_n|f_m\rangle_s| && (7.13)\\
&\leq \|f_n\|_s \|f_n - f_m\|_s + |\langle f_n|Sf_m\rangle + (1-\gamma)\langle f_n|f_m\rangle| && (7.14)\\
&\leq \|f_n\|_s \|f_n - f_m\|_s + \|(S + 1 - \gamma)f_n\| \, \|f_m\|, && (7.15)\\
& m > n \; f_n \in D(S) && (7.16)
\end{aligned}$$

Hvis (f_n) er en $\|\cdot\|_s$ Cauchy-følge slik at $\lim f_n = 0$ i $\mathcal{H}$, så vil $\lim \|f\|_s = 0$.

Da definerer S via s en entydig selvadjungert operator T ved:

$$\begin{aligned}
D(T) &= \{f \in \mathcal{H}_s : \exists h \in \mathcal{H} \text{ slik at } \langle g|h\rangle = \overline{s}(g|f) \;\; \forall g \in D(S)\} && (7.17)\\
Tf &= h && (7.18)
\end{aligned}$$

I overstående kan $\overline{s}(g,f)$ byttes ut med $\langle Sg|f\rangle$ fordi $\overline{s}(g,f) = \lim \langle g|Sf_n\rangle = \langle Sg|f\rangle$ når $0 = \lim \|f - f_n\|_s \geq \lim \|f - f_n\|$ for et element $[(f_n)] \in \mathcal{H}_s$.

Dermed er T en restriksjon av S^* til $\mathcal{H}_s$,$T = S^*|_{\mathcal{H}_s}$. Fordi $S \subset S^*$ og $D(S) \subset \mathcal{H}_s$ vil $D(S) \subset D(T)$ og $S \subset T$.

La T' være en selvadjungert utvidelse til S. Da har man $S \subset T' \subset S^*$. Anta at $D(T') \subset \mathcal{H}_s$ slik at $D(T') \subset D(S^*) \cap \mathcal{H}_s = D(T)$. Da må $T' \subset T = T^* \subset T'^* = T'$, d.v.s. $T' = T$. $\boxed{\hbar}$

Jeg vil understreke at S kan ha flere selvadjungerte utvidelser. Det er bare Friedrichs utvidelse som er gitt unikt ved overstående.

7.2 von Neumanns utvidelsesteori

I det følgende antas at operatorene $T, S, \ldots$ er symmetriske. Målet er å avgjøre når en symmetrisk operator kan utvides til en selvadjungert operator på et Hilbertrom $\mathcal{H}$.

Minner igjen om teorem 6.14. Det sier at en lukket symmetrisk operator T er selvadjungert hvis og bare hvis $R(\pm i - T) = \mathcal{H}$. Dette motiverer definisjonen av det defekte underrom lik $R(z - T)^\perp$ til z og T. Spesielt defineres de defekte underrom $N_+ = R(-i - T)^\perp$ og $N_- = R(i - T)^\perp$. Den defekte indeks $\beta(T,z)$ til z og T er kardinaltallet $\dim R(z - T)^\perp$ og paret $(\gamma_+, \gamma_-) = (\beta(T,i), \beta(T,-i))$ er de defekte indekser til T.[3] Teorem 6.14 kan nå

[3]Konvensjonen er faktisk som her ;$\gamma_+ = \dim N_-$ og $\gamma_- = \dim N_+$.

formuleres ved at en lukket symmetrisk operator er selvadjungert hvis og bare hvis den har defekte indekser $(0,0)$.

Teorem 6.14 ga også at $\beta(T, z_{\pm}) = 0$ for alle $z_{\pm}$ i henholdsvis øvre og nedre halvplan for en selvadjungert T, d.v.s. at den defekte indeks var konstant i øvre og nedre halvplan. Denne egenskapen ved den defekte indeks er viktig. Det viser seg at den defekte indeks er konstant på sammenhengende områder i regularitetsområdet $\Gamma(T)$ til T. Dette er definert ved: $\Gamma(T) = \{z \in \mathbf{C} : z - T \text{ kontinuerlig invertibel}\}$. Noterer at $(z-T)^{-1}$ ikke nødvendigvis er med i $B(\mathcal{H})$ selv om $z \in \Gamma(T)$. M.a.o. vil $\rho(T) \subset \Gamma(T)$. $\Gamma(T)$ er en åpen mengde: La $z_0 \in \Gamma(T)$ slik at $\|(z_0 - T)f\| \geq k_0 \|f\|$ for alle $f \in D(T)$. Da gjelder:

$$\begin{aligned}
\|(z-T)f\| &= \|(z-z_0)f + (z_0-T)f\| && (7.19)\\
&\geq \|(z_0-T)f\| - \|(z-z_0)f\| && (7.20)\\
&\geq (k_0 - |z-z_0|)\,\|f\|\,, \qquad \forall f \in D(T) && (7.21)
\end{aligned}$$

Dermed er $z \in \Gamma(T)$ hvis $|z - z_0| < k_0$ og $\Gamma(T)$ er åpen. $\Gamma(T)$ har som sagt egenskapen:

Teorem 7.5 *Den defekte indeks $\beta(T, z)$ er konstant på alle sammenhengende områder i regularitetsområdet $\Gamma(T)$. Spesielt vil den defekte indeks være konstant i øvre og nedre halvplan for en Hermitesk operator.*

Bevis. Fordi alle lukkede og begrensede delmengder av det komplekse plan er kompakte holder det å vise at $\beta(T, z)$ er lokalt konstant, d.v.s. at den er konstant på en (liten) omegn om alle $z \in \Gamma(T)$.

La P_z være projeksjonen på $R(z-T)^{\perp}$ og $Q_z = I - P_z$ projeksjonen på $\overline{R(z-T)}$. Da gjelder $\|P_z - P_{z_0}\| = \|Q_z - Q_{z_0}\| \to 0$ når $z \to z_0$ [23, teorem 5.25,s.110].

Hvis ϵ velges slik at $\|P_z - P_{z_0}\| < 1$ for $|z - z_0| < \epsilon$, så vil $\beta(T, z) = \beta(T, z_0)$ når $|z - z_0| < \epsilon$ [23, teorem 4.35,s.86].

For en Hermitesk operator er nedre og øvre halvplan inneholdt i $\Gamma(T)$ slik at den defekte indeks er konstant der. $\boxed{\hbar}$

Et kraftig verktøy i "kampen" mot de symmetriske operatorene er gitt i Cayley transformajonen V:

$$V = (i-T)(-i-T)^{-1} \tag{7.22}$$

En har her $D(V) = R(-i-T)$ og $R(V) = R(i-T)$. V er en sympatisk operator:

Teorem 7.6 *La T være en symmetrisk operator på det komplekse Hilbertrom $\mathcal{H}$. Cayley transformasjonen V er en isometrisk avbildning, $D(V) = R(-i-T)$ og $R(V) = R(i-T)$. T er unikt gitt ved $T = i(I+V)(I-V)^{-1}$ og $R(I-V) = D(T)$ er (per antagelse) tett i $\mathcal{H}$.*

Bevis. Viser først at V er en isometri. La da $g = (-i-T)f \in D(V)$ med $f \in D(T)$ være gitt. Da gjelder:

$$\|Vg\| = \left\|(i-T)(-i-T)^{-1}g\right\| = \|(i-T)f\| = \|(-i-T)f\| = \|g\| \tag{7.23}$$

Den kritiske overgangen $\|(i-T)f\| = \|(-i-T)f\|$ er korrekt fordi T er Hermitesk. At $D(V) = R(-i-T)$ og $R(V) = R(i-T)$ er klart ved at $R((-i-T)^{-1}) = D(T)$.

Vil så gjerne vise at $T = i(I+V)(I-V)^{-1}$. Det følger av:

$$I+V = I+(i-T)(-i-T)^{-1} = (i+T-(i-T))(i+T)^{-1} \tag{7.24}$$
$$= 2T(i+T)^{-1} \tag{7.25}$$
$$I-V = I-(i-T)(-i-T)^{-1} = (i+T+(i-T))(i+T)^{-1} \tag{7.26}$$
$$= 2i(i+T)^{-1} \tag{7.27}$$

T er en symmetrisk operator slik at $D(T) = R(I-V)$ er tett i $\mathcal{H}$. $\boxed{\hbar}$

Overstående gir altså at Cayley transformasjonen V til en symmetrisk operator T er isometrisk og at $R(I-V)$ er tett i $\mathcal{H}$. Motsatt vil også enhver V som er isometrisk og oppfyller $\overline{R(I-V)} = \mathcal{H}$ være Cayley transformasjonen til en symmetrisk T. Beviset for det er analogt foregående og sløyfes her.

T er lukket hvis og bare hvis V er lukket. Via lukket graf teoremet gir dette at $D(V) = R(i+T)$ er lukket. Anvendt på V^{-1} gir dette også at $R(V) = R(i-T)$ er lukket. Spesielt gir dette (fortsatt teorem 6.14 !):

Teorem 7.7 *T er selvadjungert hvis og bare hvis Cayley transformasjonen V er en unitær operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$.*

Følgende teorem er og uunnværlig:

Teorem 7.8 *La S,T være symmetriske operatorer på Hilbertrommet $\mathcal{H}$ med Cayley transformasjoner U,V. Da vil $S \subset T$ hvis og bare hvis $U \subset V$.*

Bevis. Anta $S \subset T$. Da vil $D(U) = R(i+S) \subset R(i+T) = D(V)$. La så $g = (-i-S)f \in D(U)$ for $f \in D(S)$. Dermed $Vg = (i-T)(-i-T)^{-1}(-i-T)f = (i-T)f = (i-S)f = Ug$ og $U \subset V$. At $U \subset V$ gir $S \subset T$ vises helt analogt. $\boxed{\hbar}$

Nå er det klart at alle symmetriske utvidelser til en symmetrisk operator kan finnes ved å se på alle isometriske utvidelser til Cayley transformasjonen. Spesielt vil det finnes en selvadjungert utvidelse hvis og bare hvis Cayley transformasjonen har en unitær utvidelse.

Følgende teorem gir konstruksjonen av en utvidelse til Cayley transformasjonen og dermed til den tilhørende symmetriske operator:

Teorem 7.9 *La S være en lukket symmetrisk operator med tilhørende Cayley transformasjon U på Hilbertrommet $\mathcal{H}$.*

1. *U' er Cayley transformasjonen til en symmetrisk utvidelse S' til S hvis og bare hvis: Det finnes lukkede underrom $F_+ \subset N_+$ og $F_- \subset N_-$ og en isomorfi $\tilde{U}$ mellom F_+ og F_- slik at:*

$$D(U') = D(U) + F_+ = R(-i-T) \oplus F_+ \tag{7.28}$$
$$U'(f+g) = Uf + \tilde{U}g, \ \ f \in D(U), \ g \in F_+ \tag{7.29}$$
$$R(U') = R(U) \oplus F_- \tag{7.30}$$

2. U' *er unitær hvis og bare hvis* $F_- = N_-$ *og* $F_+ = N_-$.

3. S *har selvadjungerte utvidelser hvis og bare hvis de defekte indekser er like.*

Bevis. Alt er opplagte konsekvenser av de foregående teorem med den gitte konstruksjonen. Med en gitt U' kan $\tilde{U}$ defineres ved restriksjonen av U' til $D(U') \ominus D(U) = F_+$. $\boxed{\hbar}$

Av $S \subset T \subset T^* \subset S^*$ følger at alle symmetriske utvidelser T til S er en restriksjon av den adjungerte S^*. Hvis det finnes en selvadjungert utvidelse til S, så er det derfor vanlig å definere den som en restriksjon av den adjungerte operator. von Neumanns to formler er da løsningen:

Teorem 7.10 (von Neumanns første formel) *La* S *være en lukket symmetrisk operator på Hilbertrommet* $\mathcal{H}$. *Som før er* $N_+ = R(-i-S)^\perp = N(i-S^*)$ *og* $N_- = R(i-S)^\perp = N(-i-S^*)$. *Da gjelder:*

$$D(S^*) = D(S) \dot{+} N_+ \dot{+} N_- \tag{7.31}$$

$$S^*(f_0 + g_+ + g_-) = Sf_0 + ig_+ - ig_-, \quad f_0 \in D(T),\ g_\pm \in N_\pm \tag{7.32}$$

Bevis. Har $N_\pm \subset D(S^*)$ slik at $N_+ \dot{+} N_- \dot{+} D(S) \subset D(S^*)$. Antar så $f \in D(S^*)$ og viser at dekomponeringen over er mulig og entydig. Dekomponerer entydig $(i - S^*)f$ via projeksjonsteoremet i en komponent $(i-S)f_0 \in N_-^\perp = R(i-S)$ $(f_0 \in D(S))$ og en komponent $g = (i-S^*)(f-f_0) =\in N_-$. f_0 er entydig gitt fordi $i - S$ er invertibel da S er Hermitesk. Setter så $f = f_0 + g_- + g_+$ med valgt $g_- \in N_-$ som ikke er noen innskrenkning når $g_+ \in D(S^*)$ foreløpig er vilkårlig. Beregner så $(i-S^*)g_+ = (i-S^*)(f-f_0) + (2i-i-S^*)(-g_-) = g - 2ig_-$. Dermed vil $g_+ \in N_+$ hvis og bare hvis en setter $g_- = -ig/2$. Dette gir at også g_+ må være entydig, $g_+ = f - f_0 - g_-$. Da oppsplittingen $f = f_0 + g_- + g_+$ er entydig vil $D(S^*) = D(S) + N_- + N_+$ være en direkte sum som indikert i teoremet. Fordi $S^* g_\pm = \pm i g_\pm$ og $S \subset S^*$ er siste likhet i teoremet klar. $\boxed{\hbar}$

Følgende teorem er ikke annet enn en reformulering av teoremet før foregående med assistanse fra foregående teorem:

Teorem 7.11 (von Neumanns andre formel) *La* S *være en lukket symmetrisk operator på Hilbertrommet* $\mathcal{H}$.

S' *er en symmetrisk lukket utvidelse til* S *hvis og bare hvis: Det finnes lukkede underrom* $F_\pm \subset N_\pm$ *med en isomorfi* $\tilde{U}$ *fra* F_+ *på* F_- *slik at:*

$$D(S') = D(S) + \left\{ g - \tilde{U}g : g \in F_+ \right\} \tag{7.33}$$

$$S'(f_0 + g - \tilde{U}g) = S^*(f_0 + g - \tilde{U}g) \tag{7.34}$$

$$= Sf_0 + ig + i\tilde{U}g,\ f_0 \in D(S)\ g \in F_+ \tag{7.35}$$

S' *er selvadjungert hvis og bare hvis* $F_\pm = N_\pm$.

Bevis. Med notasjon som i teorem før foregående:

$$D(S') = R(I-U') = (I-U')D(U') = (I-U')(D(U)+F_+) \tag{7.36}$$
$$= (I-U)D(U) + (I-\tilde{U})F_+ = D(S) + \left\{ g - \tilde{U}g : g \in F_+ \right\} \tag{7.37}$$

Den siste likning i teoremet følger ved at $S' \subset S^*$ og foregående teorem. $\boxed{\hbar}$

Gangen for å finne selvadjungerte utvidelser av symmetriske operatorer er derfor først å finne $N_\pm$ som for differensialoperatorer vil si å løse to differensiallikninger. Deretter finnes en (eller annen) isomorfi fra N_+ på N_- som i kvantemekanikken bestemmes av det fysiske problem en ønsker å studere. Med det overstående er den selvadjungerte utvidelsen gitt. Ofte velges å uttrykke $D(S')$ som en innskrenkning av $D(S^*)$ mer direkte.

Avslutter historien om selvadjungerte utvidelser med å definere en klasse av operatorer som har selvadjungerte utvidelser:

Teorem 7.12 *La S være en symmetrisk operator på det komplekse Hilbertrommet $\mathcal{H}$. Hvis $\Gamma(S) \cap \mathbf{R} \neq \emptyset$,så har S selvadjungerte utvidelser. Spesielt er dette tilfelle hvis S er semibegrenset.*

Bevis. De defekte indekser vil være like fordi $\Gamma(S)$ er sammenhengende og inneholder øvre og nedre halvplan. $\boxed{\hbar}$

Sløyfer historien om de K-reelle symmetriske operatorer hvor K er en konjugering på Hilbertrommet $\mathcal{H}$, men refererer til [23, 17, s.235,s.143(kap.X)].

Kapittel 8

Spektralteoremet og spektralteori for selvadjungerte operatorer

Fra matriseteori er det velkjent at en normal $n \times n$-matrise T har en spektraldekomposisjon [21, s.237]:

$$T = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i P_i, \quad k \leq n, \ P_i P_j = 0 \text{ når } i \neq j \tag{8.1}$$

Her er λ_i en egenverdi og P_i den ortogonale projeksjonen på (det endelig dimensjonale) egenvektorrommet.

Hvis vi holder oss til kompakte normale operatorer, så er generaliseringen lik ovenstående også når det underliggende Hilbertrom er uendelig dimensjonalt. Forskjellen består i at en får å summere over et uendelig antall egenverdier (λ_i) med tilhørende (endelig rang) ortogonale projeksjoner (P_i).

For operatorer med et ikke diskret spekter, er det rimelig å vente en generalisering hvor summasjonen blir erstattet av et integral. For en slik generalisering trenger en litt mer verktøy, som vil bli presentert i det følgende.[1]

8.1 Integrasjon med hensyn på en spektralfamilie

Definisjon 8.1 *$E : \mathbf{R} \to B(\mathcal{H})$ er en (reell) spektralfamilie på Hilbertrommet $\mathcal{H}$ hvis:*

1. *$E(t)$ er en ortogonal projeksjon for alle $t \in \mathbf{R}$.*
2. *$E(t) \leq E(s)$ når $t \leq s$.*
3. *$E(t) = s - \lim E(t + \epsilon)$ når $\epsilon \to 0+$.*
4. *$E(t) \xrightarrow{s} 0$ når $t \to -\infty$ og $E(t) \xrightarrow{s} I$ når $t \to \infty$.*

[1] Det er her en god ide å sammenligne med den formelle formuleringen av kvantemekanikken som jeg presenterte i starten. Legg spesielt merke til analogiene til $\sum_n |n\rangle \langle n| = I$.

For å nærme seg en definisjon av et integral defineres:

$$\rho_f(t) = \langle f|E(t)f\rangle = \|E(t)f\|^2 \quad f \in \mathcal{H}\ t \in \mathbf{R} \tag{8.2}$$

ρ_f er en monotont voksende høyrekontinuerlig funksjon. Den er begrenset ved $\rho_f(-\infty) = 0$ og $\rho_f(\infty) = \|f\|^2$. ρ_f kan derfor benyttes til å definere et mål på $\mathbf{R}$ via [23, s.363]:

$$\rho_f(J) = \begin{cases} \rho_f(b) - \rho_f(a) & \text{for } J = (a, b] \\ \rho_f(b) - \rho_f(a-) & \text{for } J = [a, b] \\ \rho_f(b-) - \rho_f(a) & \text{for } J = (a, b) \\ \rho_f(b-) - \rho_f(a-) & \text{for } J = [a, b) \end{cases} \tag{8.3}$$

La nå $u : \mathbf{R} \to \mathbf{K}$ være en trappefunksjon,$u \in T$:

$$u(t) = \sum_{j=1}^{N} c_j \chi_{J_j}(t), \quad J_j \cap J_i = \emptyset \text{ når } i \neq j,\ c_j \in \mathbf{K} \tag{8.4}$$

Her er J_j disjunkte intervall og χ_{J_j} de tilhørende karakteristiske funksjoner (= 1 på J_j og = 0 ellers).

Integralet av en trappefunksjonen u med hensyn til målet gitt av ρ_f defineres ved:

$$\int u(t) d\rho_f(t) = \sum_{j=1}^{N} c_j \rho_f(J_j) \tag{8.5}$$

Ved å se på følger (u_n) av trappefunksjoner kan integralet av mer generelle funksjoner defineres. Nøyer meg her ved å henvise til [23, 20, 19, s.362, ,] for definisjon av grunnleggende begrep som σ-algebraer,målbarhet, integrable funksjoner etc.. Minner bare spesielt om at alle kontinuerlige funksjoner er målbare hvis en benytter en σ-algebra som inneholder de åpne mengdene.

Definerer integralet:

$$\int d\rho_f(t) \stackrel{def}{=} \lim_{a\to-\infty} \lim_{b\to\infty} \rho_f([a, b]) \equiv \rho_f(\mathbf{R}) = \|f\|^2 \tag{8.6}$$

En E-målbar u defineres ved at den er ρ_f-målbar for alle $f \in \mathcal{H}$. Overstående integral gir at alle (essensielt) begrensede E-målbare u er med i $L_2(\mathbf{R}, \rho_f)$ for alle $f \in \mathcal{H}$. $L_2(\mathbf{R}, \rho_f)$ er mengden av de kvadratisk ρ_f-integrable funksjoner med verdier i $\mathbf{K}$.

Nå kan vi vende tilbake til oppgaven med å definere et integral med hensyn på spektralklassen $E(t)$. For $u \in T$ defineres analogt foregående:

$$\int \sum_{j=1}^{N} c_j \chi_{J_j} dE(t) = \sum_{j=1}^{N} c_j E(J_j) \tag{8.7}$$

Som for ρ_f defineres $E([a, b)) = E(b-) - E(a-)$ og tilsvarende for andre typer intervall. Her defineres $E(a-) = s - \lim E(a - \epsilon)$ som eksisterer og er en ortogonal projeksjon fra teorem

5.10. Noterer videre at $E((a,b]) = E(b) - E(a)$ er en ortogonal projeksjon på $R(E(b)) \ominus R(E(a))$ fordi $E(a) \leq E(b)$ [23, s.82-83]. Tilsvarende gjelder for $E(J)$ når J er et generelt intervall. Spesielt har man $E(J_j)E(J_i) = 0$ når J_j og J_i er disjunkte. Resultatet av definisjonen over er så langt i komplett analogi med spektralrepresentasjonen til en kompakt endelig rang operator. Generaliseringen så langt består i at $E(J)$ ikke behøver å ha endelig rang. For $u \in T, f \in \mathcal{H}$ er følgende identitet avgjørende for en videre generalisering:

$$\left\| \int u(t) dE(t) f \right\|^2 = \left\langle \textstyle\sum_i c_i E(J_i) f \middle| \sum_j E(J_j) f \right\rangle \tag{8.8}$$

$$= \textstyle\sum_{i,j} c_i^* c_j \left\langle E(J_i) f | E(J_j) f \right\rangle \tag{8.9}$$

$$= \textstyle\sum_j |c_j|^2 \left\| E(J_j) f \right\|^2 \tag{8.10}$$

$$= \textstyle\int |u(t)|^2 \, d\rho_f(t) \tag{8.11}$$

La nå $u \in L_2(\mathbf{R}, \rho_f)$. Da finnes det en følge (u_n) fra T slik at $u_n \to u$ i $L_2(\mathbf{R}, \rho_f)$, d.v.s. $\int |u_n - u|^2 \, d\rho_f \to 0$. Dermed vil:

$$\left\| \int u_n dE(t) f - \int u_m dE(t) f \right\|^2 = \textstyle\int |u_n - u_m|^2 \, d\rho_f \tag{8.12}$$

$$\to 0, \ n, m \to \infty \tag{8.13}$$

og $(\int u_n(t) dE(t) f)$ er en Cauchyfølge i $\mathcal{H}$. Grensen eksisterer derfor og man kan definere:

$$\int u(t) dE(t) f = \lim \int u_n(t) dE(t) f \tag{8.14}$$

Ved denne konstruksjonen har man da beholdt:

$$\left\| \int u(t) dE(t) f \right\|^2 = \int |u(t)|^2 \, d\rho_f(t), \quad u \in L_2(\mathbf{R}, \rho_f) \tag{8.15}$$

som er nyttig. En konsekvens av definisjonen er lineariteten til integralet:

$$\int (au + v) dE(t) f = a \int u dE(t) f + \int v dE(t) f, \ \ a \in \mathbf{K}, \ u, v \in L_2(\mathbf{R}, \rho_f) \tag{8.16}$$

Nå er vi istand til å definere en operator $\hat{E}(u)$ ved en spektralklasse E og en E-målbar funksjon u:

Teorem 8.2 *En normal operator $\hat{E}(u)$ kan defineres på Hilbertrommet $\mathcal{H}$ ved en spektralfamilie E og en E-målbar u:*

$$D(\hat{E}(u)) = \{ f \in \mathcal{H} : u \in L_2(\mathbf{R}, \rho_f) \} \tag{8.17}$$

$$\hat{E}(u) f = \int u(t) dE(t) f \tag{8.18}$$

Notasjonen $\hat{E}(u) = \int u(t)dE(t)$ *er vanlig. Hvis* u *er reell, så er* $\hat{E}(u)$ *selvadjungert.*

Anta så at u, v *er* E*-målbare funksjoner og* $a, b \in \mathbf{K}$*. Definerer den begrensede hjelpefunksjonen* ϕ_n *for* $n \in \mathbf{N}$*:*

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 1 \text{ hvis } |u(x)| \leq n \\ 0 \text{ ellers} \end{cases} \tag{8.19}$$

som oppfyller $u_{b,n} = \phi_n u \to u, u_{b,n} \leq u_{b,m} \leq u$ *når* $n < m$ *og tilsvarende for* $v, v_{b,n} = \psi_n v$*.*

1. *For alle* $f \in D(\hat{E}(u))$ *gjelder:*

$$\left\|\hat{E}(u)f\right\|^2 = \int |u(t)|^2 \, d\rho_f(t) \tag{8.20}$$

2. *For alle* $f \in D(\hat{E}(u))$ *og* $g \in D(\hat{E}(v))$ *gjelder:*

$$\left\langle \hat{E}(u)f|\hat{E}(v)g \right\rangle = \int u^*(t)v(t)d\left\langle f|E(t)g \right\rangle \tag{8.21}$$

$$\stackrel{def}{=} \lim_{n\to\infty} \int u^*_{b,n}(t)v_{b,n}(t)d\left\langle f|E(t)g \right\rangle \tag{8.22}$$

3. *Hvis* u *er begrenset vil* $\hat{E}(u) \in B(\mathcal{H})$*. En har:*

$$\left\|\hat{E}(u)\right\| \leq \sup\{|u(t)| : t \in \mathbf{R}\} \tag{8.23}$$

4. *Hvis* $u(t) \geq c$ *for alle* $t \in \mathbf{R}$*, så er* $\hat{E}(u)$ *semibegrenset:*

$$\left\langle f|\hat{E}(u)f \right\rangle \geq c\,\|f\|^2 \,|\quad \forall f \in D(\hat{E}(u)) \tag{8.24}$$

5. $a\hat{E}(u) + b\hat{E}(v) \subset \hat{E}(au + bv)$ *og* $D(\hat{E}(u) + \hat{E}(v)) = D(\hat{E}(|u| + |v|))$*.*
6. $\hat{E}(u)\hat{E}(v) \subset \hat{E}(uv)$ *og* $D(\hat{E}(u)\hat{E}(v)) = D(\hat{E}(uv)) \cap D(\hat{E}(u))$*.*
7. $\hat{E}(u)^* = \hat{E}(u^*)$ *og* $D(\hat{E}(u^*)) = D(\hat{E}(u))$*.*

Bevis. Beviset for dette finnes i [23, s.185]. Nøyer meg her med noen kommentarer.

Ved definisjonen er avbildningen $\hat{E}(u) : H \to H$ veldefinert. Ved bevis av linearitet er $\hat{E}(u)(f+g) = \hat{E}(u)f + \hat{E}(u)g$ det vanskeligste punkt. Som i andre punkter av beviset bevises dette først for begrensede u ved å se på følger av trappefunksjoner. Når egenskapen er fastlagt for begrensede u benyttes følgen $(u_{b,n})$ for å vise tilsvarende for ubegrensede u. Likning (**??**) er avgjørende for å vise at $f+g \in D(\hat{E}(u))$ hvis $f, g \in D(\hat{E}(u))$ hvor B. Levi's teorem kommer inn anvendt på følgen $(u_{b,n})$' i integralet med mål fra ρ_{f+g}.

At $\hat{E}(u)$ er normal og selvadjungert hvis $u \in \mathbf{R}$ er inneholdt i det første og siste punktet i teoremet.

(a) Denne er vist før.

(b) Dette er en generalisering av foregående og følger ved en fornuftig definisjon av $d\left\langle f|E(t)g \right\rangle$, f.eks. via polarisasjonsidentiteten.

(c) En klar konsekvens av første punkt.

(d) Enda en klar konsekvens av første punkt.

(e) Spektralrepresentasjonen skaper en maksimal operator.

(f) Kommentar som over.

(g) Beviser først at $D(\hat{E}(u))$ er tett i $\mathcal{H}$. Det følger ved å se på følgen $g_n = \hat{E}(\phi_n)f$ som klart konvergerer mot f for alle $f \in \mathcal{H}$. Det som skal til er da å vise at $u \in L_2(\mathbf{R}, \rho_{g_n})$. At $D(\hat{E}(u^*)) = D(\hat{E}(u))$ er klart fra definisjonen. Likeledes følger at $\hat{E}(u)$ og $\hat{E}(u^*)$ er formelt adjungerte til hverandre ved bruk av punkt (b) over. $D(\hat{E}(u)^*) \subset D(\hat{E}(u))$ vises ved igjen å ty til følgen $(u_{b,n})$.

$\boxed{\hbar}$

Selvadjungerte operatorer og normale operatorer på $\mathcal{H}$ som er gitt ved en spektralrepresentasjon som over er unitært ekvivalente med multiplikasjonsoperatoren indusert av $u(t)$ på rommet $\oplus_{\alpha \in A} L_2(\mathbf{R}, \rho_\alpha)$. $\{\rho_\alpha\}$ er en familie av høyrekontinuerlige ikke avtagende funksjoner. Den finnes ved en dekomposisjon av $H = \oplus_{\alpha \in A} \mathcal{H}_\alpha$, hvor $\mathcal{H}_\alpha = \overline{L\{E(t)f_\alpha : t \in \mathbf{R}\}}$ og $\rho_\alpha = \rho_{f_\alpha}$. At en slik oppsplitting er mulig følger ved bruk av Zorn's lemma [23, s.190].

8.2 Spektralteoremet

Foregående avsnitt ga at med en spektralfamilie $E(t)$ definert på $\mathcal{H}$ og en E-målbar reell u, så kunne en definere en selvadjungert operator $T = \hat{E}(u) = \int u(t)dE(t)$. Spektralteoremet for selvadjungerte operatorer sier at alle selvadjungerte operatorer kan representeres på denne måten:

Teorem 8.3 (Spektralteoremet) *For alle selvadjungerte T på Hilbertrommet $\mathcal{H}$ finnes eksakt en spektralfamilie $E(t)$ slik at $T = \int t dE(t)$. Spektralfamilien E til T er i det komplekse tilfellet gitt ved:*

$$\langle g|(E(b) - E(a))f\rangle = \tag{8.25}$$

$$\tag{8.26}$$

$$\lim_{\delta \to 0+} \lim_{\epsilon \to 0+} \frac{1}{2\pi i} \int_{a+\delta}^{b+\delta} \langle g|(R(t - i\epsilon, T) - R(t + i\epsilon, T))f\rangle \, dt \tag{8.27}$$

$$\tag{8.28}$$

$$f, g \in \mathcal{H} \; a, b \in \mathbf{R} \quad a \le b \tag{8.29}$$

Over er som før $R(z, T) = (z - T)^{-1}$ resolventen til T og $t \pm i\epsilon \in \rho(T)$ for en selvadjungert operator.

Bevis. Sløyfer beviset [23, s.191]. Et litt enklere bevis finnes ved å først se på spektralrepresentasjonen til Cayley transformasjonen til T [12, s.558]. $\boxed{\hbar}$

Dette teoremet gir spesielt at enhver selvadjungert T på $\mathcal{H}$ er unitært ekvivalent med multiplikasjonsoperatoren indusert av t på et Hilbertrom $\oplus_{\alpha\in A}L_2(\mathbf{R},\rho_\alpha)$ som gitt i foregående avsnitt.

Spektralteoremet gjør det mulig å snakke om funksjoner av (ubegrensede) selvadjungerte operatorer. Hvis E er spektralfamilien til den selvadjungerte operatoren T på Hilbertrommet $\mathcal{H}$, så defineres $u(T) = \hat{E}(u)$. For en analytisk u og en begrenset T faller denne definisjonen sammen med det en ville finne ved å sette T inn i Taylorrekken til u. Dette er ikke mulig for en ubegrenset T fordi definisjonsområdet der skaper problemer ($D(\lim_n T^n)$?). Rimeligheten i ovenstående definisjon understøttes av:

Teorem 8.4 *Hvis* $u(t) = \sum_{i=0}^N c_i t^i$*, så gjelder* $u(T) = \sum_{i=0}^N c_i T^i$.

Bevis. La $N = 0$. Da vil $\sum c_i T^i = T^0 \overset{def}{=} c_0 I$ ved definisjon. På den annen side $u(T)f = \int c_0 dE(t)f = c_0(E(\infty) - E(-\infty))f = c_0 f$, d.v.s. $u(T) = c_0 I$. Overstående er identiteten på hele $\mathcal{H}$ fordi alle $f \in \mathcal{H}$ oppfyller $u \in L_2(\mathbf{R},\rho_f)$ når u er begrenset.

La så $v(t) = \sum_{i=0}^{N-1} c_{i+1}t^i$ og anta at påstanden gjelder for $v(T)$. Vil benytte at $u(t) = v(t)t + c_0$. Dette gir:

$$v(T)T + c_0 I \subset \hat{E}(v(t)t + c_0) = u(T) \tag{8.30}$$

Ved å benytte $D(u(T)) \subset D(T)$ følger:

$$D(u(T)) = D(u(T)) \cap D(T) = D(\hat{E}(v(t)t + c_0)) \cap D(T) = D(v(T)T) \tag{8.31}$$

hvor jeg benyttet $D(\hat{E}(v)\hat{E}(id)) = D(\hat{E}(v \cdot id)) \cap D(\hat{E}(id))$.

Da er $D(u(T)) = D(v(T)T + c_0 I)$ og man er i mål. $\boxed{\hbar}$

8.3 Spekteret og spektralfamilien til selvadjungerte operatorer

Vil nå vise hvordan spektralfamilien $E(t)$ kan brukes til å karakterisere spekteret $\sigma(T)$ og punktspekteret $\sigma_p(T)$ til en selvadjungert operator T. Dette er kanskje den vanskeligste delen av teorien jeg behandler her.

Følgende teorem gir at punkter i spekteret er de punkter på tallinjen hvor spektralfamilien ikke er konstant.

Teorem 8.5 *La* T *være en selvadjungert operator med spektralfamilie* $E(t)$*. Følgende er ekvivalent:*

1. $s \in \sigma(T)$.
2. *Det finnes en følge* (f_n) *fra* $D(T)$ *hvor:* $\liminf \|f_n\| > 0$ *og* $(s - T)f_n \to 0$.
3. $E(s + \epsilon) - E(s - \epsilon) \neq 0,\ \forall \epsilon > 0$.

Bevis. (a) $\Rightarrow$ (b): Det finnes ikke en $c > 0$ slik at $\|(s-T)f\| \geq c\,\|f\|$ for alle $f \in D(T)$. Derfor finnes for alle $n \in \mathbf{N}$ en $f_n \in D(T)$ slik at $\|(s-T)f_n\| < n^{-1}\,\|f_n\|$. Uten tap av ovenstående kan det antas at $\|f_n\| = 1$ og (b) er vist.

(b) $\Rightarrow$ (a): La (f_n) være en følge hvor $(s-T)f_n \to 0$ som gitt. Hvis $s \in \rho(T)$ finnes en $c > 0$ slik at $\|(s-T)f\| \geq c\,\|f\|$ for alle $f \in D(T)$. Dette må da spesielt gjelde for alle f_n og må følgelig være galt. Da er $s \in \sigma(T)$.

(b) $\Rightarrow$ (c): La (f_n) være en følge som antatt. Anta at det finnes en $\epsilon > 0$ slik at $E(s+\epsilon) - E(s-\epsilon) = 0$. Da følger motsigelsen:

$$\|(s-T)f_n\|^2 = \int |s-t|^2\, d\rho_{f_n} \geq \epsilon^2\,\|f_n\|^2 \tag{8.32}$$

Ved overgangen til ulikhet ble det benyttet at $|s-t| \geq \epsilon$ med hensyn til målet indusert av $\rho_{f_n}(t) = \|E(t)f_n\|^2$. Dette følger ved:

$$\rho_f(\{t : |s-t| < \epsilon\}) = \int_{(s-\epsilon,s+\epsilon)} d\rho_f(t) \tag{8.33}$$

$$\leq \int_{(s-\epsilon,s+\epsilon]} d\rho_f(t) = \|E(s+\epsilon)f\|^2 - \|E(s-\epsilon)f\|^2 = 0 \tag{8.34}$$

(c) $\Rightarrow$ (b): Har $E(s+1/n) - E(s-1/n) \neq 0$ for alle $n \in \mathbf{N}$. Da finnes for alle n en $f_n \in R(E(s+1/n) - E(s-1/n))$ og man kan velge $\|f_n\| = 1$. For denne følgen gjelder $\liminf \|f_n\| = 1 > 0$ og:

$$\|(s-T)f_n\|^2 = \textstyle\int |s-t|^2\, d\,\|E(t)f\|^2 \tag{8.35}$$

$$\leq n^{-2}\,\|f_n\|^2 \to 0 \tag{8.36}$$

Ulikheten fulgte ved at $|s-t| \leq n^{-1}$ nesten over alt med hensyn til målet gitt ved $\rho_{f_n}(t)$. Beviset for dette er som over. $\boxed{\hbar}$

En konsekvens av ovenstående er at for $t \in (a,b) \subset \rho(T)$ vil $E(t)$ være konstant. Spesielt vil $T = \int t dE(t)$ kun få bidrag fra $t \in \sigma(T)$.

Følgende teorem gir at $s \in \sigma_p(T)$ bare for de punkter hvor $E(t)$ er diskontinuerlig.

Teorem 8.6 *La T være en selvadjungert operator på Hilbertrommet $\mathcal{H}$ med spektralklasse E. s er da med i punktspekteret hvis og bare hvis:*

$$E(s) - E(s-) \neq 0 \tag{8.37}$$

En har $N(s-T) = R(E(s) - E(s-))$

Bevis. La $Tf = sf$. Da vil:

$$0 = \|(s-T)f\|^2 = \int |s-t|^2\, d\,\|E(t)f\|^2 \tag{8.38}$$

Dermed må $E(t)f$ være konstant i $(-\infty, s)$ og i (s, ∞). Spesielt er $E(-\infty) = 0$ og $E(\infty) = I$ slik at $E(s-)f = 0$ og $E(s)f = E(s+)f = f$ og dermed $(E(s) - E(s-))f = f$.

Anta så at $f \in R(E(s) - E(s-))$. Da må $\|(s-T)f\|^2 = \int |s-t|^2 \, d\,\|E(t)f\|^2 = 0$ fordi $s - t = 0$ nesten over alt med hensyn til målet gitt av $\rho_f(t) = \|E(t)f\|^2$. Dette gir da og at $N(s-T) = R(E(s) - E(s-))$. $\boxed{\hbar}$

Har fra før inndelt spekteret $\sigma(T)$ i $\sigma_p(T)$ og $\sigma(t) \setminus \sigma_p(T)$. Det er flere muligheter. En definerer den diskrete delen av spekteret $\sigma_d(T) \subset \sigma_p(T)$ som de egenverdiene som er isolerte og av endelig multiplisitet. Det viser seg at alle isolerte punkter i spekteret $\sigma(T)$ er egenverdier:

Korollar 8.7 *Alle isolerte $\lambda \in \sigma(T)$ til en selvadjungert operator T er egenverdier.*

Bevis. Hvis λ er et isolert punkt i spekteret, så finnes per def. en $\epsilon > 0$ slik at:

$$[\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon] \cap \sigma(T) = \{\lambda\} \tag{8.39}$$

Dermed må $E(t)$ være konstant i $[\lambda - \epsilon, \lambda)$ og i $(\lambda, \lambda + \epsilon]$. Dette gir $E(\lambda) - E(\lambda-) = E(\lambda + \epsilon) - E(\lambda - \epsilon) \neq 0$. Hvor $\neq 0$ fulgte av at $\lambda \in \sigma(T)$. $\boxed{\hbar}$

Det essensielle spekteret defineres ved $\sigma_e(T) = \sigma(T) \setminus \sigma_d(T)$. Av ovenstående er det klart at $\sigma_e(T)$ består av opphopningspunkt i $\sigma(T)$ eller isolerte egenverdier med uendelig multiplisitet. Merk spesielt at et opphopningspunkt i $\sigma(T)$ kan være en egenverdi. T sies å ha et rent diskret spekter hvis $\sigma(T) = \sigma_d(T)$.

Det essensielle spekteret er karakterisert ved:

Teorem 8.8 *La T være en selvadjungert operator med spektralklasse E. Da er følgende ekvivalent:*

1. *$s \in \sigma_e(T)$.*
2. *Det finnes en følge (f_n) fra $D(T)$ slik at* $\liminf \|f_n\| > 0$, $\|(s-T)f_n\| \to 0$ *og* $f_n \xrightarrow{w} 0$.
3. *For alle $\epsilon > 0$ er* $\dim R(E(s+\epsilon) - E(s-\epsilon)) = \infty$.

Bevis. (a) $\Rightarrow$ (b): Hvis s er egenverdi med uendelig multiplisitet, så finnes en ortonormal følge (f_n) fra $N(s-T)$. Den oppfyller (b). Anta så at det finnes en ikke triviell følge (s_n) fra $\sigma(T)$ slik at $s_n \to s$. Følgen er ikke triviell ved kravet $s_n \neq s_m$ når $n \neq m$ og $s_n \neq s$ for alle $n \in \mathbf{N}$. Velger så ϵ_n, så liten at intervallene $(s_n - \epsilon_n, s_n + \epsilon_n)$ er disjunkte. Velger videre normerte $f_n \in R(E(s_n + \epsilon_n) - E(s_n - \epsilon_n))$ som er mulig fordi $s_n \in \sigma(T)$. Denne (f_n) oppfyller kravene i (b). Ortogonalitet følger av at intervallene om s_n er valgt disjunkte, og dette gir svak konvergens mot 0. En finner som i tidligere bevis at:

$$\|(s_n - T)f_n\|^2 \leq {\epsilon_n}^2 \, \|f_n\|^2 \tag{8.40}$$

Dette gir $\|(s-T)f_n\|^2 \to 0$, fordi $s_n \to s$ også tvinger $\epsilon_n \to 0$. $\|(s-T)f_n\| = \|(s-s_n)f_n + (s_n - T)f_n\|$ benyttet med trekantulikheten er alt som skal til.

(b) $\Rightarrow$ (c): Anta for motsigelse at det finnes en $\epsilon > 0$ slik at $\dim R(E(s+\epsilon)-E(s-\epsilon)) < \infty$. Fordi projeksjonen $E(s+\epsilon)-E(s-\epsilon)$ da har endelig rang må $(E(s+\epsilon)-E(s-\epsilon))f_n \to 0$ når $\langle g|f_n\rangle \to 0$ for alle $g \in \mathcal{H}$. På den annen side har man:

$$
\begin{aligned}
&\|(s-T)f_n\|^2 = \int |s-t|^2\, d\,\|E(t)f_n\|^2 && (8.41)\\
& && (8.42)\\
&= \int_{(-\infty,s-\epsilon]\cup(s-\epsilon,s+\epsilon]\cup(s+\epsilon,\infty)} |s-t|^2\, d\,\|E(t)f_n\|^2 && (8.43)\\
& && (8.44)\\
&\geq \int_{(-\infty,s-\epsilon]\cup(s+\epsilon,\infty)} |s-t|^2\, d\,\|E(t)f_n\|^2 && (8.45)\\
& && (8.46)\\
&\geq \epsilon^2 \int_{(-\infty,s-\epsilon]\cup(s+\epsilon,\infty)} d\,\|E(t)f_n\|^2 && (8.47)\\
& && (8.48)\\
&= \epsilon^2 \left[\int d\,\|E(t)f_n\|^2 - \int_{(s-\epsilon,s+\epsilon]} d\,\|E(t)f_n\|^2\right] && (8.49)\\
& && (8.50)\\
&= \epsilon^2 \left[\|f_n\|^2 - \|(E(s+\epsilon)-E(s-\epsilon))f_n\|^2\right] && (8.51)
\end{aligned}
$$

Dette er da i strid med $\lim \|(s-T)f_n\| = 0$.

(c) $\Rightarrow$ (a): Hvis $\dim(E(s)-E(s-)) = \infty$, så er s en egenverdi med uendelig multiplisitet. Anta så at $\dim(E(s)-E(s-)) < \infty$, men at $\dim(E(s+\epsilon)-E(s-\epsilon)) = \infty$ for alle $\epsilon > 0$. Da må $E(s+\epsilon)-E(s) \neq 0$ eller $E(s-)-E(s-\epsilon) \neq 0$ for alle $\epsilon > 0$. Følgelig må $(s-\epsilon, s)\cup(s, s+\epsilon]$ inneholde minst et spektralpunkt for alle $\epsilon > 0$. Da er s et opphopningspunkt i spekteret. $\boxed{\hbar}$

En karakterisering av det diskrete spekter er inneholdt i:

Teorem 8.9 *Anta* $\dim R(E(b-)-E(a)) = m < \infty$ *hvor* $a < b$*. Da inneholder* $(a,b)\cap\sigma(T)$ *bare isolerte egenverdier med total multiplisitet* $= m$*.*

Bevis. Foregående karakterisering av $\sigma_e(T) = \sigma(T)\setminus\sigma_d(T)$ gir $(a,b)\cap\sigma(T) \in \sigma_d(T)$. La $z_1 < z_2 < \ldots$ være egenverdiene til T i (a,b). Har da:

$$E(b-)-E(a) = \sum_{i=1}^{N} E(z_i)-E(z_i-) \tag{8.52}$$

som følger av at $E(t)$ er konstant i $\rho(T)$ samt karakteriseringen av $\sigma_p(T)$. Må her ha $N < \infty$, fordi $\dim R(E(b-)-E(a)) = m < \infty$ og $\dim R(E(z_i)-E(z_i-)) \geq 1$ for alle $i \in \{1,\ldots,N\}$. At summen av multiplisitetene er lik m, følger direkte av ovenstående. $\boxed{\hbar}$

For en annen oppdeling av spekteret referer jeg til [23, s.206-].

8.4 Spekteret til selvadjungerte utvidelser av symmetriske operatorer

La T være en lukket symmetrisk operator med like defekte indekser. Innfører notasjonen $n(T,\lambda) = \dim N(\lambda - T)$. Hvis λ er en egenverdi til T er derfor $n(T,\lambda)$ multiplisiteten til egenverdien.

Definer $\mathcal{H}_z = N(z-T)^{\perp}$ for alle $z \in \mathbf{K}$. Har $T(N(z-T)) \subset N(z-T)$ som følger av at $f \in N(z-T)$ gir $Tf = zf \in N(z-T)$. Har også $T(\mathcal{H}_z \cap D(T)) \subset \mathcal{H}_z$. Dette følger ved at for $f \in \mathcal{H}_z \cap D(T)$ og $g \in N(z-T)$ følger $\langle g|Tf\rangle = \langle Tg|f\rangle = z^* \langle g|f\rangle = 0$, d.v.s. at $Tf \in N(z-T)^{\perp} = \mathcal{H}_z$. Restriksjonen av T til $\mathcal{H}_z$ døpes T_z. $z - T_z$ er injektiv ved denne definisjonen. Som en operator på $\mathcal{H}_z$ blir T_z symmetrisk. Dette fordi $D(T)$ tett i $\mathcal{H}$ automatisk gir $D(T_z) = D(T) \cap \mathcal{H}_z$ tett i $\mathcal{H}_z \subset H$.

Den spektrale kjernen $S(T)$ til T defineres ved $S(T) = \mathbf{K} \setminus \Gamma(T)$ hvor regularitetsområdet $\Gamma(T)$ er definert som før. Den essensielle spektrale kjernen $S_e(T)$ til T defineres ved:

$$S_e(T) = \Big\{ z \in \mathbf{K} : (z - T_z)^{-1} \text{ ubegrenset eller } n(T,z) = \infty \Big\} \tag{8.53}$$

$S_e(T)$ og $S(T)$ er koplet til $\sigma_e(T)$ og $\sigma(T)$ på en ikke uventet måte. I tillegg sier følgende teorem at den spektrale kjernen til en lukket symmetrisk operator er reell i motsetning til spekteret som kun er reelt hvis T er selvadjungert.

Teorem 8.10 *La T være en lukket symmetrisk operator. Da gjelder:*

1. $S_e(T) \subset S(T) \subset \mathbf{R}$ *og* $S(T) \subset \sigma(T)$.
2. *Hvis T' er en lukket symmetrisk ekstensjon av T, så vil $S(T) \subset S(T')$ og $S_e(T) \subset S_e(T')$.*
3. *Hvis T' er en endelig dimensjonal lukket symmetrisk utvidelse av T,så er $S_e(T') = S_e(T)$.*
4. *Er T selvadjungert, så er $S_e(T) = \sigma_e(T)$ og $S(T) = \sigma(T)$.*

Bevis.

(a) La $z \in S_e(T)$. Hvis $n(T,z) = \infty$ er ikke $z - T$ invertibel og $z \notin \Gamma(T)$. $z - T$ er ikke kontinuerlig invertibel hvis $(z - T_z)^{-1}$ er ubegrenset, d.v.s. $z \notin \Gamma(T)$ også i det tilfellet. Altså $S_e(T) \subset S(T)$. For en Hermitesk operator inneholder $\Gamma(T)$ øvre og nedre halvplan. Derfor må $S(T) \subset \mathbf{R}$. Når $z \in S(T)$ så er $z - T$ ikke kontinuerlig invertibel. Da er $z \notin \rho(T)$ og derfor $S(T) \subset \sigma(T)$.

(b) $\Gamma(T') \subset \Gamma(T)$ er klart fordi $(z-T')^{-1}$ begrenset på $R(z-T') \supset R(z-T)$ automatisk gir $(z-T)^{-1}$ begrenset på $R(z-T)$. Dette gir $S(T) \subset S(T')$. Vil så vise at $S_e(T) \subset S_e(T')$. Anta derfor $z \in S_e(T)$. Hvis $n(T',z) = \infty$, så er $z \in S_e(T')$. Ser deretter på tilfellet $\infty > n(T',z) \geq n(T,z)$. Da må $z - T_z$ være ubegrenset. Må da vise at det gir $z - {T_z}'$ ubegrenset. En har en følge (f_n) fra $D(T_z)$ slik at $\|f_n\| = 1$ og $(z - T_z)f_n \to 0$. La så P være projeksjonen på det endelig dimensjonale $N(z - T')$. Definer $g_n = (I - P)f_n$. Da gjelder:

$$(z - {T_z}')g_n = (z - T')f_n - (z - T')Pf_n = (z - T)f_n \to 0 \tag{8.54}$$

Hvis man nå kunne vise at $g_n \not\to 0$, så ville en være fremme, d.v.s. $z - {T_z}'$ ville være ubegrenset. Medisinen her er å finne en ikke konvergent delfølge (g_{n_k}) av (g_n). Noterer først at (f_n) ikke har noen konvergente delfølger: Anta at $f_{n_k} \to f$. Da vil $\|f\| = 1$ og $T_z f_{n_k} \to z f_{n_k}$. Fordi T_z er lukket gir dette $f \in D(T_z)$ og $T_z f = zf$ som er i strid med at $z - T_z$ er injektiv. Fordi (f_n) er begrenset og P er kompakt finnes en delfølge (f_{n_k}) slik at (Pf_{n_k}) er konvergent. Fordi (f_n) ikke har noen konvergente delfølger kan da $(g_{n_k}) = ((I-P)f_{n_k})$ heller ikke være konvergent.

(c) Må nå vise $S_e(T') \subset S_e(T)$ da ovenstående ga det motsatte. $z \in S_e(T') \Rightarrow z \in S_e(T)$ er det samme som $z \notin S_e(T) \Rightarrow z \notin S_e(T')$ og vi viser det siste. Antar $z \notin S_e(T)$. Da er $n(T,z) < \infty$ og $(z - T_z)^{-1}$ er begrenset og lukket. Lukket Graf Teoremet gir da at $R(z-T) = R(z-T_z) = D((z-T_z)^{-1})$ er lukket. Fordi T' er en m-dimensjonal utvidelse av T finnes elementer $f_1, \ldots, f_l$ med $l \le m$ slik at $R(z-T') = R(z-T) + L\{f_i\}$. Da er $D((z-{T_z}')^{-1}) = R(z-T')$ lukket og Lukket Graf Teoremet gir at den lukkede operator $(z-{T_z}')^{-1}$ må være begrenset. Fordi T' er en m dimensjonal utvidelse har man og $n(T',z) \le n(T,z) + m < \infty$. Tilsammen $z \notin S_e(T')$.

(d) For en lukket normal operator T er $z \in \rho(T)$ hvis og bare hvis $z - T$ er kontinuerlig invertibel. Dette gir $S(T) = \sigma(T)$ for en normal T og spesielt for en selvadjungert T. Vil så vise at $S_e(T) = \sigma_e(T)$. Viser først at $\sigma_e(T) \subset S_e(T)$. Hvis s er en egenverdi med uendelig multiplisitet, så vil $n(T,s) = \infty$ og $s \in S_e(T)$. Anta så at s er et opphopningspunkt i $\sigma(T)$. Da finnes en ortonormal følge (f_n) fra $D(T)$ slik at $(s-T)f_n \to 0$, j.m.f. teorem 8.8 med bevis. I følgen fra det refererte teorem er $f_n \in R(E(s) - E(s-))^{\perp}$, d.v.s. $f_n \in N(s-T)^{\perp}$. Dermed er $f_n \in D(T_s)$, og $(s - T_s)f_n = (s-T)f_n \to 0$ gir at $(s-T_s)^{-1}$ er ubegrenset og $s \in S_e(T)$. Viser så $S_e(T) \subset \sigma_e(T)$. Hvis $n(T,s) = \infty$ er s en egenverdi med uendelig multiplisitet og $s \in \sigma_e(T)$. Anta så at $(s-T_s)^{-1}$ er ubegrenset. For motsigelse antas at s ikke er et opphopningspunkt i $\sigma(T)$. Da finnes en $\epsilon > 0$ slik at $(s-\epsilon, s+\epsilon) \cap \sigma(T) = \{s\}$ eller med andre ord $E(t)$ er konstant i $(s-\epsilon, s)$ og $(s, s+\epsilon)$. For alle $f \in D(T_s)$ gjelder da:

$$\|(s-T_s)f\|^2 = \|(s-T)f\|^2 = \int |s-t|^2 \, d\,\|E(t)f\|^2 \ge \epsilon^2 \|f\|^2 \tag{8.55}$$

som er i strid med at $(s-T_s)^{-1}$ er ubegrenset.

$\boxed{\hbar}$

Foregående teorem gir følgende nyttige korollar anngående selvadjungerte utvidelser til en symmetrisk operator med like defekte indekser.

Korollar 8.11 *La T være en lukket symmetrisk operator på et komplekst Hilbertrom $\mathcal{H}$ med endelige like defekte indekser. Alle selvadjungerte utvidelser til T vil ha det samme essensielle spekter. Spesielt hvis en selvadjungert utvidelse har et rent diskret spekter, så vil også alle andre selvadjungerte utvidelser ha det.*

Bevis. Fordi alle selvadjungerte utvidelser T' til T er endeligdimensjonale utvidelser vil $\sigma_e(T') = S_e(T') = S(T)$. Spekteret til T' er rent diskret hvis og bare hvis $\sigma_e(T') = \emptyset$. Det gir påstanden om de diskrete spekter. $\boxed{\hbar}$

For Schrödinger operatorer som inneholder delta- og deltaderivertfunksjonen er følgende teorem med etterfølgende korollar viktig. Det skal vise seg at det gir en skranke på antall nye egenverdier ved pertubasjoner av Hamiltonoperatoren med de nevnte funksjoner. En har:

Teorem 8.12 *La T være en lukket symmetrisk operator på et komplekst Hilbertrom $\mathcal{H}$ med endelige defekte indekser (m, m). Anta at det finnes en $z \in \mathbf{R} \cap \Gamma(T)$, d.v.s.:*

$$\exists z \in \mathbf{R},\ \exists c > 0,\ \ \|(z-T)f\| \geq c\,\|f\|\ \ ,\forall f \in D(T) \tag{8.56}$$

Da vil alle selvadjungerte utvidelser T' til T oppfylle: $\sigma(T') \cap (z-c, z+c)$ inneholder bare isolerte egenverdier med total multiplisitet $\leq m$.

Bevis. Av karakteriseringen av det diskrete spekteret følger det at det holder å vise at $\dim R(E((z+c)-) - E(z-c)) \leq m$ for spektralfamilien E til en selvadjungert utvidelse T'. Antar at $\dim R(E((z+c)-) - E(z-c)) > m$ for motsigelse. Har $R(E(z+c-) - E(z-c)) \subset D(T')$ fordi $R(E(J)) \subset D(T')$ for et vilkårlig intervall J. Fordi $\dim D(T')/D(T) = m$ må det da finnes en $f \in R(E(z+c-) - E(z-c)) \cap D(T)$, $f \neq 0$. For denne f finnes:

$$c^2\,\|f\|^2 \leq \|(z-T)f\|^2 = \int_{(z-c,z+c)} |z-t|^2\, d\,\|E(t)f\|^2 < c^2\,\|f\|^2 \tag{8.57}$$

som er en motsigelse. $\boxed{\hbar}$

Korollar 8.13 *La T være en lukket symmetrisk operator på et komplekst Hilbertrom $\mathcal{H}$ med endelige defekte indekser (m, m). La videre T_1, T_2 være selvadjungerte utvidelser til T. Hvis $\sigma(T_1) \cap (a, b) = \emptyset$, så vil $\sigma(T_2) \cap (a, b)$ bestå av isolerte egenverdier med total multiplisitet $\leq m$.*

Bevis. Anta først $-\infty < a < b < \infty$. Da oppfyller T antagelsen i foregående teorem med $z = (a+b)/2$ og $c = (a-b)/2$.

$$\|(z-T)f\|^2 = \|(z-T_1)f\|^2 = \int_{\mathbf{R}\setminus(a,b)} |z-t|^2\, d\,\|E(t)f\|^2 \geq c^2\,\|f\|^2, \tag{8.58}$$

(8.59)

$$f \in D(T) \subset D(T_1) \tag{8.60}$$

Dette fordi spektralklassen $E(t)$ til T_1 er konstant i (a, b). T_2 må da i følge foregående teorem oppfylle påstanden. For (a, b) ubegrenset oppnås resultatet ved å se på alle begrensede $(a', b') \subset (a, b)$. $\boxed{\hbar}$

Kapittel 9

Konkrete operatorer, spesielt noen Schrödingeroperatorer

Vil nå se på noen konkrete operatorer som har relevans for kvantemekanikken for en partikkel i en dimensjon. Hilbertrommet vil derfor være $\mathcal{H} = L_2(M, dx)$ hvor $M = (a, b) \subset \mathbf{R}$ er et intervall,$-\infty \leq a < b \leq \infty$. Mange av operatorene har naturlige generaliseringer til $L_2(\mathbf{R}^n, dx)$.

9.1 Multiplikasjon med en målbar funksjon

Anta at $t : M \to \mathbf{C}$ er en målbar funksjon.[1] Den maksimale multiplikasjonsoperator T på $\mathcal{H} = L_2(M)$ indusert av t er definert ved:

$$D(T) = \{f \in \mathcal{H} : tf \in \mathcal{H}\} \tag{9.1}$$

$$Tf = tf \text{ når } f \in D(T) \tag{9.2}$$

Det er lett å innse at $\overline{D(T)} = \mathcal{H}$: La $f \in \mathcal{H}$. Se så på følgen $f_n = \chi_{M_n} f$ hvor $M_n = \{x \in M : |t(x)| \leq n\}$. Den oppfyller $f_n \in D(T)$ og $f_n \to f$.

Den adjungerte til T er gitt på den naturlige måten:

Lemma 9.1 *La T være operatoren indusert av den målbare funksjonen $t : M \to \mathbf{C}$. Da er T^* operatoren indusert av t^* og $D(T^*) = D(T)$.*

Bevis. La T_1 være operatoren indusert av t^*. Det er klart at $D(T) = D(T_1)$. T_1 og T er formelt adjungerte, fordi for alle $f, g \in D(T)$ er $\langle f|tg\rangle = \langle t^* f|g\rangle$. Det gjenstår da å vise at $D(T^*) \subset D(T_1)$, d.v.s. at $g \in D(T^*) \Rightarrow t^* g \in L_2(\mathbf{R})$. Det følger ved;

$$\infty > \langle f|T^* g\rangle = \langle Tf|g\rangle = \int f^*(x)(t^*(x)g(x))dx,\ f \in D(T),\ g \in D(T^*) \tag{9.3}$$

som gir $t^* g \in L_2(\mathbf{R})$ da overstående gjelder for alle $f \in D(T)$ og $D(T)$ er tett i $L_2(\mathbf{R})$. $\boxed{\hbar}$

[1]Her trenger ikke M være et intervall. M må være Lebesgue målbar.

Overstående gir direkte at T er en lukket operator. Dette fordi T er den adjungerte til operatoren indusert av t^*. Kan notere spesielt at T er selvadjungert hvis og bare hvis $t = t^*$.

Hvis $t(x)$ er forskjellig fra null nesten overalt, så har T en invers T^{-1} indusert av:

$$t_1(x) = \begin{cases} t(x)^{-1} & \text{når } t(x) \neq 0 \\ 0 & \text{når } t(x) = 0 \end{cases} \tag{9.4}$$

En funksjon $s : M \to \mathbf{R}$ er essensielt begrenset ovenifra hvis det finnes en $C \geq 0$ slik at $s(x) \leq C$ nesten over alt, d.v.s. $\{x \in M : s(x) > C\}$ har mål null. Den minste C av denne typen kalles det essensielle supremum til s, $\operatorname{ess\,sup} s$. $\operatorname{ess\,inf} s$ defineres analogt. t er essensielt begrenset hvis $|t|$ er essensielt begrenset ovenifra.

Lemma 9.2 *T er begrenset hvis og bare hvis t er (essensielt) begrenset. Da er $\|T\| = \operatorname{ess\,sup} |t|$.*

Bevis. Anta at t ikke er begrenset. Da har $M_n = \{x \in M : |t(x)| > n\}$ mål større enn 0 for alle n. Dermed vil $\|Tf\| > n\,\|f\|$ for $f \in L_2(M)$ som er null utenfor M_n. Da dette gjelder for alle $n \in \mathbf{N}$, må T være ubegrenset. Anta så at $\operatorname{ess\,sup} |t| = C < \infty$. Da er det klart at $\|Tf\| \leq C\,\|f\|$, d.v.s. $\|T\| \leq C$. Hvis $C = 0$, så blir $\|T\| = 0$. Ser så på mengden $M_d = \{x \in M : |t(x)| \geq C - d\}$ som må ha positivt mål når $d \in (0, C)$. For en $f \in L_2(M)$ som forsvinner utenfor M_d vil da $\|Tf\| \geq (C - d)\,\|f\|$ som gir $\|T\| \geq C$. $\boxed{\hbar}$

Lukket Graf Teoremet gir nå spesielt at $D(T) = L_2(M)$ hvis og bare hvis t er essensielt begrenset. Det gir og at $R(T) = L_2(M)$ hvis og bare hvis det finnes en $c > 0$ slik at $|t(x)| \geq c$ nesten over alt.

Operatoren T er normal, d.v.s. $D(T) = D(T^*)$ og $\|Tf\| = \|T^*f\|$ for alle $f \in D(T)$. Det siste gjelder fordi $\langle Tf|Tf\rangle = \langle tf|tf\rangle = \langle t^*tf|f\rangle = \langle t^*f|t^*f\rangle$ for alle $f \in D(T)$.

Spekteret til T for generell kompleks målbar t er karakterisert ved:

Lemma 9.3 *La T være den maksimale multiplikasjonsoperator indusert av $t : M \to \mathbf{C}$ og la $\mu(\cdot)$ være Lebesgue målet på $\mathbf{R}$. Egenverdiene til T er da gitt ved:*

$$\sigma_p(T) = \{z \in \mathbf{C} : \mu(\{x \in M : t(x) = z\}) > 0\} \tag{9.5}$$

Spekteret er gitt ved:

$$\sigma(T) = \{z \in \mathbf{C} : \forall \epsilon > 0 \text{ er } \mu(\{x \in M : |t(x) - z| < \epsilon\}) > 0\} \tag{9.6}$$

Spesielt er $\sigma(T)$ tillukningen til verdiområdet til t, hvis M er åpen og t stykkevis kontinuerlig. $\sigma_p(T)$ blir da de t verdier hvor $t(x)$ er konstant.

Bevis. Punktspekteret er gitt ved at $z - T$ ikke skal være invertibel, d.v.s. når $\mu(\{x \in M : z - t(x) = 0\}) > 0$.

Resolventmengden $\rho(T) = \mathbf{C} \setminus \sigma(T)$ er gitt ved at $z - T$ skal være kontinuerlig invertibel for $z \in \rho(T)$. Dette er tilstrekkelig og nødvendig fordi T er normal. Dermed er:

$$\rho(T) = \{z \in \mathbf{C} : \exists \epsilon > 0 \text{ slik at } |z - t(x)| \geq \epsilon \text{ n.o.a i } M\} \tag{9.7}$$

$\boxed{\hbar}$

Anta at z er en egenverdi til T. Da vil $M_p = \{x \in M : z - t(x) = 0\}$ ha mål større enn null. Egenfunksjonene tilhørende z er de $f \in L_2(M)$ som er (essensielt) null utenfor M_p. Dette gir spesielt at det diskret spekter er tomt fordi eventuelle egenverdier har uendelig multiplisitet.

Vil så se på $t : M \to \mathbf{R}$. Da er T selvadjungert og kan representeres ved en reell spektralfamilie $E(s)$.

Lemma 9.4 *La T være den maksimale operator indusert ved multiplikasjon med $t : M \to \mathbf{R}$ på $L_2(M)$. Spektralfamilien $E(s)$ er da operatorene indusert ved multiplikasjon med:*

$$\chi_{(-\infty,s]\cap M} \circ t = \chi_{M(s)} \tag{9.8}$$

(9.9)

$$M(s) = \{x \in M : t(x) \le s\} \tag{9.10}$$

Bevis. $E(s)$ er den ortogonale projeksjon ned på de funksjoner $f \in L_2(M)$ som har sin (essensielle) bærer i $M(s)$. Noterer egenskapene $M(s_1) \subset M(s_2)$ når $s_1 \le s_2$, $M(-\infty) = \emptyset$ og $M(\infty) = M$ hvor likhet her betyr at mengdedifferansen har Lebesgue mål 0. Det er klart at E oppfyller $E(s_1) \le E(s_2)$ når $s_1 \le s_2$, kontinuitet og $E(-\infty) = 0, E(\infty) = I$. Tilsammen er derfor E en spektralfamilie.

Ser så på operatoren $\hat{E}(u)$ hvor $u(t) = \sum_{j=1}^{N} c_j \chi_{J_j}$ er en trappefunksjon. Da er $D(\hat{E}(u)) = L_2(M)$ og for alle $f \in L_2(M)$ gjelder:

$$\left(\hat{E}(u)f\right)(x) = \sum_j c_j \chi_{M(J_j)}(x) f(x) \tag{9.11}$$

$$= \sum_j c_j \chi_{J_j}(t(x)) f(x) = u(t(x)) f(x) \tag{9.12}$$

Dette gir for generell E-målbar u:

$$D(\hat{E}(u)) = \{f \in L_2(M) : u \circ t \in L_2(M)\} \tag{9.13}$$

$$\hat{E}(u)f = (u \circ t)f, \; f \in D(\hat{E}(u)) \tag{9.14}$$

Påstanden i lemmaet følger da ved $u = id$. $\boxed{\hbar}$

Spesialtilfellet $t(x) = x$,d.v.s. $t = id$ er spesielt enkelt. Da blir spektralfamilien $E(s)$ indusert av multiplikasjon med $\chi_{(-\infty,s]}$.

9.2 Differensialoperatorer

I det følgende vil $M = (a, b)$ hvor $-\infty \le a < b \le \infty$. Definerer mengden:

$$A_n(a,b) = \{f : (a,b) \to \mathbf{C} : f, f', \ldots, f^{(n-2)} \tag{9.15}$$

$$\text{er kontinuerlig deriverbare på } (a,b) \tag{9.16}$$

$$\text{og } f^{(n-1)} \text{ er absolutt kontinuerlig på } (a,b)\} \tag{9.17}$$

Dette gir spesielt at for $f \in A_n(a,b)$, så eksisterer $f^{(n)}$ og $f^{(n)}$ er integrabel over alle kompakte intervall $\subset (a,b)$.

Sobolev rommet av orden n på (a,b) kan defineres ved:

$$W_{2,n}(a,b) = \left\{ f \in A_n(a,b) \cap L_2(a,b) : f^{(n)} \in L_2(a,b) \right\} \tag{9.18}$$

Dette impliserer spesielt at $f^{(j)} \in L_2(a,b)$ for $j = 0, \ldots, n$ [23, s.157] når $f \in W_{2,n}(a,b)$.

Vil så definere operatorer ved de differensielle former:

$$\tau_n = \left(\frac{1}{i}\right)^n \frac{d^n}{dx^n} \tag{9.19}$$

Minner om at impulsoperatoren p i kvantemekanikken (i x-representasjonen) er gitt ved den differensielle formen τ_1.

La $C_0^\infty(a,b)$ være mengden av de uendelig mange ganger deriverbare funksjoner med kompakt bærer. Den minimale operator $T_{n,0}$ indusert av τ_n defineres ved:

$$D(T_{n,0}) = C_0^\infty(a,b) \tag{9.20}$$

$$T_{n,0}f = \tau_n f, \quad f \in D(T_{n,0}) \tag{9.21}$$

Den maksimale operator T_n indusert av τ_n er gitt ved:

$$D(T_n) = W_{2,n}(a,b) \tag{9.22}$$

$$T_n f = \tau_n f, \quad f \in D(T_n) \tag{9.23}$$

$D(T_n)$ er derfor definert ved at $\tau_n f \in L_2(a,b)$ når $f \in D(T_n)$. Noterer at begge operatorer er definert på et tett underrom av $L_2(a,b)$ fordi $C_0^\infty \subset W_{2,n}$ og C_0^∞ er tett i L_2.

En kan vise at ${T_{n,0}}^* = T_n$, slik at for alle $A \subset T_{n,0}$ vil $A^* \supset T_n$ [23, s.160]. Dermed er ikke A^* en differensialoperator indusert av τ_n hvis $\overline{A} \neq \overline{T_{n,0}}$, og det er berettiget å kalle $T_{n,0}$ den minimale operator.

Følgende faktum er viktig:

Lemma 9.5 *T_n er symmetrisk når $(a,b) = \mathbf{R}$.*

Bevis. For $f, g \in D(T_n)$ følger ved bruk av delvis integrasjon samt at $\lim_{x\to\pm\infty} f^{(j)}(x) = 0$ for $j = 0, \ldots, n$ at:

$$\langle f|T_n g\rangle = \lim_{c\to\infty} \int_{-c}^{c} f^*(x)(\tau_n g)(x)dx \tag{9.24}$$

$$= \lim_{c\to\infty} \int_{-c}^{c} (\tau_n f)^*(x) g(x) \tag{9.25}$$

$$= \langle T_n f|g\rangle \tag{9.26}$$

$\boxed{\hbar}$

Påstanden ${T_{n,0}}^* = T_n$ sammen med foregående lemma gir direkte:

Teorem 9.6 $\overline{T_{n,0}} = T_n = {T_n}^*$ *når* $(a,b) = \mathbf{R}$. T_n *er da selvadjungert og* $T_{n,0}$ *essensielt selvadjungert.*

Bevis. Har $T_{n,0} \subset T_n$ slik at $T_n^* \subset {T_{n,0}}^* = T_n$. $T_n \subset T_n^*$, fordi T_n er symmetrisk gir da $T_n = T_n^*$. I tillegg er $\overline{T_{n,0}} = {T_{n,0}}^{**} = T_n^* = T_n$. $\boxed{\hbar}$

Noterer at i tilfellet $(a,b) \neq \mathbf{R}$ er T_n ikke symmetrisk. På den annen side er det klart at $T_{n,0}$ er symmetrisk.

Teorem 9.7 *Tillukningen til* $T_{n,0}$ *for* $(a,b) \neq \mathbf{R}$ *er gitt ved:*

$$D(\overline{T_{n,0}}) = \{f \in W_{2,n} : \tag{9.27}$$
$$f(a) = f'(a) = \ldots = f^{(n-1)}(a) = 0 \text{ hvis } a > -\infty \tag{9.28}$$
$$f(b) = f'(b) = \ldots = f^{(n-1)}(b) = 0 \text{ hvis } b < \infty\} \tag{9.29}$$
$$\tag{9.30}$$
$$= W^0_{2,n}(a,b) \tag{9.31}$$
$$\tag{9.32}$$
$$\overline{T_{n,0}} f = \tau_n f, \quad f \in D(\overline{T_{n,0}}) \tag{9.33}$$

Spesielt er altså $\overline{T_{n,0}} \neq T_n$ *når* $n > 0$ *og* $(a,b) \neq \mathbf{R}$.

Bevis. Av $T_n = {T_{n,0}}^*$ følger $\overline{T_{n,0}} = T_n^*$. Definer S_n som operatoren indusert av τ_n på $D(S_n) = W^0_{2,n}(a,b)$. Det er lett å verifisere at S_n og T_n er formelt adjungerte. Dette gir $S_n \subset T_n^* = \overline{T_{n,0}}$. Da gjenstår det å vise at $D(\overline{T_{n,0}}) \subset D(S_n)$. Anta at $a > -\infty$ og la $f \in D(T_n^*)$. Da finnes en $g_j \in D(T_n)$ slik at $g_j^{(k)}(a) = \delta_{jk}$ for $j,k \in \{0,\ldots,n-1\}$: Ta en $\tilde{g}_j$ som oppfyller $\tilde{g}_j^{(k)}(a) = \delta_{jk}$ og la $g_j = \psi \tilde{g}_j|_{(a,b)}$ hvor $\psi \in C_0^\infty(\mathbf{R})$ oppfyller $\psi(x) = 1$ omkring a og $\psi(x) = 0$ omkring b. Med en slik g_j følger ved delvis integrasjon:

$$0 = \langle f|T_n g_j\rangle - \langle T_n^* f|g_j\rangle = (-i)^n \textstyle\sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{n-k-1} f^{(n-k-1)}(a)^* g_j^{(k)}(a) \tag{9.34}$$
$$= (-i)^n (-1)^{n-j-1} f^{(n-j-1)}(a)^* \tag{9.35}$$

Dette gir da $f(a) = \ldots = f^{(n-1)}(a) = 0$. Tilsvarende følger hvis $b < \infty$. Dermed er $f \in D(S_n)$ og man er framme. $\boxed{\hbar}$

En av de selvadjungerte utvidelsene til $T_{2n,0}$ er gitt ved Friedrichs utvidelsen:

Teorem 9.8 *Operatoren* $T_{2n,0}$ *er ikke-negativ. Friedrichs utvidelsen* $T_{2n,F}$ *er gitt ved:*

$$D(T_{2n,F}) = \{f \in W_{2,2n}(a,b) : \tag{9.36}$$
$$f(a) = f'(a) = \ldots = f^{(n-1)}(a) = 0 \text{ hvis } a > -\infty \tag{9.37}$$
$$f(b) = f'(b) = \ldots = f^{(n-1)}(b) = 0 \text{ hvis } b < \infty\} \tag{9.38}$$
$$= W_{2,2n}(a,b) \cap W^0_{2,n}(a,b) \tag{9.39}$$
$$\tag{9.40}$$
$$T_{2n,F} f = \tau_{2n} f \text{ når } f \in D(T_{2n,F}) \tag{9.41}$$

Bevis. Ikke-negativitet følger direkte av:

$$\langle f|T_{2n,0}\rangle = \langle \tau_n f|\tau_n f\rangle \geq 0 \tag{9.42}$$

Den semibegrensede sesquilineær form fra teorem 7.4 defineres på $D(T_{2n,0})$ ved:

$$s(f,g) = \langle f|T_{2n,0}g\rangle = \left\langle f^{(n)}|g^{(n)}\right\rangle, \quad f,g \in C_0^\infty(a,b) \tag{9.43}$$

Har derfor at $\|\cdot\|_s$ er lik $\|\cdot\|_{T_{n,0}}$ på $D(T_{n,0})$. Kompleteringen av $C_0^\infty(a,b)$ med hensyn til $\|\cdot\|_s$ er derfor lik $\mathcal{H}_s = D(\overline{T_{n,0}})$. Har vist at:

$$D(\overline{T_{n,0}}) = W^0_{2,n}(a,b) \tag{9.44}$$

Dermed er:

$$D(T_{2n,F}) = \mathcal{H}_s \cap D({T_{2n,0}}^*) = W^0_{2,n}(a,b) \cap W_{2,2n}(a,b) \tag{9.45}$$

$\boxed{\hbar}$

Følgende teorem er verdt å merke seg fordi det omfatter en rekke Schrödinger operatorer:

Teorem 9.9 *La T være en selvadjungert operator på $L_2(a,b)$ indusert av τ_n. La videre:*

$$(\sigma f)(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j(x)\frac{d^j f(x)}{dx^j} \tag{9.46}$$

(9.47)

$$ess\sup|a_n| < 1, \quad ess\sup|a_j| < \infty, \ j \in \{0,\dots,n-1\} \tag{9.48}$$

være en differensiell form slik at operatoren S definert ved:

$$D(S) = D(T), \quad Sf = \sigma f \tag{9.49}$$

er symmetrisk. Da er $S+T$ selvadjungert.

Bevis. S er T-begrenset med T-begrensning $\operatorname{ess\,sup}|a_n| < 1$. Da følger påstanden ved teorem 6.16. $\boxed{\hbar}$

Spekteret til en differensialoperator med konstante koeffisienter er kanskje lettest å finne ved å gå veien om Fouriertransformasjonen.

Definerer operatoren F_0 på $C_0^\infty(\mathbf{R})$ ved:

$$D(T_0) = C_0^\infty(\mathbf{R}) \tag{9.50}$$

$$(T_0 f)(k) = \hat{f}(k) = (2\pi)^{-1/2}\int f(x)e^{-ikx}dx \tag{9.51}$$

F_0 er begrenset og tett definert på $L_2(\mathbf{R})$. Den kan derfor utvides til hele $L_2(\mathbf{R})$ og tillukningen er Fouriertransformasjonen $F = \overline{F_0}$.

Teorien for Fouriertransformasjonen utelates her. Noen referanser er [23, 20, 6, s.289-,s.178-,s.90-]. Den siste referansen innfører transformasjonen på de tempererte distribusjoner $S(\mathbf{R}^n)'$. Ved å se på $L_2(\mathbf{R})$ som et underrom til $S(\mathbf{R})'$, så er Fouriertransformasjonen samtidig innført på $L_2(\mathbf{R})$. Her vil jeg nøye meg med å gjenngi noen velkjente resultat uten bevis:

Proposisjon 9.10 *Anta at $f \in L_2(\mathbf{R})$. Innfører notasjonen $D^n = \frac{d^n}{idx^n}$. Da gjelder:*

1. *F er unitær, $F^{-1} = F^*$.*
2. *$F(D^n f)(k) = k^n \hat{f}(k)$, dersom $D^n f$ eksisterer i $L_2(\mathbf{R})$.*

Kan nå definere Sobolev rommet $W_{2,s}$ også for annet enn heltallig s:

$$W_{2,s}(\mathbf{R}) = \Big\{ f \in L_2(\mathbf{R}) : \hat{f}(\cdot)(1 + |\cdot|^2)^{s/2} \in L_2(\mathbf{R}) \Big\} \tag{9.52}$$

Derivasjonsoperatoren skal tolkes i en svak forstand, d.v.s. som for distribusjoner. $D^n f \in L_2(\mathbf{R}), n \le s$ for $f \in W_{2,s}$ er bestemt ved at $\langle D^n f | g \rangle = \langle f | D^n g \rangle$ for alle $g \in C_0^\infty(\mathbf{R})$.

Spekteret til en differensialoperator med konstante koeffisienter er nå lett å finne. La symbolet til differensialoperatoren $P(D)$ være gitt ved $P(x) = \sum_{j=0}^n c_j x^j$. La T være tillukningen til operatoren $P(D)$ på $C_0^\infty(\mathbf{R})$. Da vil $T = F^{-1} M_P F$ hvor M_P er multiplikasjonsoperatoren på $L_2(\mathbf{R})$ indusert av P. Overstående følger direkte ved at:

$$F(P(D)f)(k) = P(k)\hat{f}(k) \tag{9.53}$$

Fordi T og M_P er unitært ekvivalente vil $\sigma(T) = \sigma(M_P) = \overline{\{P(x) : x \in \mathbf{R}\}}$.

Mere om differensialoperatorer finnes f.eks. i [14].

9.3 Noen Schrödingeroperatorer

I det følgende vil Δ stå for den selvadjungerte operator gitt ved:

$$D(\Delta) = W_{2,2}(\mathbf{R}) \tag{9.54}$$

$$\Delta f = f'', \quad f \in D(\Delta) \tag{9.55}$$

$H_0 = -\Delta$ er Hamiltonoperatoren for en fri partikkel i en dimensjon. Fordi H_0 er indusert av differensialoperatoren D^2 er den unitært ekvivalent med operatoren $\hat{H}_0$ indusert ved multiplikasjon med $P(p) = p^2$. Følgelig er spekteret:

$$\sigma(H_0) = \sigma(\hat{H}_0) = \overline{\{p^2 : p \in \mathbf{R}\}} = [0, \infty) \tag{9.56}$$

Mere generelle Schrödinger operatorer er gitt ved:

$$H = H_0 + V \tag{9.57}$$

V skal her tilsvare potensialet partikkelen beveger seg i. V vil i de fleste tilfeller være operatoren indusert ved multiplikasjon med potensialet $V(x)$, $V : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$.[2] Teorem 9.9 gir at H er selvadjungert hvis $V(\cdot)$ er målbar og oppfyller $\operatorname{ess\,sup} |V(\cdot)| < \infty$. Det er mange andre mulige $V(x)$ som også gir en selvadjungert H. I det følgende skal jeg se på operatorer H gitt ved mere formelle $V(x)$. I disse tilfellene vil ikke $V(\cdot)$ alene gi en operator. Symbolene H og H_i vil redefineres ettersom hvilken Schrödinger operator som behandles.

9.3.1 Deltapotensialet

Ønsker å gi mening til operatoren formelt gitt ved [22, 9, s.79,s.75]:

$$H = -\Delta + \alpha\delta(\cdot), \quad \alpha \in \mathbf{R} \tag{9.58}$$

Her er δ Diracs deltafunksjon, d.v.s. en distribusjon.

Formen $\langle f|Hf\rangle = \langle \nabla f|\nabla f\rangle + \alpha\,|f(0)|^2$ er positiv for alle $\alpha \in \mathbf{R}$ hvis $f(0) = 0$. Det er naturlig å definere H som en selvadjungert utvidelse til H_0 definert ved:

$$D(H_0) = \{f \in W_{2,2}(\mathbf{R}) : f(0) = 0\} \tag{9.59}$$
$$H_0 f = -f'', f \in D(H_0) \tag{9.60}$$

H_0 er en symmetrisk semibegrenset operator og må derfor ha selvadjungerte utvidelser.

Velger her først å se på operatoren i impulsrommet, d.v.s. ved $\hat{f} = Ff$ og $\hat{H}_0 = FH_0F^{-1}$. Da finnes:

$$D(\hat{H}_0) = \left\{\hat{f} \in L_2(\mathbf{R}) : \left\|k^2\hat{f}(k)\right\| < \infty,\ \int \hat{f}(k)dk = 0\right\} \tag{9.61}$$
$$(\hat{H}_0\hat{f})(k) = k^2\hat{f}(k) \tag{9.62}$$

Det viktigste punktet fulgte av:

$$0 = f(0) = (2\pi)^{-1/2}\int \hat{f}(k)e^{i0k}dk \tag{9.63}$$

Grafnormen til $\hat{H}_0$ er gitt via:

$$\left\langle \hat{g}|\hat{f}\right\rangle_{\hat{H}_0} = \int \hat{g}^*(k)\hat{f}(k)(1+k^4)dk \tag{9.64}$$

Utstyrt med grafnormen er:

$$D(\hat{H}_0) = \left\{\hat{f} \in L_2(\mathbf{R}) : \left\|\hat{f}\right\|_{\hat{H}_0} < \infty,\ \left\langle \hat{f}|\frac{1}{1+k^4}\right\rangle_{\hat{H}_0} = 0\right\} \tag{9.65}$$

[2]Bruker her samme symbol på funksjonen $V(x)$ og operatoren V.

et Hilbertrom slik at $\hat{H}_0$ er lukket[3] Definerer som før de defekte underrom $\hat{N}_\pm = R(\mp i - \hat{H}_0)^\perp = N(\pm i - \hat{H}_0{}^*)$. $\hat{g} \in \hat{N}_\pm$ er bestemt ved at $\left\langle \hat{g} | (\mp i - \hat{H}_0)\hat{f} \right\rangle = 0 = \left\langle (\pm i - k^2)\hat{g} | \hat{f} \right\rangle$ for alle $\hat{f} \in D(\hat{H}_0)$. Fordi $\int \hat{f}(k)dk = 0$ for alle $\hat{f} \in D(\hat{H}_0)$ må da[4]:

$$\hat{N}_\pm = L\{\hat{e}_\pm\}, \quad \hat{e}_\pm(k) = \tfrac{1}{\pm i - k^2} \tag{9.66}$$

$\hat{H}_0$ har dermed defekte indekser $(1,1)$ og derved en enparameterfamilie med selvadjungerte utvidelser.

Spesifikt er alle unitære operatorer fra $\hat{N}_+$ på $\hat{N}_-$ gitt ved:

$$\hat{U}_\theta : \hat{N}_+ \to \hat{N}_-, \quad \hat{e}_+ \mapsto e^{i\theta}\hat{e}_-, \ \theta \in [0, 2\pi) \tag{9.67}$$

Teorem 7.11 gir da de selvadjungerte utvidelsen $\hat{H}$ til $\hat{H}_0$:

$$D(\hat{H}) = D(\hat{H}_0) \dot{+} \left\{ \hat{g}_+ - \hat{U}_\theta \hat{g}_+ : \hat{g}_+ \in N_+ \right\}, \ \theta \in [0, 2\pi) \tag{9.68}$$

$$\hat{H}(f_0 + c(\hat{e}_+ - e^{i\theta}\hat{e}_-)) = \hat{H}_0 f_0 + ic(\hat{e}_+ + e^{i\theta}\hat{e}_-), \tag{9.69}$$

$$f_0 \in D(\hat{H}_0), \ c \in \mathbf{C} \tag{9.70}$$

Ved overgang til x-representasjonen benyttes:

$$F^{-1}\left(\frac{1}{\pm i - k^2}\right)(x) \quad = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} \tfrac{1}{\pm i - k^2} dk \quad = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{\mp i}} e^{-\sqrt{\mp i}|x|}, \ \mathrm{Re}\sqrt{\mp i} > 0 \tag{9.71}$$

som kan finnes f.eks. via [19, s.172].

I x-rommet har man da:

$$N_\pm = L\{e_\pm\}, \quad e_\pm(x) = e^{-\sqrt{\mp i}|x|} \tag{9.72}$$

Den selvadjungerte utvidelsen er gitt ved [5]:

$$D(H) = \left\{ f_0 + c(e_+ - e^{i\theta}e_-) : c \in \mathbf{C}, \ f_0 \in D(H_0) \right\} \tag{9.73}$$

$$H(f_0 + c(e_+ - e^{i\theta}e_-)) = H_0 f_0 + ic(e_+ + e^{i\theta}e_-) \tag{9.74}$$

Vil så vise at dette er operatoren:

$$D(-\Delta_{\alpha,0}) = \{ f \in W_{2,1}(\mathbf{R}) \cap W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus \{0\}) : \tag{9.75}$$

$$f'(0+) - f'(0-) = \alpha f(0), \ \alpha \in \mathbf{R} \} \tag{9.76}$$

(9.77)

$$-\Delta_{\alpha,0} f = -f'', \ f \in D(-\Delta_{\alpha,0}) \tag{9.78}$$

[3]Dette krever et bevis.Beviset er helt analogt tilfellet $V(\cdot) = \delta'(\cdot)$. Dette tilfellet tas grundigere etter dette.

[4]Dette krever og et bevis som gjennomføres senere.

[5] Dette kan sammenliknes med [9, s.76]. Jeg har valgt et fortegn annerledes. $\theta \to \theta \pm \pi$ gir identiske resultat.

hvor α er gitt via θ.

Anta at $f = f_0 + c(e_+ - e^{i\theta}e_-) \in D(H)$ som gitt i den første likningen. P.g.a. $|x|$ i eksponenten i $e_\pm$, så er f bare en gang deriverbar i origo. Utenfor origo er det ingen problemer, og en har $f \in W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus \{0\})$. Fordi $W_{2,2}(\mathbf{R}) \subset W_{2,1}(\mathbf{R})$ [6, s.121] vil en også ha $f \in W_{2,1}(\mathbf{R})$. Randbetingelsen i $D(-\Delta_{\alpha,0})$ er også oppfylt av f:

$$f'(0+) - f'(0-) = c(e'_+(x) - e^{i\theta}e'_-(x))\Big|_{0-}^{0+} \tag{9.79}$$

$$= -2c(e^{-i\pi/4} - e^{i(\theta+\pi/4)}) \tag{9.80}$$

$$= \alpha\left[f_0(0) + c(e_+(0) - e^{i\theta}e_-(0))\right] \tag{9.81}$$

$$= \alpha f(0) \tag{9.82}$$

$$\tag{9.83}$$

$$\alpha(\theta) = -2\frac{e^{-i\pi/4} - e^{i(\theta+\pi/4)}}{1 - e^{i\theta}} = -2\sin(\pi/4 + \theta/2)/\sin(\theta/2) \tag{9.84}$$

hvor jeg bl.a. benyttet $f_0(0) = 0$ og $\sqrt{\pm i} = e^{\pm i\pi/4}$. Har $\alpha(0+) = -\infty, \alpha(3\pi/4) = 0, \alpha(2\pi-) = \infty$ slik at α varierer i $\mathbf{R}$ når θ varierer i $[0, 2\pi)$.

Altså er $D(H) \subset D(-\Delta_{\alpha,0})$. Fordi $-\Delta_{\alpha,0}$ er symmetrisk følger $-\Delta_{\alpha,0} \subset -\Delta^*_{\alpha,0} \subset H^* = H$. Tilsammen er da $H = -\Delta_{\alpha,0} = -\Delta^*_{\alpha,0}$.

Kan også notere at H_0^* er gitt ved teorem 7.10:

$$D(H_0^*) = D(H_0)\dot{+}N_+\dot{+}N_- \tag{9.85}$$

$$H_0^*(f_0 + g_+ + g_-) = H_0 f_0 + i(g_+ - g_-), \quad f_0 \in D(H_0)\ g_\pm \in N_\pm \tag{9.86}$$

Ved formelen $e'_\pm(x) = -\sqrt{\mp i}\frac{x}{|x|}e_\pm(x)$ for $x \neq 0$ følger $-e''_\pm(x) = \pm i e_\pm(x)$, som er en god kontroll av regningen så langt. Av overstående følger da ved argument som over:

$$D(H_0^*) = W_{2,1}(\mathbf{R}) \cap W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus \{0\}) \tag{9.87}$$

$$H_0^* f = -f'', \quad f \in D(H_0^*) \tag{9.88}$$

For $\alpha = 0$ er det klart at $-\Delta_{0,0} = -\Delta$, d.v.s den frie operatoren. Når $\alpha \neq 0$ kan derfor $-\Delta_{\alpha,0} = -\Delta + \alpha\delta(\cdot)$ oppfattes som en perturbasjon av den frie operatoren. Teorem 8.13 gir nå en skranke på antall egenverdier til $-\Delta_{\alpha,0}$ i $(-\infty, 0)$. Skranken er $m = 1$ fordi operatoren T_0 har defekte indekser $(1, 1)$.

H_0 har en entydig utvidelse gitt ved Friedrichsutvidelsen. En kan vise [22, s.81] at denne er gitt ved Dirichletbetingelsen $f(0) = 0$, d.v.s. det formelle tilfellet $\alpha = \pm\infty$.' Dette er ikke urimelig med tanke på hvordan H_0 ble definert.

Se så på operatoren gitt av:

$$H = -\Delta + V(\cdot) + \alpha\delta(\cdot), \quad V : \mathbf{R} \to \mathbf{R},\ \operatorname{ess\,sup}|V| < \infty \tag{9.89}$$

Det følger nå at H er selvadjungert ved at multiplikasjonsoperatoren V er symmetrisk og begrenset på:

$$D(H) = D(-\Delta_{\alpha,0}) \tag{9.90}$$

Som over følger igjen at antall egenverdier til H i $(a,b) \subset \rho(-\Delta + V)$ er ≤ 1.

Se så på operatoren formelt gitt ved:

$$H = -\Delta + \sum_{j=-n}^{n} \alpha_j \delta(\cdot - y_j), \tag{9.91}$$

(9.92)

$$Y = \{y_j\} \subset \mathbf{R}, \alpha = (\alpha_j) \in \mathbf{R}^{2n+1}, \tag{9.93}$$

(9.94)

$$y_j < y_{j+1} \ \inf_j (y_{j+1} - y_j) = d > 0 \text{ for } j = -n, \ldots, n-1 \tag{9.95}$$

Ved først å ta utgangspunkt i den symmetriske lukkede operator:

$$D(H_0) = \{f \in W_{2,2}(\mathbf{R}) : f(y_j) = 0 \text{ når } y_j \in Y\} \tag{9.96}$$

$$H_0 f = -f'' \tag{9.97}$$

følger at de defekte underrom er gitt ved:

$$N_\pm = L\{e_{\pm,j}\}, \quad e_{\pm,j} = e^{-\sqrt{\mp i}|x-y_j|}, \ \sqrt{\mp i} = e^{\mp i\pi/4} \tag{9.98}$$

H_0 har dermed defekte indekser $(m,m) = (2n+1, 2n+1)$. Da finnes det en m^2 parameterfamilie av isomorfier [6] mellom N_+ og N_- og følgelig en m^2-parameterfamilie av selvadjungerte utvidelser.

Definerer følgende m-parameterfamilie som den rigorøse realiseringen av H:

$$D(-\Delta_{\alpha,Y}) = \{f \in W_{2,1}(\mathbf{R}) \cap W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus Y) : \tag{9.99}$$

$$f'(y_j+) - f'(y_j-) = \alpha_j f(y_j), \ j \in J\} \tag{9.100}$$

(9.101)

$$-\Delta_{\alpha,Y} f = -f'', \ f \in D(-\Delta_{\alpha,Y}) \tag{9.102}$$

Har innført $J = \{-n, \ldots, n\}$ av notasjonshensyn.

Som nevnt over finnes det mange andre selvadjungerte utvidelser av T_0. For disse vil en få randkrav som kopler punkter i Y. Disse ikke-lokale operatorene vil ikke bli studert her.

Et periodisk deltapotensial med periode $a > 0$ er gitt som over med overgangen $Y \to a\mathbf{Z}$ og $\alpha \to (\beta_j) \in \mathbf{R}^\infty$,$\beta_j = \beta \in \mathbf{R}$ for alle $j \in \mathbf{Z}$ [9, s.253].

Ser tilslutt på operatoren:

$$H = -\Delta + V + \sum_{y_j \in Y} \alpha_j \delta(\cdot - y_j) \tag{9.103}$$

[6] Dette gjelder generelt mellom to komplekse vektorrom med dimensjon m.

hvor V er gitt ved et potensial som oppfyller $\operatorname{ess\,sup}|V| < \infty$ eller ved en sum av deltafunksjoner eller en kombinasjon av disse tilfellene[7]. Antar som før at Y inneholder m elementer. Fordi tilfellene $\alpha = 0$ og $\alpha \neq 0$ begge tilsvarer en m-dimensjonal utvidelse av samme lukkede symmetriske operator, så gjelder:

Teorem 9.11 *Anta at $(a, b) \in \rho(-\Delta + V)$ og H gitt som over. Da vil $(a, b) \cap \sigma(H))$ bare inneholde isolerte egenverdier med total multiplisitet $\leq m$ = antall deltaurenheter i perturbasjonen.*

Bevis. En direkte konsekvens av korollar 8.13. $\boxed{\hbar}$

9.3.2 Deltaderivertpotensialet

Vil nå gi mening til operatoren formelt gitt ved:

$$H = -\Delta + \beta\delta'(\cdot) \tag{9.104}$$

"Beregningen" $\langle g|Hg\rangle = \langle \nabla g|\nabla g\rangle - \beta(gg)'(0)$ motiverer en til å lete etter utvidelser til[8]:

$$D(H_0) = \{g \in W_{2,2}(\mathbf{R}) : g'(0) = 0\} \tag{9.105}$$

$$H_0 g = -g'',\ g \in D(H_0) \tag{9.106}$$

H_0 er tett definert i L_2 og symmetrisk.

Definerer operatoren $S = FH_0F^{-1}$ via Fouriertransformasjonen F[9]:

$$D(S) = \left\{ f \in L_2 : (\cdot)^2 f(\cdot) \in L_2,\ \int kf(k)dk = 0 \right\} \tag{9.107}$$

$$Sf = k^2 f, \quad f \in D(S) \tag{9.108}$$

Betingelsen $\int k\hat{g}(k)dk = 0$ fulgte direkte ved $g'(0) = 0$.

Definerer grafnormen ved:

$$\langle f|f\rangle_S = \langle f|f\rangle + \langle Sf|Sf\rangle = \int |f(k)|^2 (1 + k^4)dk \tag{9.109}$$

Da finnes:

$$D(S) = \left\{ f \in L_2 : \|f\|_S < \infty,\ \left\langle f|\frac{k}{1+k^4}\right\rangle_S = 0 \right\} \tag{9.110}$$

[7]Man må ikke forledes til å tro at V gitt ved deltafunksjoner alene gir en operator. Det er i kombinasjon med $-\Delta$ at perturbasjonen blir veldefinert.

[8]Tilfellet $g(0) = 0$ er jo allerede dekket!

[9] Som for δ-funksjonen er første del her modellert etter [22, s.79]. Benytter forkortelsen $L_2 = L_2(\mathbf{R})$ og tilsvarende for andre funksjonsområder.

S er lukket: La (f_j) være en $\|\cdot\|_S$ Cauchyfølge fra $D(S)$. Da er (f_j) og (Sf_j) Cauchyfølger slik at $f_j \to f$ og $Sf_j \to g$ hvor $f, g \in L_2$. Viser så at $k^2 f = g$. Det følger ved $\chi_M k^2 f_j \to \chi_M k^2 f$ og $\chi_M k^2 f_j \to \chi_M g$ for alle kompakte $M \subset \mathbf{R}$. Dette gir da $\|f\|_S < \infty$. $h \mapsto \int kh(k)dk = \left\langle h | \frac{k}{1+k^4} \right\rangle_S^*$ er en kontinuerlig lineærfunksjonal på $D(S)$ i $\|\cdot\|_S$ fordi [10]:

$$\left\| \frac{k}{1+k^4} \right\|_S^2 = \int \frac{k^2}{1+k^4} dk < \infty \tag{9.111}$$

Dette gir $0 = \lim \left\langle f_j | k/(1+k^4) \right\rangle_S = \left\langle f | k/(1+k^4) \right\rangle$. Tilsammen er derfor $f \in D(S)$ og S er lukket.

Vil så finne $\hat{N}_\pm = R(\mp i - S)^\perp$ til S. La $f_\pm \in \hat{N}_\pm$ og $g \in D(S)$. Da gjelder:

$$0 = \langle f_\pm | (\mp i - S) g \rangle = \int f_\pm(k)^* (\mp i - k^2) g(k) dk \tag{9.112}$$

Dette gjelder for alle $g \in D(S)$ slik at $\left\langle g | k/(1+k^4) \right\rangle_S = 0$ gir:

$$\hat{N}_\pm = L\left\{ \hat{e}_\pm \right\}, \hat{e}_\pm(k) = \frac{k}{\pm i - k^2} \tag{9.113}$$

Jeg har nå gjentatt samme påstand som for δ-potensialet. Det er på tide at den bevises[11]:

Lemma 9.12 *Definer mengden:*

$$D = \left\{ f \in L_2 : \int \left| k^2 f(k) \right|^2 dk < \infty, \int f(k) dk = 0 \right\} \tag{9.114}$$

La g være en målbar funksjon. Hvis $\int f(k) g(k) dk = 0$ for alle $f \in D$, så er $g =$ konst. (essensielt). Spesialtilfellet $g \in L_2$ gir da spesielt at D er tett i H.

Bevis. Anta for motsigelse at g ikke er konstant. Da finnes kompakt målbare E_1 og E_2, slik at $g|_{E_1} \le a < b \le g|_{E_2}$ hvor $\mu(E_1) \neq 0 \neq \mu(E_2)$. Se så på $f = \chi_{E_1}/\mu(E_1) - \chi_{E_2}/\mu(E_2)$. Ved konstruksjonen er $f \in D$. På den annen side er:

$$0 = \int fg = \frac{1}{\mu(E_1)} \int_{E_1} g - \frac{1}{\mu(E_2)} \int_{E_2} g \le a - b < 0 \tag{9.115}$$

Dette er en motsigelse. Den siste påstanden følger greit ved at $D^\perp = \{0\}$. Den eneste funksjon i L_2 som er konstant er $g = 0$. $\boxed{\hbar}$

Vil så gå over til x-representasjonen. Ved den inverse Fouriertransformasjonen samt $g'(x) = F^{-1}(ik\hat{g}(k))(x)$ finnes fra inverstransformasjonen i (**??**):

[10] Her ser man hvorfor $\delta^{(j)}$ for $j > 1$ ikke kan benyttes som et potensial. $f^{(j)}(0) = 0$ gir $\int k^j \hat{f}(k) dk = 0$. Argumentet over ville da svikte fordi man ikke ville få en kontinuerlig lineærfunksjonal i S-normen.

[11] Takker Harald Hanche Olsen for dette beviset.

$$N_\pm = R(\mp i - H_0)^\perp = N(\pm i - H_0^*) = L\{e_\pm\} \tag{9.116}$$

(9.117)

$$e_\pm(x) = \frac{1}{-\sqrt{\mp i}}(e^{-\sqrt{\mp i}|x|})' = \frac{x}{|x|}e^{-\sqrt{\mp i}|x|}, \ \mathrm{Re}(\sqrt{\mp i}) > 0 \tag{9.118}$$

Overstående kan sammenliknes med f.eks. [9, s.307]. Så langt har vi altså at T_0 er en lukket symmetrisk operator med defekte indekser $(1,1)$.

De unitære operatorer fra N_+ på N_- er gitt ved $U_\theta e_+ = e^{i\theta}e_-$ for $\theta \in [0, 2\pi)$. H gitt ved:

$$D(H) = D(H_0)\dot{+}\{g_+ - U_\theta g_+ : g_+ \in N_+\} \tag{9.119}$$

$$H(f_0 + c(e_+ - e^{i\theta}e_-)) = H_0 f_0 + ic(e_+ + e_-), \ c \in \mathbf{C} \tag{9.120}$$

er alle selvadjungerte utvidelser til H_0.

Operatoren $-\Xi_{\beta,0}$ gitt ved:

$$D(-\Xi_{\beta,0}) = \{f \in W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus \{0\}) : \tag{9.121}$$

$$f'(0+) - f'(0-) = 0, \ f(0+) - f(0-) = \beta f'(0)\} \tag{9.122}$$

$$-\Xi_{\beta,0} f = -f'', \ f \in D(-\Xi_{\beta,0}) \tag{9.123}$$

er identisk med H ved et passende valg av $\beta(\theta)$.

Det holder å vise at $D(H) \subset D(-\Xi_{\beta,0})$ fordi $-\Xi_{\beta,0}$ er symmetrisk slik at $-\Xi_{\beta,0} \subset -\Xi_{\beta,0}^* \subset H^* = H$.

$D(H) \subset W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus \{0\})$ er klart. Randbetingelsene følger ved $f = f_0 + c(e_+ - e^{i\theta}e_-)$ hvor $f_0 \in D(H_0), c \in \mathbf{R}$:

$$f'(0+) - f'(0-) = c(e'_+(x) - e^{i\theta}e'_-(x))\Big|_{0-}^{0+} = 0 \tag{9.124}$$

(9.125)

$$\beta = \frac{f(0+) - f(0-)}{f'(0)} = 2\frac{1 - e^{i\theta}}{-e^{-i\pi/4} + e^{i(\theta+\pi/4)}} = -2\sin(\theta/2)/\sin(\theta/2 + \pi/4) \tag{9.126}$$

Tilfellet $\beta = \pm\infty$ tilsvarer Neumann betingelsen $f'(0) = 0$ for $f \in D(-\Xi_{\infty,0})$. $\beta = 0$ gir som ventet den frie operatoren.

Den videre diskusjon her kan fortsette på samme måte som for δ-potensialet. Spesielt gjelder de samme kommentarer vedrørende begrensning m på antall egenverdier i $(a, b) \subset \rho(-\Delta + V)$ ved perturbasjon med potensial inneholdende m δ'-potensial.

Del III

Stykkevis konstant potensial i en dimensjon

Innholdet i følgende er motivert fra [13, s.80-105]. Utgangspunktet er studiet av løsninger av Schrödingerlikningen:

$$-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad x, E \in \mathbf{R}, \ \psi \in \mathbf{M} \tag{9.127}$$

for en spesielt enkel klasse av potensial V. Mengden $\mathbf{M}$ er en ikke nærmere definert mengde av funksjoner, dog slik at (**??**) gir mening. Spesielt ser en også på løsninger utenfor $L_2(\mathbf{R})$.

En antar at det finnes disjunkte intervall I_i hvor V oppfører seg pent nok til at (**??**) gir 2 lineært uavhengige løsninger der:

$$\psi(x) = \psi_i(x) = A_i u_i(x) + B_i v_i(x), \quad x \in I_i, \ A_i, B_i \in \mathbf{C} \tag{9.128}$$

I konkrete beregninger her vil $V(x) = 0$ når $x \in I_i$. Potensialet mellom intervall i og $i+1$ gir nå via (**??**) en kopling mellom (A_i, B_i) og (A_{i+1}, B_{i+1}). Denne koplingen representeres ved 2×2 komplekse matriser. Disse viser seg å være et godt utgangspunkt for studiet av Schrödingerlikningen for dette endimensjonale tilfellet.

Kapittel 10

M matrisen

Først ser en på potensial V med kompakt bærer. På tallinjen er dette det samme som at:

$$\exists R < \infty \text{ slik at } \operatorname{supp} V \overset{def}{=} \overline{\{x : V(x) \neq 0\}} \subset \{x : |x| \leq R\} \tag{10.1}$$

Et eksempel på et slikt potensial V er vist på figur 10.1.

Formelt kan gjerne V være en distribusjon[1]. I denne oppgaven vil de fleste konkrete beregninger gjøres for $V \propto \delta$, da dette er en av de analytisk enkleste mulighetene.

En finner nå løsningene (utenfor L_2):

$$\psi = \begin{cases} \psi_- = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} = A^{(r)} \cos Kx + \frac{B^{(r)}}{K} \sin Kx, & x < -R \\ \psi_+ = Fe^{iKx} + Ge^{-iKx} = F^{(r)} \cos Kx + \frac{G^{(r)}}{K} \sin Kx, & x > R \end{cases} \tag{10.2}$$

Her er K innført med definisjon $E = K^2 \in \mathbf{R}$ og valgt entydig ved positivt fortegn,$K \in \mathbf{R}_0^+ \bigcup i\mathbf{R}^+$. Den komplekse løsningen er ikke fullstendig for $E = 0$. Bare den reelle løsningen inneholder to lineært uavhengige løsninger i grensen $K \to 0$, mens koeffisientene holdes konstant.

Potensialet for $|x| \leq R$ gir kopling mellom ψ_+ og ψ_-:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{10.3}$$

Koplingen er lineær fordi Schrödinger likningen er lineær. M representeres naturlig ved en 2×2 kompleks matrise[2]. Matrisen avhenger selvsagt av hvilke lineært uavhengige løsninger en velger som basis i løsningsrommet. De forskjellige mulige M matrisene vil være similært ekvivalente, $M' = UMU^{-1}$.

M matrisen har p.g.a. (**??**) en mengde symetriegenskaper som jeg venter litt med å studere. Først kan vi se på noen eksempler.

10.1 Potensialsteget

Lar potensialet være gitt ved figur 10.2.

[1]Da må (**??**) reformuleres.

[2]Denne metoden for n'te ordens lineær likning vil gi en $n \times n$ kompleks matrise.

Figur 10.1: Et potensial med kompakt bærer.

Figur 10.2: Et meget enkelt stykkevis konstant potensial. De to løsningene lappes sammen ved å kreve at ψ og ψ' er kontinuerlig i origo.

Dette potensialet er et avvik fra tilfellet i (??). Dermed er det en illustrasjon på at det essensielle er at en finner løsninger til (??) til venstre og til høyre for potensialet. Potensialet gir opphav til M matrisen. Her finnes:

$$\psi_- = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}, \qquad x < 0, K = \sqrt{E} \tag{10.4}$$

$$\psi_+ = Ce^{iK_1x} + De^{-iK_1x}, \quad x > 0, K_1 = \sqrt{E - V_0} \tag{10.5}$$

Ved å kreve at $(V - E)\psi$ ikke er proposjonal med $\delta'(x)$ eller $\delta(x)$ finner en at ψ og ψ' må være kontinuerlig i origo. Dette gir M matrisen:

$$A + B = C + D \tag{10.6}$$

$$iK(A - B) = iK_1(C - D) \tag{10.7}$$

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{K_1}{K}, 1 - \frac{K_1}{K} \\ 1 - \frac{K_1}{K}, 1 + \frac{K_1}{K} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \tag{10.8}$$

$$M_s = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{K_1}{K}, 1 - \frac{K_1}{K} \\ 1 - \frac{K_1}{K}, 1 + \frac{K_1}{K} \end{bmatrix} \tag{10.9}$$

M matrisen avhenger derfor av energien E og parametre som gir potensialet (her bare V_0).

10.2 Firkantbarrieren

Ser så på et potensial gitt ved en firkantbarriere, j.m.f. figur 10.3.

Løsningen blir nå:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iKx} + Be^{-iKx} & x < -a \\ Ce^{iK_1x} + De^{-iK_1x} & -a < x < a \\ Fe^{iKx} + Ge^{-iKx} & a < x \end{cases} \tag{10.10}$$

hvor K og K_1 er definert som før. Resultatet for potensialsteget gir nå, via translasjonen $x' = x + a$:

$$\begin{bmatrix} Ae^{-iKa} \\ Be^{iKa} \end{bmatrix} = M_s \begin{bmatrix} Ce^{-iK_1a} \\ De^{iK_1a} \end{bmatrix} \tag{10.11}$$

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + \frac{K_1}{K})e^{i(K-K_1)a}, (1 - \frac{K_1}{K})e^{i(K+K_1)a} \\ (1 - \frac{K_1}{K})e^{-i(K+K_1)a}, (1 + \frac{K_1}{K})e^{-i(K-K_1)a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \tag{10.12}$$

Overstående gir, ved $a \to -a$ og $K \leftrightarrow K_1$:

Figur 10.3: En firkantbarriere. De tre løsningene lappes sammen ved å kreve at ψ og ψ' er kontinuerlig i $\pm a$.

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1+\frac{K}{K_1})e^{i(K-K_1)a}, (1-\frac{K}{K_1})e^{-i(K+K_1)a} \\ (1-\frac{K}{K_1})e^{i(K+K_1)a}, (1+\frac{K}{K_1})e^{-i(K-K_1)a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{10.13}$$

Kombinasjon av de to siste likningene, d.v.s. multiplikasjon av de to matrisene, gir M matrisen for firkantpotensialet:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_f \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{10.14}$$

$$M_f = \begin{bmatrix} (\cos(2K_1a) - i\frac{\epsilon}{2}\sin(2K_1a))e^{2iKa}, -i\frac{\eta}{2}\sin(2K_1a) \\ i\frac{\eta}{2}\sin(2K_1a), (\cos(2K_1a) + i\frac{\epsilon}{2}\sin(2K_1a))e^{-2iKa} \end{bmatrix} \tag{10.15}$$

Overstående likning er i tråd med [13, likning 6.42, s.94] og jeg har benyttet forkortelser:

$$\epsilon = \frac{K_1}{K} + \frac{K}{K_1} \tag{10.16}$$

$$\eta = \frac{K_1}{K} - \frac{K}{K_1} \tag{10.17}$$

Kan kanskje være verdt å understreke at når $E < V_0$, så blir K_1 imaginær. Da kan $\mathcal{K}_1 = -iK_1$ hensiktsmessig innføres.

10.3 Deltapotensialet

La nå potensialet formelt være gitt ved en deltafunksjon med styrke α:

$$V(x) = \alpha\delta(x) \tag{10.18}$$

Schrödingers likning:

$$-\psi'' + \alpha\delta\psi = K^2\psi \tag{10.19}$$

kan man nå forsøke å tolke[3] ved å oppfatte høyre og venstre side som distribusjoner. La ϕ_i være en følge av testfunksjoner som er 1 omkring origo og supp $\phi_i \in (-\epsilon_i, \epsilon_i)$ hvor $\epsilon_i \to 0$. For eksistensen av en slik følge refererer jeg til [6, s.11]. Anvendes høyre og venstre side på ϕ_i finnes i grensen $\epsilon_i \to 0$:

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \alpha\psi(0) \tag{10.20}$$

Sammen med krav om at ψ er kontinuerlig i origo representerer dette en innskrenkning av **M** i forhold til den frie Schrödingerlikningen. Dette kan tas som en definisjon av det formelle uttrykket i (**??**).

M matrisen er nå gitt ved skjøting av de to frie løsningene i origo:

$$A + B = F + G \tag{10.21}$$

$$iK(F-G) - iK(A-B) = \alpha(F+G) \Rightarrow \tag{10.22}$$

$$A - B = F(1 + i\frac{\alpha}{K}) - G(1 - i\frac{\alpha}{K}) \tag{10.23}$$

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_d \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}, \quad M_d = \begin{bmatrix} 1 + i\frac{\alpha}{2K}, i\frac{\alpha}{2K} \\ -i\frac{\alpha}{2K}, 1 - i\frac{\alpha}{2K} \end{bmatrix} \tag{10.24}$$

Deltapotensialet kan og innføres som en grense av firkantpotensialet slik som i det originale arbeidet til Kronig og Penney, [KP]. Grensen tas ved $a \to 0, V_0 \to \infty$, men slik at $\alpha = 2aV_0$ holdes konstant.

10.4 Deltaderivert

Ser til slutt på det formelle uttrykket:

$$-\psi'' + \alpha\delta'\psi = K^2\psi \tag{10.25}$$

Prøver en å tolke denne som for deltapotensialet finnes:

[3] Dette er den vanlige fysikk presentasjonen. Tar denne med selv om operatoren er definert tidligere. Resultatene er sammenfallende.

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\alpha\psi'(0) \tag{10.26}$$

Her må da $\psi'(0) = 0$ for at overstående skal gi mening, men dermed faller α bort! Dermed er (**??**) en for kraftig innskrenkning av **M**. Som diskutert tidligere er en rimelig tolkning av (**??**) den frie Schrödingerlikningen med kravet:

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = 0 \tag{10.27}$$

$$\psi(0^+) - \psi(0^-) = \alpha\psi'(0) \tag{10.28}$$

Noterer at (**??**) er oppfylt hvis Neumannbetingelsen $\psi'(0) = 0$ er oppfylt. Dette tilsvarer tilfellet $\alpha = \pm\infty$. Rimeligheten i (**??**) ligger i at en da får et selvadjungert problem. Mere om dette finnes i [GH].

Skjøting i origo gir M matrisen:

$$A - B = F - G \tag{10.29}$$

$$F + G - (A + B) = \alpha i K(F - G) \Rightarrow \tag{10.30}$$

$$A + B = F(1 - i\alpha K) + G(1 + i\alpha K) \tag{10.31}$$

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_{d'} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}, \quad M_{d'} = \begin{bmatrix} 1 - i\alpha K/2, i\alpha K/2 \\ -i\alpha K/2, 1 + i\alpha K/2 \end{bmatrix} \tag{10.32}$$

Denne M matrisen har noen underlige egenskaper som fortjener kommentarer som jeg utsetter foreløpig. Noterer bare at ved $K \to 1/K$ er den svært lik M matrisen for deltapotensialet. Ved ombytte av M_{11} og M_{22} samt $K \to 1/K$ vil M matrisen for deltaderivert potensialet gå over til M matrisen for deltapotensialet.

Kapittel 11

M matrisens symmetrier, S matrisen

Ta igjen utgangspunkt i det generelle potensialet gitt i figur 10.1 med løsninger (**??**). Det er klart at i stedet for M matrisen definert i (**??**) kan man innføre en S matrise definert ved:

$$\begin{bmatrix} B \\ F \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix} \tag{11.1}$$

Sprednings-matrisen S gir derfor utgående bølgefunksjon ved inngående. En slik matrise kan og defineres for det flerdimensjonale tilfellet, i motsetning til M matrisen. En helt analog S "matrise" spiller en sentral rolle i kvantefeltteori, se f.eks. [13, 15, 16].

11.1 Bevaring av sannsynlighetstrømtetthet

Den fulle tidsavhengige Schrödingerlikningen er:

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\nabla^2\Psi + V\Psi, \quad V \in \mathbf{R} \tag{11.2}$$

Multipliser likningen med Ψ^*, og den komplekskonjugerte av likningen med Ψ. Ved subtraksjon av disse to likningene finnes så:

$$\frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} - i\nabla\left[\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi\right] = 0 \tag{11.3}$$

Dette er en kontinuitetslikning på formen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0 \tag{11.4}$$

Sannsynlighetstettheten $\rho = \Psi\Psi^*$[1] og sannsynlighetstrømtettheten:

[1] (**??**) er et av argumentene for nettopp denne tolkningen av Ψ .

(11.5) $$j = -i\,[\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi]$$

er dermed innført. I mange sammenhenger hjelpes intuisjonen ved å tenke på $\rho(x)$ som partikkeltettheten i posisjon x. I et slikt bilde er det ikke spesielt plagsomt at ρ ikke er integrabel over hele $\mathbf{R}$. Merk at V kompleks ville gi opphav til et kildeledd i (**??**).

For en stasjonær løsning $\Psi(x,t) = e^{-i\omega t}\psi(x)$ må derfor j være uavhengig av posisjonen i det endimensjonale tilfellet. Med løsningen i (**??**) finnes kravet:

(11.6) $$j = 2K(|A|^2 - |B|^2) = 2K(|F|^2 - |G|^2), \quad E > 0$$

(11.7) $$[B^*, F^*]\begin{bmatrix} B \\ F \end{bmatrix} \overset{(\mathbf{??})}{=} [A^*, G^*]S^*S\begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix} = [A^*, G^*]\begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix}$$

(11.8) $$S^*S = I, \quad E > 0$$

Her er S^* den transponerte og komplekskonjugerte til S, d.v.s. den Hermitisk adjungerte. For negative energier finnes tilsvarende:

(11.9) $$j = 2K(B^*A - A^*B) = 2K(G^*F - F^*G), \quad E < 0$$

(11.10) $$[A^*, G^*]\begin{bmatrix} B \\ F \end{bmatrix} = [B^*, F^*]\begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix}$$

(11.11)

(11.12) $$[A^*, G^*]\,S\begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix} = [A^*, G^*]S^*\begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix}$$

(11.13) $$S = S^*, \quad E < 0$$

11.2 Tidsreversjon

Fordi V er reell vil den komplekskonjugerte til løsningen i (**??**) og være en løsning. Denne løsningen kalles den tidsreverserte løsningen da transformasjonen $t' = -t$ i (**??**) gir samme likning som ved komplekskonjugering av (**??**). En har da fra definisjonen av S:

(11.14) $$\begin{bmatrix} A^* \\ G^* \end{bmatrix} = S\begin{bmatrix} B^* \\ F^* \end{bmatrix}, \quad E > 0$$

$$\begin{bmatrix} B^* \\ F^* \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A^* \\ G^* \end{bmatrix}, \quad E < 0 \tag{11.15}$$

Komplekskonjugering av disse likningen og innsetting i (??) gir:

$$\bar{S}S = I, \quad E > 0 \tag{11.16}$$

$$S = \bar{S}, \quad E < 0 \tag{11.17}$$

Kombinert med (??) henholdsvis (??) finner en at S må være symmetrisk. For positive energier er derfor S symmetrisk og unitær:

$$S = \begin{bmatrix} S_{11}, S_{12} \\ S_{12}, S_{22} \end{bmatrix} \tag{11.18}$$

$$I = S^*S = \begin{bmatrix} |S_{11}|^2 + |S_{21}|^2, S_{11}^*S_{12} + S_{21}^*S_{22} \\ S_{12}^*S_{11} + S_{22}^*S_{21}, |S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 \end{bmatrix}, \quad E > 0 \tag{11.19}$$

Ved negative energier blir S symmetrisk og reell.

Koplingen til M matrisen er gitt via (??) og (??):

$$B = S_{11}A + S_{12}G = S_{11}\frac{F - S_{22}G}{S_{21}} + S_{12}G \tag{11.20}$$

(11.21)

$$F = S_{21}A + S_{22}G \Rightarrow A = \frac{F - S_{22}G}{S_{21}} \tag{11.22}$$

$$M = \begin{bmatrix} 1/S_{21}, -S_{22}/S_{21} \\ S_{11}/S_{21}, S_{12} - S_{11}S_{22}/S_{21} \end{bmatrix} \tag{11.23}$$

$$\det(M) = (S_{21}S_{12} - S_{11}S_{22} + S_{22}S_{11})/S_{21}^2 = 1 \tag{11.24}$$

$$M = \begin{bmatrix} M_{11}(K), M_{12}(K) \\ M_{21}(K), M_{22}(K) \end{bmatrix} = \bar{M}, E < 0 \tag{11.25}$$

$$M = \begin{bmatrix} M_{11}(K), M_{12}(K) \\ M_{21}(K), M_{22}(K) \end{bmatrix} \overset{(??)}{=} \begin{bmatrix} \frac{1}{S_{12}}, \frac{S_{11}^*}{S_{12}^*} \\ \frac{S_{11}}{S_{12}}, \frac{1}{S_{12}^*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}, M_{12} \\ M_{12}^*, M_{11}^* \end{bmatrix}, \quad E > 0 \tag{11.26}$$

2×2 matriser med determinant 1 representerer Lie gruppen $SL(2, \mathbf{C})$. Hvis man legger på kravet $M_{11}^* = M_{22}$ og $M_{12}^* = M_{21}$ finnes matrisegruppen $SU(1,1)$.

Definer "metrikken"[2]:

$$g = \begin{bmatrix} 1, 0 \\ 0, -1 \end{bmatrix} \tag{11.27}$$

La $a = [F, G]^T \in \mathbf{C}^2$ være koeffisientene for den komplekse løsningen i (**??**). Ved det komplekse indreproduktet $\langle \cdot, \cdot \rangle$ på $\mathbf{C}^2$ ser man at bevaring av sannsynlighetstrømtetthet er ekvivalent med:

$$\langle a, ga \rangle = |F|^2 - |G|^2 = \langle Ma, gMa \rangle \text{ eller} \tag{11.28}$$

$$g = M^* g M \tag{11.29}$$

Fordi $\det g = -1$ og $\det M^* = (\det M)^*$ gir dette $|\det M| = 1$. Kravet $\det M = 1$ i tillegg til (**??**) er en vanlig definisjon av $SU(1,1)$. Disse matrisene er "unitære" [3, s.12] med hensyn til den Hermitiske (ikke positivt definitte) formen $(\cdot, \cdot) = \langle \cdot, g \cdot \rangle$.

Har dermed vist at $M(E) \in SU(1,1)$ ved positive energier E og $M(E) \in SL(2, \mathbf{R})$ ved negative energier E.

Det er nå nærliggende å spørre seg om alle matriser $M(E)$ eventuelt $S(E)$ som oppfyller betingelsene over representerer et potensial. Finnes det flere betingelser som må være oppfylt? I følge [1, s.40] er det tilstrekkelig å kreve at $S(E)$ er analytisk. Da er et potensial gitt av alle slike analytiske $S(E)$. Å finne potensialet fra en gitt S matrise er det inverse spredningsproblem.

Disse gruppene burde kanskje studeres nærmere? [3] er en interesant kilde i så fall.

11.3 Symmetrisk potensial, invertering av x

Anta nå i tillegg at $V(-x) = V(x)$. Ved transformasjonen $x' = -x$ forblir Schrödingerlikningen uforandret. D.v.s. at $\psi'(x') = \psi(-x)$ også er en løsning. Dette tilsvarer $A \leftrightarrow G$ og $B \leftrightarrow F$ og (**??**) gir:

$$\begin{bmatrix} F \\ B \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} G \\ A \end{bmatrix} \tag{11.30}$$

(11.31)

$$\Updownarrow \tag{11.32}$$

(11.33)

$$\begin{bmatrix} B \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{22}, S_{21} \\ S_{12}, S_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ G \end{bmatrix} \tag{11.34}$$

En har altså funnet:

[2] Denne språkbruken er hentet fra [3]. M matrisene her kan gjerne sammenliknes med de homogene Lorentz transformasjonene. Disse er definert ved at $(Lx)(Lx) = x^2 = {x^0}^2 - {x^1}^2 - {x^2}^2 - {x^3}^2$, d.v.s. at "normen" x^2 er invariant ved Lorentz transformasjoner.

(11.35) $$S_{11} = S_{22}, \quad S_{12} = S_{21}$$

Via elementet $(1, 2)$ i (**??**) gir dette:

(11.36) $$M_{12} = -S_{22}/S_{21} = -S_{11}/S_{21} = -M_{21}$$

M_{12} er derfor rent imaginær hvis potensialet er symmetrisk og energien er positiv.

Kapittel 12

Et sammensatt potensial, P matrisen

Basispotensial med tilhørende M matriser kan brukes som "byggeklosser" for mer kompliserte potensial. Det viktigste av denne typen potensial er de periodiske. Vil nå først se på det mer generelle tilfellet.

La nå V være gitt som i figur 12.1[1].

Ved transformasjonen $x' = x - y_i$ har man løsning til Schrödingers likning på intervallet til venstre og til høyre for $x' = 0$:

$$\psi'(x') = \begin{cases} Ae^{iKx'} + Be^{-iKx'} & x' \in I'_i = I_i - y_i \\ Fe^{iKx'} + Ge^{-iKx'} & x' \in I'_{i+1} = I_{i+1} - y_i \end{cases} \tag{12.1}$$

Hvor pr. antagelse potensialet omkring y_i er spesifisert ved:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_i \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11i}(K), M_{12i}(K) \\ M_{21i}(K), M_{22i}(K) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{12.2}$$

Ved umerkede koordinater:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_i e^{iK(x-y_i)} + B_i e^{-iK(x-y_i)} & x \in I_i \\ A_{i+1} e^{iK(x-y_{i+1})} + B_{i+1} e^{-iK(x-y_{i+1})} & x \in I_{i+1} \end{cases} \tag{12.3}$$

Hvor nå:

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = M_i \begin{bmatrix} A_{i+1} e^{-iKa_i} \\ B_{i+1} e^{iKa_i} \end{bmatrix} \tag{12.4}$$

(12.5)

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11i} e^{-iKa_i}, M_{12i} e^{iKa_i} \\ M_{21i} e^{-iKa_i}, M_{22i} e^{iKa_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix}, \quad a_i = y_{i+1} - y_i \tag{12.6}$$

[1] Definisjonen av a_i og I_i er ikke helt konsistent. Burde kanskje definert I_i til å være et intervall mellom y_i og y_{i+1}. Mitt valg kommer av at koeffisientene A og B refererer til en løsning til venstre for origo.

Figur 12.1: Et potensial sammensatt av flere potensial omkring punktene y_i, gitt ved M_i. Mellom y_{i-1} og y_i finnes et åpent intervall I_i hvor $V = 0$. Gitteravstanden $a_i = y_{i+1} - y_i$ og M_i spesifiserer dermed $V(x)$ fullstendig.

Ved invertering følger nå P matrisen ($\det M_i = 1$):

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} \stackrel{def}{=} P_i \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} \tag{12.7}$$

$$P_i = \begin{bmatrix} M_{22i} e^{iKa_i}, -M_{12i} e^{iKa_i} \\ -M_{21i} e^{-iKa_i}, M_{11i} e^{-iKa_i} \end{bmatrix} \tag{12.8}$$

Noterer at $P_i \in SU(1,1)$ ved positive energier og $P_i \in SL(2, \mathbf{R})$ ved negative energier.

Legg og merke til at P_i er sammensatt av en translajon T_{a_i} og M_i^{-1}, som begge er med i de respektive grupper ved henholdsvis positive og negative energier.

$$P_i = T_{a_i} M_i^{-1} \tag{12.9}$$

$$T_{a_i} = \begin{bmatrix} e^{iKa_i}, 0 \\ 0, e^{-iKa_i} \end{bmatrix}, \quad M_i^{-1} = \begin{bmatrix} M_{22i}, -M_{12i} \\ -M_{21i}, M_{11i} \end{bmatrix} \tag{12.10}$$

T_a kalles her en translasjon fordi $T_a \psi(x) = \psi(x + a)$. Er her litt slurvete og benytter samme symbol for matrisen T_a og translasjonsoperatoren T_a på $\mathbf{M}$. Sistnevnte er her definert via matrisen T_a sin virkning på koeffisientene A, B når ψ er en planbølge.

En presisering av betingelsene er på sin plass. Punktene y_i er gitte punkter med egenskapen:

$$y_{i+1} > y_i, \ \inf_i (y_{i+1} - y_i) = d > 0, \ \ i \in \mathbf{Z} \tag{12.11}$$

Potensialet $V(x)$ kan sammensettes av potensial $V_i(x)$ med egenskapen[2]:

$$\operatorname{supp} V_i \subset (d/2, d/2),\ \forall i \in \mathbf{Z} \tag{12.12}$$

Potensialet er da gitt ved:

$$V(x) = \sum_{j \in \mathbf{Z}} V_j(x - y_j) \tag{12.13}$$

I løsningen i (**??**) er det ofte praktisk å kunne bytte ut y_j med $x_j = y_j - \triangle x_j$. Med løsninger:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_i{}^{(r)} e^{iK(x-x_i)} + B_i{}^{(r)} e^{-iK(x-x_i)} & x \in I_i \\ A_{i+1}{}^{(r)} e^{iK(x-x_{i+1})} + B_{i+1}{}^{(r)} e^{-iK(x-x_{i+1})} & x \in I_{i+1} \end{cases} \tag{12.14}$$

har man koplingen ved:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1}{}^{(r)} \\ B_{i+1}{}^{(r)} \end{bmatrix} = T_{-\triangle x_{i+1}} P_i T_{\triangle x_i} T_{-\triangle x_i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = P_i{}^{(r)} \begin{bmatrix} A_i{}^{(r)} \\ B_i{}^{(r)} \end{bmatrix} \tag{12.15}$$

(12.16)

$$P_i{}^{(r)} = T_{-\triangle x_{i+1}} P_i T_{\triangle x_i} = T_{a_i - \triangle x_{i+1}} M_i^{-1} T_{\triangle x_i} \tag{12.17}$$

Overstående er et godt regneteknisk hjelpemiddel.

12.1 M matrisen for fleratomig basis

Vil nå se på hvordan M matrisen tilsvarende en fleratomig basis (fig. 12.2) kan dannes. Dette er viktig bl.a. for vurdering av Saxon-Hütner konjekturen [SH]. Velger lengdeenhet slik at $\operatorname{supp} V \in (-1/2, 1/2]$.

Ved å notere $T_a^{-1} = T_{-a}$ og $T_{a+b} = T_a T_b$ finnes direkte:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = T_{-z_1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = T_{-z_1} M_1 T_{-a_1} \cdots M_n T_{-a_n} T_{z_{n+1}} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{12.18}$$

$$M = T_{-z_1} M_1 T_{-a_1} \cdots M_{n-1} T_{-a_{n-1}} M_n T_{z_n}, \quad z_{i+1} = z_i + a_i \tag{12.19}$$

For et periodisk gitter bygget opp av et slikt sammensatt potensial finnes P matrisen:

$$P = T_1 M^{-1} = T_1 \cdot T_{-z_n} M_n^{-1} T_{a_{n-1}} M_{n-1}^{-1} \cdots T_{a_1} M_1^{-1} T_{z_1} \tag{12.20}$$

Spesielt er man interessert i (neste avsnitt !):

[2] Eller et annet krav som sørger for at potensialene ikke overlapper ved den etterfølgende superposisjon.

Figur 12.2: Et potensial sammensatt av flere potensial omkring punktene z_i, $i = 1, \dots n$. Antar $z_{i+1} = z_i + a_i > z_i$, $z_i \in (-1/2, 1/2]$ og at det finnes et intervall mellom z_{i-1} og z_i hvor $V(x) = 0$. Definerer hensiktsmessig $a_n = 1 - (y_n - y_1)$ slik at $\sum_{i=1}^{n} a_i = 1$.

$$Tr(P) = Tr(P_n \cdots P_1), \quad P_i = P_i(a_i) = T_{a_i} M_i^{-1}, \quad a_n = 1 - z_n + z_1 \tag{12.21}$$

Benyttet identiteten $Tr(AB) = Tr(BA)$ for å få inn P_n i likningen. Med potensialet lengst til venstre som origo, $z_1 = 0$,finnes $P = P_n \cdots P_1$ direkte.

Definer en gitterbasis ved $Y = \{z_i\}$ hvor $0 \leq z_1 < z_2 \dots z_{n-1} < z_n < 1$ og $\inf(d_j) = d > 0$. Her er $d_j = z_{j+1} - z_j$ for $j = 1, \dots, n-1$ og $d_n = y_1 + (1 - y_n)$. Et gitter med periode 1 er da definert ved $\mathbf{Z} + Y$. Anta videre at det er gitt n potensial V_i med tilhørende M-matriser som oppfyller $\operatorname{supp} V_i \in (-d/2, d/2)$. La F være mengden av funksjoner $f : \{1, \dots, n\} \to \{1, \dots, n\}$. Definer Hamiltonoperatoren for et blandet periodisk krystall ved:

$$H_{f(1),\dots,f(n)} = -\Delta + \sum_{j=1}^{n} \sum_{l \in \mathbf{Z}} V_{f(i)}(\cdot - (l + z_j)) \tag{12.22}$$

Saxon-Hutner konjekturen sier da[3]:

$$\rho(H_{f(1),\dots,f(n)}) \supset \cap_{j=1}^{n} \rho(H_{j,\dots,j}), \; \forall f \in F \tag{12.23}$$

Overstående er klart ekvivalent med tilfellet hvor F bare består av identitetsavbildningen, $f(j) = j$.

Det vil vise seg at et gap er gitt ved $|Tr(P)| > 2$. Saxon-Hutner ville innebære at $|Tr(P_n(a_n) \cdots P_1(a_1))| > 2$, hvis $|Tr(P_j(a_n) \cdots P_j(a_1))| > 2$ for alle $j = 1, \dots, n$. Dette er riktig hvis alle M matrisene kommer fra deltapotensial og alle punktene i gitteret er likt

[3] $\rho(T)$ er resolventmengden til en operator. Dette er nesten den mest generelle formulering av konjekturen. Den mest generelle varianten finnes ved å kutte ut periodisiteten.

separert [9, teorem 2.3.5], men er galt generelt [Ke][SS]Et naturlig spørsmål å stille er: Hva må M matrisene oppfylle i tillegg for at overstående skal gjelde? Det er fristende å anta at for en passende (stor ?) undergruppe (?) av $SU(1,1)$, så vil Saxon-Hutner konjekturen holde. Konjekturen er interessant! (Så interessant at jeg har laget et Matlab program for å kontrollere den.)

12.2 Det periodiske gitter

Ser på spesialtilfellet $a_i = a$ og $M_i = M$ i figur 12.1. Velger å måle lengde i enheter av a, d.v.s. $a = 1$. P matrisen som gir gitteret er:

$$P = T_1 M^{-1} = \begin{bmatrix} M_{22}e^{iK}, -M_{12}e^{iK} \\ -M_{21}e^{-iK}, M_{11}e^{-iK} \end{bmatrix} \tag{12.24}$$

For beregning av $P^n[A,B]^T$ er det praktisk å finne egenverdier og egenvektorer til P:

$$P \begin{bmatrix} \zeta^{\pm} \\ \eta^{\pm} \end{bmatrix} = p^{\pm} \begin{bmatrix} \zeta^{\pm} \\ \eta^{\pm} \end{bmatrix} \tag{12.25}$$

$$p^{\pm} = TrP/2 \pm i\sqrt{1-(TrP/2)^2} = p^{\pm 1} \stackrel{def}{=} e^{\pm ik}, \quad -\pi < \mathrm{Re}(k) \leq \pi \tag{12.26}$$

$$TrP/2 = (M_{22}e^{iK} + M_{11}e^{-iK})/2 \tag{12.27}$$

$$= \begin{cases} \mathrm{Re}(M_{11})\cos(K) + \mathrm{Im}(M_{11})\sin(K), & E > 0 \\ M_{22}e^{-\frac{K}{i}} + M_{11}e^{\frac{K}{i}}, & E < 0 \end{cases} \tag{12.28}$$

$$r_{\pm} = \frac{\eta^{\pm}}{\zeta^{\pm}} = \frac{p^{\pm 1} - P_{11}}{P_{12}} = \frac{P_{21}}{p^{\pm 1} - P_{22}} \tag{12.29}$$

$$= \frac{M_{22} - p^{\pm 1}e^{-iK}}{M_{12}} = \frac{M_{21}}{M_{11} - p^{\pm 1}e^{iK}} \tag{12.30}$$

Noterer at for $TrP/2 > 1$ vil $p > 1$ og for $TrP/2 < -1$ vil $-1 < p < 0$. Overnevnte følger ved å se på funksjonen $p(x) = x + \sqrt{x^2-1}$ for $x > 1$ og $x < -1$. Sistnevnte tilfelle finnes av førstnevnte ved $p(-x) = -p(x)^{-1}$.

Har her definert gitterimpulsen k som spiller samme rolle i det periodiske tilfellet som K i det frie tilfellet. Det er en mulig tvetydighet i definisjonen av k: En kan legge til heltallig multiplum av 2π til k uten at p forandres.[4] Velger k entydig ved at den skal ligge i første Brillouinsone;$-\pi < \mathrm{Re}(k) \leq \pi$. Spesielt vil $k = i\,\mathrm{Im}(k), \mathrm{Im}(k) < 0$ når $Tr(P)/2 > 1, p > 1$ og $k = \pi + i\,\mathrm{Im}(k), \mathrm{Im}(k) > 0$ når $Tr(P)/2 < -1, p \in (-1, 0)$. Når $|Tr(P)/2| \leq 1, |p| = 1$,vil k være reell.

En omskrivning av (**??**) er verdt å nevne:

[4] I [9, s.292] defineres k ut i fra $\cos(k) = Tr(P)/2$. Entydighet oppnås der ved kravet $\mathrm{Im}(k) \geq 0$

$$Tr(P)/2 = |M_{11}|\,(e^{i(K-\phi_t)} + e^{-i(K-\phi_t)}) = \frac{\cos(K-\phi_t)}{|t|}, \quad E>0 \tag{12.31}$$

Størrelsen $t = 1/M_{11} = |t|\,e^{-i\phi_t}$ kalles transmisjonskoeffisienten (for byggeklossen i det periodiske potensialet) og vil bli drøftet senere. Da vil det framgå at $|t| \leq 1$ og at den normalt varierer fra 0 til 1 når energien går fra 0 til ∞. Samtidig vil $\phi_t \to 0$ når $E \to \infty$.

Tilfellet $p_\pm = TrP/2 = 1$ fortjener spesiell oppmerksomhet da en får sammenfallende egenvektorer i dette tilfellet. Da jeg er mest interessert i spekteret (som er en lukket mengde) vil jeg se bort fra dette tilfellet. Da finnes to lineært uavhengige løsninger til Schrödingerlikningen. Schrödingerlikningen har da generell løsning:

$$\psi(x) = A\psi^+(x) + B\psi^-(x), \quad A, B \in \mathbf{C} \tag{12.32}$$

$$\psi^+(x) = e^{ikn}\left[\zeta^+ e^{iK(x-y_n)} + \eta^+ e^{-iK(x-y_n)}\right], \quad x \in I_n \tag{12.33}$$

$$\psi^-(x) = e^{-ikn}\left[\zeta^- e^{iK(x-y_n)} + \eta^- e^{-iK(x-y_n)}\right], \quad x \in I_n \tag{12.34}$$

Dette er Blochløsningene fordi:

$$\psi^+(x) = e^{ikx}u_k(x) \tag{12.35}$$

$$u_k(x) = e^{ik(n-x)}\left[\zeta^+ e^{iK(x-y_n)} + \eta^+ e^{-iK(x-y_n)}\right], \quad x \in I_n \tag{12.36}$$

$$\psi^-(x) = e^{-ikx}u_{-k}(x) \tag{12.37}$$

$$u_{-k}(x) = e^{-ik(n-x)}\left[\zeta^- e^{iK(x-y_n)} + \eta^- e^{-iK(x-y_n)}\right], \quad x \in I_n \tag{12.38}$$

hvor $u_k(x+1) = u_k(x)$. Det siste fordi $x \in I_n \Rightarrow x+1 \in I_{n+1}$ og $y_{n+1} = y_n + 1$. For å få overensstemmelse mellom u_k og u_{-k} velges egenvektorene slik at $\zeta^+(-k) = \zeta^-(k)$. Da følger også $\eta^+(-k) = \eta^-(k)$ av $r_+(p^{-1}) = r_-(p)$.

Fordi $(\psi^-)^*$ og $(\psi^+)^*$ også må være løsninger da V er reell kan man slutte:

$$(\psi^-)^* \propto \psi^+, \quad k \in \mathbf{R} \tag{12.39}$$

$$(\eta^-/\zeta^-)^* = \zeta^+/\eta^+ \text{ hvis } k, K \in \mathbf{R} \tag{12.40}$$

$$(\zeta^-/\eta^-)^* = \zeta^+/\eta^+ \text{ hvis } k, iK \in \mathbf{R} \tag{12.41}$$

$$(\psi^\pm)^* \propto \psi^\pm, \quad \mathrm{Im}(k) \neq 0, \mathrm{Re}(k) \in \{0, \pi\} \tag{12.42}$$

$$(\zeta^{\pm}/\eta^{\pm})^* = \eta^{\pm}/\zeta^{\pm} \text{ hvis } K \in \mathbf{R}, \quad \mathrm{Im}(k) \neq 0 \tag{12.43}$$

$$(\zeta^{\pm}/\eta^{\pm})^* = \zeta^{\pm}/\eta^{\pm} \text{ hvis } iK \in \mathbf{R}, \quad \mathrm{Im}(k) \neq 0 \tag{12.44}$$

Overnevnte følger også direkte fra P matrisen.

Hvis man krever at løsningene skal være begrenset for $x = \pm\infty$, så må $k \in \mathbf{R}$. Dette gir kravet $|TrP/2| \leq 1$, som jeg vil referere til som Kronig-Penney relasjonen [KP]. En løsning som vokser eksponensielt kan vanskelig tolkes fysisk. Hvis man insisterer, så må det tilsvare en tilstand hvor sannsynligheten for å finne elektronet utenfor et vilkårlig begrenset intervall er ubegrenset stor. Dermed er sannsynligheten for å finne elektronet innenfor intervallet en ser på relativt sett lik 0. Mere presist: Det finnes alltid et like stort intervall lenger ute (i den retningen ψ vokser) med vilkårlig mye større relativ sannsynlighet for å finne elektronet. I en slik tilstand vil altså gitteret støte elektronet fra seg. Hvis det ikke er andre krefter tilstede ,vil dermed ikke elektronet befinne seg i (det uendelige) krystallet ved slike energier. Hvis krystallet har en overflate , kan slike tilstander gi opphav til overflatetilstander. Dette avhenger da av randkravene ved overflaten(e) [Ta, SP].

Når $|TrP/2| > 1$ sier en at K verdien eller energien er forbudt. Dette gir opphav til energigapene i det ellers kontinuerlige spekteret. Jeg definerer de <u>like</u> energigapene ved at $TrP/2 > 1$ og de odde energigap ved at $TrP/2 < -1$.

Med $|TrP/2| \leq 1$ finnes begrensede Bloch-bølgefunksjoner som tilsvarer tillatte energier.

Legger merke til at i gapene ($e^{ik} \in \mathbf{R}$) gjelder:

$$r_{\pm}^* = 1/r_{\pm}, \quad |r_{\pm}| = 1, \quad E > 0 \text{ i et gap} \tag{12.45}$$

$$r_{\pm}^* = r_{\pm}, \quad r_{\pm} \in \mathbf{R}, \quad E < 0 \text{ i et gap} \tag{12.46}$$

De matematiske argumenter for at Kronig-Penney relasjonen bestemmer spekteret til den tilhørende Schrödingeroperator på $L_2(\mathbf{R})$ er noe mer subtile. En matematisk behandling av dette[5] finnes i f.eks. [17, s.279-].

[5]Den indikerer og at spekteret er fullstendig gitt ved å se på Blochløsningene.

Kapittel 13

Overgang til reelle løsninger

Drøftingen så langt har vært med utgangspunkt i eksponensialfunksjonene som de to lineært uavhengige løsningene. Det er mange andre muligheter. Blochløsningene er et eksempel. Vil nå se på den andre muligheten som er gitt i (??):

$$\psi = \begin{cases} \psi_- = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} = A^{(r)} \cos Kx + \frac{B^{(r)}}{K} \sin Kx, & x < -R \\ \\ \psi_+ = Fe^{iKx} + Ge^{-iKx} = F^{(r)} \cos Kx + \frac{G^{(r)}}{K} \sin Kx, & x > R \end{cases} \tag{13.1}$$

Sammenhengen er gitt ved en lineær transformasjon:

$$A = \frac{1}{2}(A^{(r)} - \frac{i}{K}B^{(r)}) \tag{13.2}$$

$$\tag{13.3}$$

$$B = \frac{1}{2}(A^{(r)} + \frac{i}{K}B^{(r)}) \tag{13.4}$$

Og tilsvarende:

$$\left[\begin{array}{c} F \\ G \end{array} \right] = U \left[\begin{array}{c} F^{(r)} \\ G^{(r)} \end{array} \right], U = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{c} 1, -\frac{i}{K} \\ 1, \frac{i}{K} \end{array} \right], U^{-1} = \left[\begin{array}{c} 1, 1 \\ iK, -iK \end{array} \right] \tag{13.5}$$

$M^{(r)}$ matrisen finnes ved:

$$\left[\begin{array}{c} A^{(r)} \\ B^{(r)} \end{array} \right] = U^{-1} \left[\begin{array}{c} A \\ B \end{array} \right] = U^{-1}MU \left[\begin{array}{c} F^{(r)} \\ G^{(r)} \end{array} \right] = M^{(r)} \left[\begin{array}{c} F^{(r)} \\ G^{(r)} \end{array} \right] \tag{13.6}$$

$$M^{(r)} = \left[\begin{array}{c} M_{11}^{(r)}, M_{12}^{(r)} \\ M_{21}^{(r)}, M_{22}^{(r)} \end{array} \right] = U^{-1}MU \tag{13.7}$$

$$\tag{13.8}$$

$$= \frac{1}{2} \left[\begin{array}{c} M_{11} + M_{12} + M_{21} + M_{22}, (M_{11} - M_{12} + M_{21} - M_{22})/(iK) \\ iK(M_{11} + M_{12} - M_{21} - M_{22}), M_{11} - M_{12} - M_{21} + M_{22} \end{array} \right] \tag{13.9}$$

Spesielt for positive energier finnes forenklingen:

$$M^{(r)} = \tag{13.10}$$

(13.11)

$$\left[\begin{array}{c} \mathrm{Re}(M_{11}) + \mathrm{Re}(M_{12}), (\mathrm{Im}(M_{11}) - \mathrm{Im}(M_{12}))/K \\ -K(\mathrm{Im}(M_{11}) + \mathrm{Im}(M_{12})), \mathrm{Re}(M_{11}) - \mathrm{Re}(M_{12}) \end{array}\right], E > 0 \tag{13.12}$$

$$M = \tag{13.13}$$

(13.14)

$$\frac{1}{2}\left[\begin{array}{cc} M_{11}^{(r)} + iKM_{12}^{(r)} + M_{21}^{(r)}/(iK) + M_{22}^{(r)}, & M_{11}^{(r)} + iKM_{12}^{(r)} - M_{21}^{(r)}/(iK) - M_{22}^{(r)} \\ M_{11}^{(r)} - iKM_{12}^{(r)} + M_{21}^{(r)}/(iK) - M_{22}^{(r)}, & M_{11}^{(r)} - iKM_{12}^{(r)} - M_{21}^{(r)}/(iK) + M_{22}^{(r)} \end{array}\right] \tag{13.15}$$

Alle matriser som er funnet i den komplekse representasjonen kan finnes tilsvarende for den reelle representasjonen ved samme similaritetstransformasjon. Noterer egenskapen:

$$\det(M^{(r)}) = \det(U^{-1}MU) = \det(U^{-1})\det(M)\det(U) = \det(M) = 1 \tag{13.16}$$

I den reelle representasjonen er altså M matrisene med i $SL(2, \mathbf{R})$ for alle energier.

Translasjonsoperatoren:

$$T_a^{(r)} = U^{-1}T_aU = \left[\begin{array}{c} \cos(Ka), \sin(Ka)/K \\ -K\sin(Ka), \cos(Ka) \end{array}\right] \tag{13.17}$$

kunne og vært funnet ved $x \to x + a$ i $\psi(x)$.

For det periodiske gitteret finnes:

$$P^{(r)} = T_1^{(r)} M^{(r)-1} = \left[\begin{array}{c} \cos(K), \sin(K)/K \\ -K\sin(K), \cos(K) \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} M_{22}^{(r)}, -M_{12}^{(r)} \\ -M_{21}^{(r)}, M_{11}^{(r)} \end{array}\right] = \tag{13.18}$$

(13.19)

$$\left[\begin{array}{c} M_{22}^{(r)}\cos(K) - M_{21}^{(r)}\sin(K)/K, -M_{12}^{(r)}\cos(K) + M_{11}^{(r)}\sin(K)/K \\ -M_{21}^{(r)}\cos(K) - M_{22}^{(r)}K\sin(K), M_{11}^{(r)}\cos(K) + M_{12}^{(r)}K\sin(K) \end{array}\right] \tag{13.20}$$

$$TrP^{(r)} = Tr(U^{-1}T_1U \cdot U^{-1}M^{-1}U) = \tag{13.21}$$

$$TrP = (M_{22}^{(r)} + M_{11}^{(r)})\cos(K) + (M_{12}^{(r)}K - M_{21}^{(r)}/K)\sin(K) \tag{13.22}$$

I siste likning ble $Tr(AB) = Tr(BA)$ benyttet.

Som før er gitterimpulsen k gitt ved egenverdiene $p^{(r)^{\pm 1}}$ til $P^{(r)}$:

$$p^{(r)} = TrP^{(r)}/2 + i\sqrt{1 - (TrP^{(r)}/2)^2} = p = e^{ik} \tag{13.23}$$

men nå er forholdet mellom egenvektorene gitt ved:

$$r^{(r)}{}_{\pm} = \frac{\eta^{(r)\pm}}{\zeta^{(r)\pm}} = \frac{p^{\pm} - M_{22}^{(r)}\cos(K) + M_{21}^{(r)}\sin(K)/K}{-M_{12}^{(r)}\cos(K) + M_{11}^{(r)}\sin(K)/K} \tag{13.24}$$

(13.25)

$$= \frac{-M_{22}^{(r)}K\sin(K) - M_{21}^{(r)}\cos(K)}{p^{\pm} - M_{12}^{(r)}K\sin(K) + M_{11}^{(r)}\cos(K)} \tag{13.26}$$

En sympatisk egenskap her er at $r^{(r)}{}_{\pm}$ er reell for energier tilsvarende gapene.
De to løsningene til Schrödingers likning er:

$$\psi^{\pm}(x) = p^{\pm n}\left[\zeta^{(r)\pm}\cos K(x-y_n) + \frac{\eta^{(r)\pm}}{K}\sin K(x-y_n)\right], \quad x \in I_n \tag{13.27}$$

Spesielt hvis $y_n \in I_n$[1]:

$$\psi^{\pm}(y_n) = p^{\pm n}\zeta^{\pm(r)}, \quad \psi^{\pm\prime}(y_n) = p^{\pm n}\eta^{\pm(r)}, r_{\pm} = \tfrac{\psi^{\pm\prime}(y_n)}{\psi^{\pm}(y_n)} \tag{13.28}$$

Overstående likning er en av årsakene til at en urenhet med vekselvirkning konsentrert i et punkt er spesielt enkel å drøfte.

[1]Intervallet I_n kan for spesielle potensial strekke seg forbi y_n. Uansett potensial kan en gå over til løsninger med y_n byttet ut med en $x_n = y_n - \triangle x \in I_n$ ved similaritetstransformasjonen $T_{-\triangle x}PT_{\triangle x}$.

Kapittel 14

Urenheter

Vil i det følgende se på eksakte[1] løsninger av egenverdiproblemet:

$$(H_0 + V(x))\psi(x) = E\psi(x), \quad \psi \in \mathbf{M} \tag{14.1}$$

hvor pertubasjonen $V(x)$ representerer en urenhet i forhold til potensialet $V_0(x)$ inneholdt i $H_0 = -\Delta + V_0$. Spesielt vil jeg her begrense meg til V_0 periodisk og mest spesielt $V_0 = 0$. Tilfellet $V_0 = 0$ er det enkleste og kan benyttes til kontroll mot tilfellet $V_0 \neq 0$ periodisk.

Vil finne fysisk akseptable løsninger ψ. Innskrenkningen av $\mathbf{M}$ som dette innebærer er kravet $|\psi(\pm\infty)| < \infty$.

Begrenser mulige urenheter ved at de skal ha kompakt bærer. Det skal finnes en M-matrise for V.

14.1 Urenhet i vakuum

Med en urenhet i vakuum menes her at $V_0 = 0$, d.v.s. at den frie kinetiske energi operatoren er utgangspunktet. Det totale potensialet er da som i 10.1 og mulige bølgefunksjoner er gitt som i (**??**).

14.1.1 Lokaliserte tilstander

For $E < 0, K/i = \mathcal{K} > 0$ må en ha en eksponensielt avtagende løsning på begge sider av potensialet. D.v.s. $A = 0, G = 0$ fordi f.eks. $G \neq 0$ ville gi eksponensielt voksende løsning fra origo i positiv retning. En mulig løsning må ha formen:

$$\psi = \begin{cases} Be^{\mathcal{K}x}, & x < -R \\ Fe^{-\mathcal{K}x}, & x > R \end{cases} \tag{14.2}$$

Dette gir et krav på E via M matrisen:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} F \\ 0 \end{bmatrix} \tag{14.3}$$

[1]Perturbative løsninger for urenhet λV hvor λ er en litenhetsfaktor er ikke mindre interessante [11]. I de fleste (alle ?) reelle fysiske problemer er tilnærmete metoder det eneste man har å ty til.

For å finne $F \neq 0$ må:

$$M_{11}(\mathcal{K}) = 0 \tag{14.4}$$

Og da finnes $B \neq 0$ ($\det M = 1$) ved:

$$B = M_{21}(\mathcal{K})F \tag{14.5}$$

Mulige egenverdier $E = -\mathcal{K}^2 < 0$ er derfor fullstendig fastlagt av nullpunktene til $M_{11}(\mathcal{K})$ som i dette energi intervallet er en reell funksjon.

F velges vanligvis slik at bølgefunksjonen er normert til 1.

14.1.2 Frie tilstander

For $E > 0$ vil ikke lenger løsningene være i L_2. Disse spredningstilstandene er ikke uvesentlige av den grunn. De kan brukes som en generalisert basis for en vilkårlig tidsavhengig (bølgepakke) løsning som beskrevet i tidligere kapittel. I dette tilfellet blir denne superposisjonen svært lik Fouriertransformasjonen. Løsningene $\exp(\pm iKx)$ er begrenset for $x \to \pm\infty$.

Ser på tilfellet med en innkommende planbølge e^{iKx} fra venstre[2]. Noe vil bli reflektert tilbake som re^{-iKx} og noe vil bli transmitert gjennom potensialet som te^{iKx}. Ser altså på løsningen:

$$\psi_l(x) = \begin{cases} e^{iKx} + re^{-iKx}, & x < -R \\ te^{iKx}, & x > R \end{cases} \tag{14.6}$$

Her vil en ha:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \tag{14.7}$$

Transmisjonskoeffisienten t vil være gitt ved:

$$t = 1/M_{11}(K) = S_{12}(K) \tag{14.8}$$

Og refleksjonskoeffisienten r:

$$r = M_{21}t = M_{21}/M_{11} = S_{11}(K) \tag{14.9}$$

Det er vanlig å definere transmisjonssannsynligheten $T = tt^*$ og transmisjonsfaseskiftet $\phi_t, t = \sqrt{T}e^{-i\phi_t}$. Tilsvarende defineres refleksjonssannsynligheten $R = rr^*$ og refleksjonsfaseskiftet $\phi_r, r = \sqrt{R}e^{-i\phi_r}$.

[2]Dette ville tilsvare en impulsfordeling $\propto \delta(k-K)$ som ikke er fysisk oppnåelig. Byttes $\delta(\cdot)$ ut med en $\delta_n(\cdot) \in L_2(\mathbf{R})$ for n tilstrekkelig stor, hvor $\delta_n(\cdot)$ er en deltafølge, finnes en bølgepakkeløsning som er akseptabel (i $L_2(\mathbf{R})$).

Noterer at bevaring av sannsynlighetsstrømtetthet gir $T + R = 1$ ved $E > 0$, j.m.f. (**??**). Her vil derfor $T, R \in [0, 1]$. For "rimelige" fysiske potensial vil $T \to 1$ ved $E \to \infty$, som følger direkte ved at da vil E "dominere" over V i Schrödingerlikningen. Et moteksempel her er δ'-potensialet. Der vil $T \to 0$ når $E \to \infty$.

Den flerdimensjonale generaliseringen av R og T er gitt ved spredningstverrsnittet som gir sannsynligheten for spredning av en innkommende partikkel i en gitt retning. Dette kan måles ved eksperimenter og benyttes til å fastslå potensialet. En har da et inverst spredningsproblem.

Det viser seg forøvrig at $T = \frac{1}{|M_{11}|^2} = |S_{12}|^2$ for spesielle potensial vil ha skarpe maksimum for visse energier. Disse energiene kalles resonanser. Denne formuleringen er klart for vag til å kunne tas som en definisjon.

I denne sammenhengen er følgende definisjon av en resonansenergi E_c tilstrekkelig:[3]

$$E_c = E - iE_i \in \mathbf{C} \text{ slik at } M_{11}(E_c) = 0,\ \mathrm{Im}(E_c) = -E_i < 0 \tag{14.10}$$

Det er klart at $E_c = E - iE_i$ må ha en imaginærdel forskjellig fra null for at overstående skal være oppfylt da $T \leq 1$ når E_c er reell.

En tolkning av E_c er: Anta at ved $t = 0$, så er partikkelen "lokalisert" i potensialet. Da er E er energien og $\tau \propto E_i^{-1}$ den inverse levetid til en kvasibundet tilstand hvor partikkelen er fanget i potensialet. Hvis E_i er en liten størrelse vil tilstanden i praksis registreres som en bundet tilstand da levetiden blir stor. Legger da spesielt merke til at $\mathrm{Re}(E_c) = E$ rimeligvis vil ligge nær et maksimalpunkt til T som funksjon av den reelle energien.

Tolkningen rimeliggjøres ved å se på en tilstand uten innkommende bølger, $A = G = 0$, som gir kravet $M_{11} = 0$. Fasen for en tidsavhengig løsning er $\pm iK_c x - iE_c t$ slik at den inneholder $-E_i t$, d.v.s. amplituden avtar eksponensielt med tiden [13, s.108-,s.133] når $E_i > 0$.

Ved plott av T som funksjon av E vil halverdibredden til et resonansmaksimum være proposjonal med E_i. En bundet tilstand vil tilsvare en singularitet i $T(E)$, d.v.s. null "halverdibredde".

Den matematisk korrekte behandlingen av slike spredningsprosesser og spesielt resonanser ligger utenfor min rekkevidde og det opprinnelige mål i denne oppgaven. Noen referanser her er [17, s.51-],[4, 9, Si1, Si2].

14.2 Urenhet i periodisk gitter

La nå det totale potensialet være gitt som i figur 14.1.

Potensialet er fullstendig gitt ved P matrisen for det periodiske gitteret[4] , M_u matrisen for urenheten og $y_0' = y_{-1} + 1, y_0$. Antar som vanlig at det mellom alle potensialene finnes åpne intervall I_i hvor $V = 0$. For intervallene omkring urenheten benyttes betegnelsene I_H og I_V.

Schrödingerlikningen har løsninger[5]:

[3]Her oppfattes M som en funksjon av energien, ikke av $K = \sqrt{E}$.

[4]Det er ingen ting i veien for å se på tilfellet med forskjellig type periodisk gitter på hver side av origo. Må da benytte $P_{V/H}, r_{\pm V/H}$ etc.. Egenverdier må da ligge i felles gap for de to gitter.

[5]Alle matriselikningene gjelder like godt for den reelle representasjonen. Det er kun de eksplisitte gitte matriser som forandres.

Figur 14.1: Et potensial i origo ødelegger et ellers periodisk potensial. Setter $y_{j+1} = y_j + 1$ for $j \neq -1$. Definerer en $y_0' = y_{-1} + 1$. For potensial med null rekkevidde må en ha $y_0 > 0$ og $y_0' < 1$, men disse kravene skjerpes i det generelle tilfellet ved kravet om eksistensen av intervall I_i hvor $V + V_0 = 0$.

$$\psi(x) = \begin{cases} A_n e^{iK(x-y_n)} + B_n e^{-iK(x-y_n)}, & x \in I_n, n \neq 0 \\ A_V e^{iK(x-y_0')} + B_V e^{-iK(x-y_0')}, & x \in I_V \\ A_H e^{iK(x-y_0)} + B_H e^{-iK(x-y_0)}, & x \in I_H \end{cases} \tag{14.11}$$

Med koplinger:

$$T_{-y_0'} \begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = M_u T_{-y_0} \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix} \tag{14.12}$$

$$\begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = L \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix} \tag{14.13}$$

(14.14)

$$L = T_{y_0'} M_u T_{-y_0} = \begin{bmatrix} M_{11u} e^{iK(y_0'-y_0)}, M_{12u} e^{iK(y_0'+y_0)} \\ M_{12u} e^{-iK(y_0'+y_0)}, M_{22u} e^{-iK(y_0'-y_0)} \end{bmatrix} \tag{14.15}$$

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = P^n \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{14.16}$$

(14.17)

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = P^n \begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix}, \quad n = -1, -2, -3, \ldots \tag{14.18}$$

En mere makroskopisk måte å se det på tar utgangspunkt i Blochløsninger til venstre og høyre for urenheten:

$$\psi(x) = \begin{cases} Au_k(x)e^{ikx} + Bu_{-k}(x)e^{-ikx}, & x < R \\ Fu_k(x)e^{ikx} + Gu_{-k}(x)e^{-ikx}, & x > R \end{cases} \tag{14.19}$$

Det finnes en koplingsmatrise M:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{14.20}$$

M finnes[6] med utgangspunkt i (**??**) og (**??**):

$$\psi(x) = A\psi^+ + B\psi^- = \tag{14.21}$$

$$(A\zeta^+ + B\zeta^-)e^{iK(x-y_0')} + (A\eta^+ + B\eta^-)e^{-iK(x-y_0')}, \quad x \in I_V \tag{14.22}$$

$$\begin{bmatrix} \zeta^+, \zeta^- \\ \eta^+, \eta^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = L \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix} = L \begin{bmatrix} \zeta^+, \zeta^- \\ \eta^+, \eta^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{14.23}$$

Tilsvarende for A_H, B_H gir:

$$M = \frac{1}{(\zeta^+\eta^- - \zeta^-\eta^+)_V} \begin{bmatrix} \eta^-, -\zeta^- \\ -\eta^+, \zeta^+ \end{bmatrix}_V L \begin{bmatrix} \zeta^+, \zeta^- \\ \eta^+, \eta^- \end{bmatrix}_H \tag{14.24}$$

hvor fortsatt $L = T_{y_0'} M_u T_{-y_0}$. Indeksene V, H er satt på for å indikere generaliseringen til to forskjellige gitter på hver side av urenheten. Betryggende å innse at $\det M = 1$ er oppfylt hvis gitter V er lik gitter H. Overstående gjelder ikke for energier på båndkanten hvor $\zeta^+\eta^- - \zeta^-\eta^+ = 0$.

14.2.1 Lokaliserte tilstander

I energigapene, d.v.s. for $TrP/2 > 1$, oppstår det nå nye muligheter. En kan få løsninger som avtar eksponensielt på begge sider av origo. Presist finnes to muligheter:

$$|p| < 1: \quad [A_H, B_H] \propto [\zeta^+, \eta^+], \quad [A_V, B_V] \propto [\zeta^-, \eta^-] \tag{14.25}$$

$$|p| > 1: \quad [A_H, B_H] \propto [\zeta^-, \eta^-], \quad [A_V, B_V] \propto [\zeta^+, \eta^+] \tag{14.26}$$

Ved (**??**) og (**??**) finnes for de odde gapene ($0 < p < -1$):

$$\begin{bmatrix} \zeta^- \\ \eta^- \end{bmatrix} \propto L \begin{bmatrix} \zeta^+ \\ \eta^+ \end{bmatrix} \Rightarrow \tag{14.27}$$

(14.28)

$$r_- = \frac{L_{21} + r_+ L_{22}}{L_{11} + L_{12} r_+} \Rightarrow \tag{14.29}$$

(14.30)

$$C_{odde} \stackrel{def}{=} L_{11}r_- - L_{22}r_+ + L_{12}r_+r_- - L_{21} = 0, \quad |p| < 1 \tag{14.31}$$

[6] Jeg har ikke sett en slik angrepsmåte før, men andre har sikkert vært tidligere ute. . .

Og for de like gapene ($p > 1$):

$$\begin{bmatrix} \zeta^+ \\ \eta^+ \end{bmatrix} \propto L \begin{bmatrix} \zeta^- \\ \eta^- \end{bmatrix} \Rightarrow \tag{14.32}$$

(14.33)

$$r_+ = \frac{L_{21} + r_- L_{22}}{L_{11} + L_{12} r_-} \Rightarrow \tag{14.34}$$

(14.35)

$$C_{like} \stackrel{def}{=} L_{11} r_+ - L_{22} r_- + L_{12} r_- r_+ - L_{21} = 0, \quad |p| > 1 \tag{14.36}$$

En videre drøfting av egenverdiene gitt ved overstående likninger følger senere for noen spesifikke potensial.

For å finne en reell likning[7] kan begge likningene multipliseres med seg selv komplekskonjugert. Dette tilsvarer den vanlige normen (kvadrert) i det komplekse plan og gir ekvivalente likninger. Ville da benytte:

$$\left| \sum_i c_i \right|^2 = \sum_i |c_i|^2 + 2 \sum_{i<j} \mathrm{Re}(z_i z_j), \; z_i \in \mathbf{C} \tag{14.37}$$

men synes ikke å oppnå annet enn å finne et fire ganger så stort uttrykk.

En annen angrepsmåte tar utgangspunkt i (**??**) og (**??**) samt L matrisens symmetrier som følger av M matrisens egenskaper. I det enkleste tilfellet, d.v.s. for $E < 0$ innser en at L og $r_\pm$ er reelle. Da er likningen $C_{like/odde}(E) = 0$ reell. Ved $E > 0$ vil $r_\pm^* = 1/r_\pm$ og $L_{11}^* = L_{22}, L_{12}^* = L_{21}$. Litt regning gir da $C_{like/odde}^* = -\frac{1}{r_+ r_-} C_{like/odde}$. Dette er et nyttig resultat fordi $\left| -\frac{1}{r_+ r_-} \right| = 1$. Kan da løse den reelle likningen $D_{like/odde}(E) \stackrel{def}{=} \sqrt{\frac{-1}{r_+ r_-}} C_{like,odde} = 0$ istedet.

Litt mer innsikt i problemet fås ved utgangspunkt i Blochløsningene. For $|p| = \left| e^{ik} \right| < 1$ finnes eksponensielt avtagende løsninger hvis $A = 0 = G$. Dette gir kravet $M_{11} = 0$. Direkte utregning gir:

$$M_{11} = \frac{L_{11} r_- - L_{22} r_+ + L_{12} r_+ r_- - L_{21}}{r_- - r_+} \tag{14.38}$$

For $\left| e^{ik} \right| > 1$ må man ha $B = 0 = F$. Dette krever $M_{22} = 0$. En finner:

$$M_{22} = \frac{-L_{11} r_+ + L_{22} r_- - L_{12} r_+ r_- + L_{21}}{r_- - r_+} \tag{14.39}$$

Disse stemmer overens med de tidligere gitte krav. I tillegg er det to reelle likninger! For $E < 0$ er det trivielt mens det ved $E > 0$ følger ved å vise at $M_{11}^* = M_{11}$ og $M_{22}^* = M_{22}$. En liten regning som ved innføringen av $D_\pm$, gir dette direkte:

[7] I den reelle representasjonen er dette reelle likninger.

(14.40) $$M_{11}^* = \left[\frac{L_{11}r_- - L_{22}r_+ + L_{12}r_+r_- - L_{21}}{r_- - r_+}\right]^*$$

(14.41)

(14.42) $$= \frac{L_{22}/r_- - L_{11}/r_+ L_{21}/(r_- r_+) - L_{12}}{1/r_- - 1/r_+} = M_{11}$$

Og tilsvarende for M_{22}.

Forenklinger ved symmetrisk potensial

Vil nå tilslutt se hvilke forenklinger en finner hvis det totale potensialet er refleksjonssymmetrisk:

$$V(x) = V(-x),\ \forall x \in \mathbf{R} \tag{14.43}$$

Dette gir at $H = -\Delta + V(\cdot)$ kommuterer med paritetsoperatoren $\mathcal{P}$:

$$D(\mathcal{P}) = D(H),\ (\mathcal{P}\psi)(x) = \psi(-x) \tag{14.44}$$

$\mathcal{P}$ og H har derfor felles egenfunksjoner som oppfyller $\psi(-x) = \psi(x)$ (like paritet) eller $\psi(-x) = -\psi(x)$ (odde paritet) [8][8].

Spesielt finnes da:

$$\frac{\psi'(-x)}{\psi(-x)} = -\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \tag{14.45}$$

Velger så en reell representasjon. La $x_0 = y_0 - \triangle x$ være et punkt i I_H. Da vil $-x_0 \in I_V$. Ser på løsninger:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_H \cos(K(x-x_0)) + \frac{B_H}{K}\sin(K(x-x_0)), & x \in I_H \\ A_V \cos(K(x+x_0)) + \frac{B_V}{K}\sin(K(x+x_0)), & x \in I_V \\ A_n \cos(K(x-x_n)) + \frac{B_n}{K}\sin(K(x-x_n)), & \\ x \in I_n,\ x_n = x_0 + n,\ n \in \mathbf{N},\ \ x_n = -(x_0 - n),\ n \in -\mathbf{N} & \end{cases} \tag{14.46}$$

Anta at P var den gitte P-matrise for løsninger referert til $\{y_i\}$. For løsninger relativt til $x_0 + \mathbf{N}_0$ finnes en P matrise:

(14.47) $$P_H = T_{-\triangle x} P T_{\triangle x}$$

(14.48)

(14.49) $$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = {P_H}^n \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix},\ n \in \mathbf{N}$$

Løsninger relativt til $-x_0 - \mathbf{N}_0$ finnes ved:

[8]For symmetriske potensial er forøvrig pariteten en bevegelseskonstant fordi P kommuterer med H.

(14.50) $$P_V = T_{-(1-\triangle x)} P T_{1-\triangle x}$$
(14.51)
(14.52) $$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = {P_H}^n \begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix},\ n \in -\mathbf{N}$$

Her benyttet jeg:

(14.53) $$\triangle x' \stackrel{def}{=} y_0' - (-x_0) = y_{-1} + 1 + (y_0 - \triangle x) = 1 - \triangle x$$

Urenheten gir koplingen:

(14.54) $$T_{x_0} \begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = M_u T_{-x_0} \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix}$$
(14.55)
(14.56) $$\begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = L \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix}$$
(14.57)
(14.58) $$L = T_{-x_0} M_u T_{-x_0}$$

Egenverdier i odde gap finnes ved:

(14.59) $$\begin{bmatrix} \zeta^- \\ \eta^- \end{bmatrix}_V \propto L \begin{bmatrix} \zeta^+ \\ \eta^+ \end{bmatrix}_H \Rightarrow$$
(14.60)
(14.61) $$(r_-)_V = \left[\frac{L_{21} + r_+ L_{22}}{L_{11} + L_{12} r_+}\right]_H \Rightarrow$$
(14.62)
(14.63) $$C_{odde} \stackrel{def}{=} L_{11}(r_-)_V - L_{22}(r_+)_H + L_{12}(r_+)_H(r_-)_V - L_{21} = 0, \quad |p| < 1$$

Og for de like gapene ($p > 1$):

(14.64) $$\begin{bmatrix} \zeta^+ \\ \eta^+ \end{bmatrix}_V \propto L \begin{bmatrix} \zeta^- \\ \eta^- \end{bmatrix}_H \Rightarrow$$
(14.65)
(14.66) $$(r_+)_V = \left[\frac{L_{21} + r_- L_{22}}{L_{11} + L_{12} r_-}\right]_H \Rightarrow$$
(14.67)
(14.68) $$C_{like} \stackrel{def}{=} L_{11}(r_+)_V - L_{22}(r_-)_H + L_{12}(r_-)_H(r_+)_V - L_{21} = 0, \quad |p| > 1$$

Så kommer poenget med den reelle representasjonen:

$$(r_\pm)_V = \frac{\psi^{\pm\prime}(-x_0)}{\psi^\pm(-x_0)} \tag{14.69}$$

(14.70)

$$(r_\pm)_H = \frac{\psi^{\pm\prime}(x_0)}{\psi^\pm(x_0)} \tag{14.71}$$

For de odde gapene finnes da:

$$(r_-)_V = \frac{\psi'(-x_0)}{\psi(-x_0)} = -((r_+))_H \tag{14.72}$$

$$C_{odde} = -L_{11}(r_+)_H - L_{22}(r_+)_H - L_{12}(r_+)_H(r_+)_H - L_{21} = 0 \tag{14.73}$$

$$((r_+))_H = \frac{L_{11} + L_{22} \pm \sqrt{(L_{11}+L_{22})^2 - 4L_{12}L_{21}}}{-2L_{12}}, \quad |p| < 1 \tag{14.74}$$

Og for de like gapene:

$$(r_+)_V = \frac{\psi'(-x_0)}{\psi(-x_0)} = -(r_-)_H \tag{14.75}$$

$$C_{like} \overset{def}{=} -L_{11}(r_-)_H - L_{22}(r_-)_H - L_{12}(r_-)_H(r_-)_H - L_{21} = 0 \tag{14.76}$$

$$(r_-)_H = \frac{L_{11} + L_{22} \pm \sqrt{(L_{11}+L_{22})^2 - 4L_{12}L_{21}}}{-2L_{12}}, \quad |p| > 1 \tag{14.77}$$

I tilfellet med symmetrisk potensial separerer altså likningen seg i et ledd som bare avhenger av urenheten og et ledd som bare avhenger av det periodiske potensialet.

En grafisk drøfting av de mulige egenverdiene for gitte potensial følger i neste kapittel. Vil understreke at metoden her gir alle mulige egenverdier til den tilhørende operator definert på $L_2(\mathbf{R})$. Løsningene vil klart ligge i operatorens definisjonsområde.

14.2.2 Frie tilstander

Når $TrP/2 \leq 1$ finnes ikke noe nytt i forhold til det periodiske tilfellet når det gjelder diskrete egenverdier. Urenheten avbilder en superposisjon av $[\zeta^+, \eta^+]_H$ og $[\zeta^-, \eta^-]_H$ til en superposisjon av $[\zeta^+, \eta^+]_V$ og $[\zeta^-, \eta^-]_V$. Uansett forblir bølgefunksjonen begrenset for $x = \pm\infty$. Dette er det fysiske argumentet for at den kontinuerlige delen av spekteret forblir uforandret.

Her gjelder de samme kommentarer som for tilfellet med vakuum som bakgrunn. For disse tilstandene vil $k \in \mathbf{R}^+$. Transmisjons- og refleksjonskoeffisient defineres ut fra M i (**??**). Spesielt vil resonanser være gitt ved en kompleks løsning E_c til $M_{11} = 0$.

Plott av $T(E)$ hvor E i spekteret følger hvis jeg får tid.

Del IV

Konkrete modeller

Vil nå se på noen enkle spesialtilfeller. Her vil jeg se hvor langt en kan komme analytisk. Hovedinteressen vil være å fastlegge eksistens av egenverdier. Med utgangspunkt i vanskeligere potensial blir skrivearbeidet fort uforholdsmessig i forhold til informasjonen en kan trekke ut. Numerisk er dette imidlertid ikke noe problem og jeg sparer alt annet enn varianter med deltapotensial til grafisk/numerisk drøfting.

Alle beregninger skjer med dimensjonsløse størrelser. Dette fører blant annet til at gitteravstanden $a^\star$ [9] for et periodisk gitter blir usynlig i resultatene ved at en dimensjonsløs gitteravstand $a = a^\star/a^\star = 1$ er innført. Hvis $x^\star$ er en variabel med dimensjon lengde , så benytter jeg variabelen $x = x^\star/a^\star$. Dimensjonsløse bølgetall innføres da konsistent ved $K = a^\star K^\star$.

Konvensjonen med å måle lengder i enheter av $a^\star$ betyr ikke at gitteravstanden er uvesentlig. Energispekteret til et elektron som beveger seg i et periodisk potensial avhenger sterkt av gitteravstanden. For et periodisk deltapotensial er det velkjent at energigap finnes ved dimensjonsløse energier ${K_e^{(n)}}^2 = (n\pi)^2$. Dette svarer da til reelle energibølgetall $K^\star = n\pi/a^\star$. Av dette kan en konkludere at ved en dobling av gitterkonstanten, så vil antallet energigap innenfor et gitt $K^\star$ intervall $(j\pi/a^\star, (j+1)\pi/a^\star)$ også dobles. Dette er illustret i figur A.7-A.8.

Energinivåene til et elektron avhenger også av elektronets masse $m^\star$ og Plancks konstant $\hbar^\star$. En har $E^\star = (\hbar^\star K^\star)^2/(2m^\star)$.

[9]Bruker en * for å anngi at en størrelse har dimensjon.

Kapittel 15

Potensial med kompakt bærer

15.1 To deltapotensial

Velger potensial som på 15.1. Hamiltonfunksjonen er altså[1]:

$$H = -\Delta + \beta\delta(x) + \alpha\delta(x-z) \stackrel{def}{=} -\Delta_{(\beta,\alpha),\{0,z\}} \tag{15.1}$$

Fordi H og $-\Delta$ begge er 2-dimensjonale selvadjungerte utvidelser av samme lukkede symmetriske operator er det uten videre klart at:

$$\sigma_e(H) = \sigma_e(-\Delta) = [0,\infty) \tag{15.2}$$

Løsningene til Schrödingers likning er gitt som i **??**, og er gyldige for $x \notin [0,z]$. Den totale løsningen er:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_-(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}, & x < 0 \\ \psi_0(x) = Ce^{iKx} + De^{-iKx}, & 0 < x < z \\ \psi_+(x) = Fe^{iKx} + Ge^{-iKx}, & x > z \end{cases} \tag{15.3}$$

Hvor[2]:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \tag{15.4}$$

(15.5)

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M_\beta \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + i\frac{\beta}{2K}, i\frac{\beta}{2K} \\ -i\frac{\beta}{2K}, 1 - i\frac{\beta}{2K} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \tag{15.6}$$

Fra **??** følger M matrisen:

[1] Operatoren er definert som spesifisert tidligere. I denne delen av oppgaven vil jeg bare av og til skrive opp den fulle definisjonen av operatorer hvor delta- eller deltaderivert-potensialet inngår.

[2] Her kan f.eks. A, B velges fritt.

Figur 15.1: $V(x) = -2\delta(x) - 10\delta(x - 0.8)$.

$$M = T_{-0} M_\beta T_{-z} M_\alpha T_z \tag{15.7}$$

$$\tag{15.8}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 + i\frac{\beta}{2K}, i\frac{\beta}{2K} \\ -i\frac{\beta}{2K}, 1 - i\frac{\beta}{2K} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 + i\frac{\alpha}{2K}, i\frac{\alpha}{2K}e^{-2iKz} \\ -i\frac{\alpha}{2K}e^{2iKz}, 1 - i\frac{\alpha}{2K} \end{bmatrix} \tag{15.9}$$

$$\tag{15.10}$$

$$= \left[\begin{matrix} (1 + i\frac{\beta}{2K})(1 + i\frac{\alpha}{2K}) + \frac{\beta\alpha}{(2K)^2}e^{2iKz}, \\ (1 - i\frac{\beta}{2K})(-i\frac{\alpha}{2K})e^{2iKz} - i\frac{\beta}{2K}(1 + i\frac{\alpha}{2K}), \end{matrix} \right. \tag{15.11}$$

$$\tag{15.12}$$

$$\left. \begin{matrix} (1 + i\frac{\beta}{2K})i\frac{\alpha}{2K}e^{-2iKz} + i\frac{\beta}{2K}(1 - i\frac{\alpha}{2K}) \\ (1 - i\frac{\beta}{2K})(1 - i\frac{\alpha}{2K}) + \frac{\beta\alpha}{(2K)^2}e^{-2iKz} \end{matrix} \right] \tag{15.13}$$

Spesielt:

$$M_{11} = 1 + i\frac{\beta + \alpha}{2K} + \frac{\beta\alpha}{(2K)^2}(e^{2iKz} - 1) \tag{15.14}$$

Overstående er et godt utgangspunkt for drøfting av lokaliserte tilstander. Da er $E < 0$ og det er praktisk å definere:

$$\mathcal{K} = K/i > 0 \tag{15.15}$$

Dette gir:

$$M_{11} = 1 + \frac{\beta + \alpha}{2\mathcal{K}} - \frac{\beta\alpha}{(2\mathcal{K})^2}(e^{-2\mathcal{K}z} - 1) \tag{15.16}$$

Figur 15.2: Typisk venstre- og høyreside i (??).

Egenverdikravet $M_{11} = 0$[3] gir likningen:

$$\beta\alpha(e^{-2\mathcal{K}z} - 1) = (2\mathcal{K})^2 + (\beta + \alpha)2\mathcal{K} \tag{15.17}$$

$$= (2\mathcal{K} + \frac{\beta + \alpha}{2})^2 - (\frac{\beta + \alpha}{2})^2, \quad z > 0, \mathcal{K} > 0, \alpha\beta \neq 0 \tag{15.18}$$

Tilfellet $\alpha\beta = 0$ er enten fri partikkel eller enkelt deltapotensial og sees bort fra. Disse tilfellene kan finnes som en grense av mitt valg.

Likningen kan drøftes direkte grafisk:

Venstresiden starter i origo og har $-\beta\alpha$ som asymptote. For $\alpha\beta > 0$ faller den eksponentsielt mot $-\alpha\beta$, mens den for $\alpha\beta < 0$ vokser mot $-\alpha\beta$. Den deriverte i origo er $-2\alpha\beta z$. Se figur 15.2 for et typisk tilfelle.

Høyresiden er en parabel med nullpunkt i 0 og $-\frac{\beta+\alpha}{2}$. Bunnpunktet er i $-\frac{\beta+\alpha}{4}$ og bunnverdien er $-\left(\frac{\beta+\alpha}{2}\right)^2$. Noterer at minimum til parabelen alltid ligger under minimum til høyresiden: $-\left(\frac{\beta+\alpha}{2}\right)^2 \leq -\beta\alpha$ fordi $0 \leq \left(\frac{\alpha-\beta}{2}\right)^2 = \left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right)^2 - \beta\alpha$. Den deriverte i origo er $2(\beta + \alpha)$.

En får dermed naturlig følgende tilfeller:

1. $\alpha\beta > 0$
   (a) $\beta + \alpha > 0$,ingen egenverdier. Fig.A.1.
   (b) $\beta + \alpha < 0$,ved å se på de deriverte i origo.
      i. $z \leq \frac{-(\alpha+\beta)}{\beta\alpha}$,[4] en egenverdi. Fig.A.2.
      ii. $z > \frac{-(\alpha+\beta)}{\beta\alpha}$,to egenverdier. Fig.A.3.

[3] Dette tilsvarer $A = G = 0$ og $B = M_{21}F \neq 0$.

[4] Tilfellet $z = -(\alpha + \beta)/(\beta\alpha)$ følger ved at parabelen har minst andrederivert $(= 8)$ i origo.

2. $\alpha\beta < 0$

   (a) $\beta + \alpha \geq 0$.

      i. $z \leq \frac{\beta+\alpha}{-\beta\alpha}$,ingen egenverdier. Fig.A.4.

      ii. $z > \frac{\beta+\alpha}{-\beta\alpha}$,en egenverdi. Fig.A.5.

   (b) $\beta + \alpha < 0$, en egenverdi.Fig.A.6.

Med utgangspunkt i $M_{11} = 0$ for komplekse energier kan eventuelle resonanser finnes. Resonanstilstandene kan sees på som tilstander hvor partikkelen nesten er fanget som i en boks mellom potensialene. En bølgelengde gitt ved $\lambda_n = 2\pi/k_n \simeq z/n, n = 1, 2, \ldots$ vil svare til en slik nesten stående bølge. Dette gir spesielt at for fiksert n vil en sannsynligvis finne at resonansenergiene $E_n = k_n^2$ avtar når z økes. Det er og rimelig å vente at levetiden gitt ved den inverse til kompleksdelen til "resonansenergien" øker ved økende z fordi E_n avtar. Med mindre energi tar det lenger tid for partikkelen å unnslippe potensialet.

Resonanser krever en mye lenger diskusjon enn overstående heuristiske og jeg overlater den til andre.

Kapittel 16

Periodiske potensial

16.1 Et deltapotensial i basis

Vil se raskt på:

$$H = -\Delta_{\alpha,\mathbf{Z}} = -\Delta + \alpha \sum_{j\in\mathbf{Z}} \delta(\cdot - j), \quad \alpha \in \mathbf{R} \tag{16.1}$$

Løsningene til Schrödingers likning er:

$$\psi(x) = A_j e^{iK(x-y_j)} + B_j e^{-iK(x-y_j)}, \quad x \in I_j = (j-1, j), \; y_j = j \in \mathbf{Z} \tag{16.2}$$

Hvor:

$$\begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} \tag{16.3}$$

$$\tag{16.4}$$

$$P = T_1 M_\alpha^{-1} = \begin{bmatrix} (1 - i\frac{\alpha}{2K})e^{iK}, -i\frac{\alpha}{2K}e^{iK} \\ i\frac{\alpha}{2K}e^{-iK}, (1 + i\frac{\alpha}{2K})e^{-iK} \end{bmatrix} \tag{16.5}$$

Spekteret er gitt ved:

$$\cos(k) \quad = TrP/2 = (M_{11}e^{-iK} + M_{22}e^{iK})/2 \tag{16.6}$$

$$\tag{16.7}$$

$$= \cos(K) + \tfrac{\alpha}{2K}\sin(K) \in \mathbf{R}, \; E = K^2 \tag{16.8}$$

Dette gir $\sigma(H) = \sigma_e(H)$ og $\sigma_d(H) = \sigma_p(H) = \emptyset$.

For $K = K_e \in \mathbf{N}\pi$ finnes den enkle typen båndkant ved at $\cos(k) = (-1)^n$ for $K_e = n\pi$. I like gap (n like) er den "vanskelige" båndkanten gitt ved:

$$1 = \cos(K_v) + \frac{\alpha}{2K_v}\sin(K_v) \Rightarrow \frac{\alpha}{2K_v} = \tan(\frac{K_v}{2}) \tag{16.9}$$

Figur 16.1: $\cos(k)$ som funksjon av K_r/π for $\alpha \in \{5, -2, -6\}$. Har definert $K_r = \sqrt{E}$ for $E \geq 0$ og $K_r = -\sqrt{-E}$ for $E < 0$.

Mens den i odde gap (n odde) er gitt ved:

$$-1 = \cos(K_v) + \frac{\alpha}{2K_v}\sin(K_v) \Rightarrow \frac{\alpha}{2K_v} = -\cot(\frac{K_v}{2}) \tag{16.10}$$

Energigapene er nå gitt ved (K_e^2, K_v^2) for $\alpha > 0$ og (K_v^2, K_e^2) for $\alpha < 0$.

For $\alpha > 0$ vil første ledningsbånd starte i $K_v^2 \in (0, \pi^2)$ og ende i $K_e^2 = \pi^2$. Det nullte gapet er da $(-\infty, K_v^2)$.

For $\alpha = 0$ vil første og eneste ledningsbånd starte i 0 og ende i ∞.

For $\alpha < 0$ vil nullte gap være $(-\infty, K_e^2)$ hvor $K_e^2 < 0$ og $\mathcal{K}_e = K_e/i > 0$ løser:

$$1 = (1 + \frac{\alpha}{2\mathcal{K}_e})e^{\mathcal{K}_e} + (1 - \frac{\alpha}{2\mathcal{K}_e})e^{-\mathcal{K}_e},\ \mathcal{K}_e > 0 \tag{16.11}$$

For $\alpha < 0$ vil det første gapet være (K_v^2, π^2). Tilfellet $\alpha = -4$ gir $K_v = 0$. For $-4 < \alpha < 0$ vil $K_v \in (0, \pi)$ og for $\alpha < -4$ vil $K_v/i = \mathcal{K}_v \in (0, \mathcal{K}_e)$. I dette siste tilfellet vil altså første ledningsbånd $[-\mathcal{K}_e^2, -\mathcal{K}_v^2]$ ligge helt under origo.

Diskusjonen over følger fullstendig ved en grafisk diskusjon av $\cos(k)$ som funksjon av energien. De tre typiske tilfellene er vist på figur 16.1.

En oppsummering er gitt ved:

$$\rho(H) = \cup_{n=0}^{\infty}({K_v^{(n)}}^2, {K_e^{(n)}}^2),\ \alpha < 0 \tag{16.12}$$

$$\rho(H) = \cup_{n=0}^{\infty}({K_e^{(n)}}^2, {K_v^{(n)}}^2),\ \alpha > 0 \tag{16.13}$$

I overstående er alle intervall disjunkte og:

Figur 16.2: Spekteret til et periodisk deltapotensial som funksjon av styrken α.

$$K_e^{(n)^2} = (n\pi)^2,\ n \in \mathbf{N},\ \alpha \neq 0 \tag{16.14}$$

$$K_e^{(0)^2} < 0,\ K_v^{(0)^2} = -\infty \text{ når } \alpha < 0 \tag{16.15}$$

$$K_v^{(0)^2} > 0,\ K_e^{(0)^2} = -\infty \text{ når } \alpha > 0 \tag{16.16}$$

(16.17)

Spekteret som funksjon av K/π er vist på figur 16.2[1].
Dispersjonsrelasjonen gitt ved $E(k) = K^2$ hvor $\cos(k) = Tr(P)/2$ er vist i figur 16.3.

[1]Denne figuren er skrevet ut på en matriseskriver. Dette p.g.a. en "bug" i Matlab som normalt klarer å få grafikken ut på instituttets laserskriver

Figur 16.3: Dispersjonsrelasjonen $E(k)$ her kan sammenlignes med dispersjonrelasjonen $E(k) = k^2$ for en fri partikkel. Har plottet for $\alpha = -6$. Den effektive massen til et elektron med en slik dispersjonsrelasjon er gitt ved $E''(k)$. Den er negativ ved toppen av ledningsbåndet!

Figur 16.4: To deltapotensial er basis i krystallen som har periode 1.

16.2 To deltapotensial i basis

Ser nå på et potensial med periode 1 som i figur 16.4. Hamiltonoperatoren er da[2]:

$$H = -\Delta_{(\beta,\alpha),\mathbf{Z}+\{0,z\}}, \quad z \in (0,1) \tag{16.18}$$

Domenet til H er dermed:

$$D(H) = \left\{ \begin{array}{l} f \in W_{2,1}(\mathbf{R}) \cap W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus [\mathbf{Z} + \{0,z\}]) : \\ f'(y+) - f'(y-) = \beta f(y), \ y \in \mathbf{Z}, \\ f'(y+) - f'(y-) = \alpha f(y), \ y \in \mathbf{Z} + \{z\} \end{array} \right\} \tag{16.19}$$

Spekteret er gitt ved $|Tr(P)/2| \leq 1$. Fra M matrisen i (**??**) finnes:

$$Tr(P)/2 = (M_{11}e^{-iK} + M_{22}e^{iK})/2 = \tag{16.20}$$

(16.21)

$$\cos(K) + \frac{\beta + \alpha}{2K}\sin(K) + 2\frac{\beta\alpha}{(2K)^2}\sin(Kz)\sin K(1-z), \quad z \in (0,1) \tag{16.22}$$

Trenger ikke å se på tilfellet $z < 0$ da alle mulige tilfeller er dekket ved at α, β er vilkårlige. Legger forøvrig merke til at uttrykket er fullstendig symmetrisk i α, β slik en kunne vente. Valg av positiv x retning kan ikke innfluere på spekteret. Det er jo samme fysiske krystall.

Plott av $|p|$ er vist i figur 16.5 for tre valg av α, β.

Dispersjonsrelasjonen gitt ved $E(k) = K^2$ hvor $\cos(k) = Tr(P)/2$ er vist i figur 16.6.

Asymptotisk for store energier ser en fra (**??**) at spekteret blir som for et periodisk deltapotensial med styrke $\alpha + \beta$. Det er rimelig å anta at dette gjelder generelt for et periodisk gitter med N deltapotensial: Asymptotisk for store energier blir spekteret som for et periodisk deltapotensial med styrke $\alpha_1 + \cdots + \alpha_N$. Fenomenet er illustrert ved tre svake deltapotensial i figur 16.7-16.9.

[2]Notasjonen følger [9].

Figur 16.5: Spekteret er gitt ved at $|p| = 1$. Spekteret til to krystall og til et blandingskrystall kan dermed leses av figuren over. Blandingskrystallen tilsvarer den midterste grafen. En illustrasjon på at Saxon-Hutner [9, SH] gjelder for deltapotensial. Felles gap i spekteret til de to enkle krystallene gir gap hos det sammensatte krystall.

Figur 16.6: Dispersjonsrelasjonen $E(k)$ her kan sammenlignes med dispersjonrelasjonen $E(k) = k^2$ for en fri partikkel. Har plottet for $\alpha = -2$, $\beta = -4$ og $z = 0.75$.

Figur 16.7: Tre deltapotensial i basis.

Figur 16.8: Et deltapotensial i basis med styrke lik summen av styrkene til foregående potensial.

Figur 16.9: Spektrene er asymptotisk like fordi summen av styrkene til deltapotensialene i basisen er like.

En grundigere drøfting av spekteret utelates her fordi jeg vil bruke tiden på defekte periodiske potensial i stedet.

Kapittel 17

Defekte periodiske potensial

17.1 Enkel deltaurenhet

Ser på Hamiltonoperatoren gitt ved:

$$H = -\Delta_{\alpha,\{z\}+\mathbf{Z}} + \beta\delta(\cdot),\ z \in (0,1) \tag{17.1}$$

Tilfellene $z = 1/2$ og $z = 0$ ($z \to 0+$) er behandlet tidligere [9, GHK, SH, SP] og er spesielt enkle p.g.a. symmetrien i disse tilfellene. Potensialet er indikert på figur 17.1 for $z = 0.75$.

Tilfellene $\beta = 0$ og $\beta \neq 0$ tilsvarer begge endelig dimensjonale (endimensjonale) selvadjungerte utvidelser av samme lukkede symmetriske operator. Det essensielle spekteret er derfor uforandret av perturbasjonen i følge korollar 8.11:

$$\sigma_e(H) = \sigma_e(-\Delta_{\alpha,\{z\}+\mathbf{Z}}) = \sigma(-\Delta_{\alpha,\mathbf{Z}}) \tag{17.2}$$

Spekteret tilhørende det periodiske deltapotensial er drøftet tidligere.

Det diskrete spekteret følger nå via M matrisene. I reell representasjon [1] blir M matrisen for deltapotensialet i origo:

$$M_0 = \begin{bmatrix} 1, 0 \\ -\alpha, 1 \end{bmatrix} \tag{17.3}$$

Dette fulgte greit ved **??** samt den komplekse representasjonen for M matrisen. Ved å minne om at koeffisientene i denne reelle representasjonen er nettopp funksjonsverdien og den deriverte ser man direkte at overstående er riktig. M matrisen for deltapotensial plassert utenfor origo finnes ved **??** samt den reelle translasjonsmatrise gitt i **??**:

$$M_z = T_{-z} M_0 T_z = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\alpha}{2K}\sin(2Kz), \frac{\alpha}{K^2}\sin^2(Kz) \\ -\alpha\cos^2(Kz), 1 - \frac{\alpha}{2K}\sin(2Kz) \end{bmatrix} \tag{17.4}$$

P matrisen finnes helt tilsvarende ved:

[1] Dropper $^{(r)}$ for markering av hvilken basis av lineært uavhengige løsninger som benyttes.

Figur 17.1: Et deltapotensial i origo ødelegger et ellers periodisk deltapotensial. Velger periode 1 og $z \in (0,1)$ er koordinaten til et av gitterpunktene.

$$P = T_1 {M_z}^{-1} = T_{1-z} {M_0}^{-1} T_z = \tag{17.5}$$

$$\tag{17.6}$$

$$\left[\begin{array}{c} \cos(K) + \frac{\alpha}{K} \sin K(1-z) \cos(Kz), \\ -K \sin(K) + \alpha \cos K(1-z) \cos(Kz), \end{array} \right. \tag{17.7}$$

$$\tag{17.8}$$

$$\left. \begin{array}{c} \frac{\sin(K)}{K} + \frac{\alpha}{K^2} \sin K(1-z) \sin(Kz) \\ \cos(K) + \frac{\alpha}{K} \cos K(1-z) \sin(Kz) \end{array} \right] \tag{17.9}$$

I regningen benyttet jeg $\cos(K) = \cos K(1-z)\cos(Kz) - \sin K(1-z)\sin(Kz)$ og $\sin(K) = \sin K(1-z)\cos(Kz) + \sin(Kz)\cos K(1-z)$. Sistnevnte kan brukes til å verifisere at:

$$TrP/2 = \cos(K) + \frac{\alpha}{2K}\sin(K) \tag{17.10}$$

som nødvendigvis måtte være uavhengig av z.

En bedre kontroll finnes ved sammenligning med det mer generelle resultatet:

$$T_{-a} M_\beta T_b = \tag{17.11}$$

$$\tag{17.12}$$

$$\left[\begin{array}{c} \cos K(b-a) + \frac{\beta}{K} \sin Ka \cos Kb, \frac{1}{K} \sin K(b-a) + \frac{\beta}{K^2} \sin Ka \sin Kb \\ -K \sin K(b-a) - \beta \cos Ka \cos Kb, \cos K(b-a) - \frac{\beta}{K} \sin Ka \cos Kb \end{array} \right] \tag{17.13}$$

Alle løsninger til Schrödingers likning er gitt ved[2]:

[2] Skriver opp løsningene for å være sikker på å unngå misforståelser. Dette er ikke mer enn en gjentagelse av **??**-**??**.

$$\text{(17.14)}\quad \psi(x) = \begin{cases} A_V \cos(Kx) + \frac{B_V}{K}\sin(Kx), & x \in (z-1, 0) \\ \\ A_H \cos(Kx) + \frac{B_H}{K}\sin(Kx), & x \in (0, z) \\ \\ A_n \cos(K(x-n)) + \frac{B_n}{K}\sin(K(x-n)), & x \in (n-1, n) + \{z\}\,, \\ & n \in \mathbf{Z} \setminus \{0\} \end{cases}$$

Her er:

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = P^n \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix}, \quad n \in \mathbf{N} \tag{17.15}$$

(17.16)

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = P^n \begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix}, \quad n \in -\mathbf{N} \tag{17.17}$$

Forholdet mellom egenvektorene til P matrisen er gitt ved:

$$r_\pm \quad = \frac{p^\pm - P_{11}}{P_{12}} = \frac{p^\pm - (\cos(K) + \frac{\alpha}{K}\sin K(1-z)\cos(Kz))}{\frac{\sin(K)}{K} + \frac{\alpha}{K^2}\sin K(1-z)\sin(Kz)} \tag{17.18}$$

(17.19)

$$= \frac{p^\pm - (\cos(K) + \frac{\alpha}{2K}(\sin(K) + \sin K(1-2z)))}{\frac{\sin(K)}{K} + \frac{\alpha}{2K^2}(\cos K(1-2z) - \cos(K))} \tag{17.20}$$

Her er $p^\pm = TrP/2 \pm \sqrt{(TrP/2)^2 - 1}$ som før.
Betingelsen for egenverdi er gitt ved **??** og **??**. Med[3]:

$$\begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1, 0 \\ -\beta, 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix} \tag{17.21}$$

finnes:

$$\beta = \frac{B_H}{A_H} - \frac{B_V}{A_V} = \frac{\psi'(0+) - \psi'(0-)}{\psi(0)} = \pm(r_+ - r_-) = \tag{17.22}$$

(17.23)

$$\pm\frac{2\sqrt{(TrP/2)^2 - 1}}{P_{12}} = -\operatorname{sgn}(p)\frac{2\sqrt{(TrP/2)^2 - 1}}{\frac{\sin(K)}{K} + \frac{\alpha}{K^2}\sin K(1-z)\sin(Kz)} \overset{def}{=} \beta_n(K) \tag{17.24}$$

Det positive fortegnet gjelder for $|p| < 1$ og det negative for $|p| > 1$. Minner om at $|p| < 1$ er det samme som $-1 < p < 0$ og $TrP < -1$ (d.v.s. i odde gap), mens $|p| > 1$ gir $p > 1$ og $TrP/2 > 1$ (d.v.s. i like gap).

[3]Dette var poenget med å trekke z inn i P. Ved å operere med en urenhetsmatrise med z ville β ved utmultiplikasjon "bli strødd utover hele likningen".

Figur 17.2: Urenhetsnivå i periodisk deltapotensial med deltaurenhet. Det periodiske deltapotensialet har styrke $\alpha = -6$ og $z = 0.2$. Det kontinuerlige spekteret er gitt ved de heltrukne horisontale linjene.

En drøfting av verdiområdet til $\beta_n(K)$ i gapene:

$$I_{\rho,n} = (K_e^{(n)}, K_v^{(n)})^{\sim},\ (K_e^{(n)^2}, K_v^{(n)^2})^{\sim} \subset \rho(-\Delta_{\alpha,\mathbf{Z}}) \tag{17.25}$$

vil nå gi de mulige egenverdiene p.g.a. perturbasjonen med deltaurenheten. Verdiområdet:

$$R_{\delta,n} \stackrel{def}{=} R(\beta_n(K)|_{I_{\rho,n}}) \subset \mathbf{R} \tag{17.26}$$

bestemmer hvilke β som gir egenverdi i gap n. Plott av $\beta_n(K)$ i gap n er urenhetsnivået i gap n.

Uansett bakgrunnspotensialets type V_p vil $\beta_n(K)$ måtte være en invertibel funksjon av K i gap n på $R_{V_p,n}$. Det følger direkte av at H maksimalt kan ha en egenverdi i gapene som en konsekvens av korollar 8.13. Selv i det enkle tilfellet her med en periodisk deltabakgrunn, er det ikke uten videre lett å vise denne egenskapen hos $\beta_n(K)$ direkte. Korollarets styrke er enda klarere med mer kompliserte bakgrunnspotensial.

Et plott av urenhetsnivået $\beta_n(K)$ er vist i figur 17.2 for en bakgrunn med $\alpha = -6$ og urenhet gitt ved $z = 0.2$. Legg merke til hvor nær båndkanten urenhetsnivået er når β er av samme størrelse som α. Legg og merke til at man har en egenverdi like under ledningsbåndet ved en negativ urenhet og en egenverdi like over ledningsbåndet ved en positiv urenhet. For en halvleder dopet med slike urenheter betyr dette henholdsvis et tilskudd av elektroner eller "hull" (mangel på elektroner) som ladningsbærere. Fordi energinivået for et urenhetselektron ligger så nær ledningsbåndet skal det svært lite energi til for å eksitere det opp i ledningsbåndet. I praksis er disse urenhetselektronene derfor et direkte tilskudd til antall ladningsbærere. Dette er grunnen til at en dopet halvleder får større ledningsevne.

Telleren $f(K) = -2\,\mathrm{sgn}(p)\sqrt{(TrP/2)^2 - 1}$ har enkel oppførsel i gapene, se figur 17.3. I gapene er $(TrP/2)^2 > 1$ som gir $f(K) > 0$ i odde gap og $f(K) < 0$ i like gap. På båndkantene

Figur 17.3: Drøfting av teller i urenhetsnivå i periodisk deltapotensial med deltaurenhet. Det periodiske deltapotensialet har styrke $\alpha = -6$ og $z = 0.2$.

$E \in \{K_e^2, K_v^2\}$ er $TrP/2 = \pm 1$ slik at $f(K_e) = f(K_v) = 0$. Nullpunktene til $TrP/2 \pm 1$ har multiplisitet 1 når de svarer til energigap (se figur 16.1). Dette gir at telleren $f(K)$ har røtter med multiplisitet 1/2. For $K \simeq K_e$ har man derfor $f(K) \simeq -2\,\mathrm{sgn}(p)(konst. \cdot |K - K_e|)^{1/2}$ og tilsvarende for $K \simeq K_v$. Overstående er det generelle tilfellet[4].

Nevneren $P_{12}(K) = (\sin(K) + (\alpha/K)\sin K(1-z)\sin(Kz))/K$ er mer komplisert, se figur 17.4. I første omgang holder det å lete etter nullpunkter til P_{12}. Disse vil gi de eventuelle asymptotene til $\beta_n(K)$. I grensen $K = 0$ har P_{12} et nullpunkt[5] hvis og bare hvis $\alpha = -1/\left[(1-z)z\right]$. Noterer at når $z \in (0,1)$ så vil $-1/\left[(1-z)z\right] \in (-\infty, -4]$. Ser så bort i fra tilfellet $K = 0$ og drøfter funksjonen:

$$g(K) = P_{12}(K)K = \sin(K) + \frac{\alpha}{2K}(\cos K(1-2z) - \cos(K)),\ K > 0 \tag{17.27}$$

Nullpunktene for denne vil ha multiplisitet ≥ 1 fordi den er vilkårlig mange ganger deriverbar. Dette gir at disse nullpunktene vil gi en asymptote for $\beta_n(K)$. Et viktig spørsmål er om gapene $I_{\rho,n}$ alltid inneholder et nullpunkt for $g(K)$. Følgende resultat er da viktig:

Lemma 17.1 *Funksjonen g vil alltid ha akkurat et nullpunkt i $\overline{I_{\rho,n}}$ for $n \geq 1$ og $\alpha > -4$.*

Bevis. Viser først eksistensen av minst et nullpunkt. Skriver om:

$$g(K) = \sin K + \tfrac{\alpha}{2K}(\pm 1 - \cos K + \cos 2K(z - \tfrac{1}{2}) \mp 1) \tag{17.28}$$

(17.29)

$$= \begin{cases} \sin(K)(1 + \frac{\alpha}{2K}\tan\frac{K}{2}) + \frac{\alpha}{2K}(\cos 2K(z-\frac{1}{2}) - 1) \\ \sin(K)(1 - \frac{\alpha}{2K}\cot\frac{K}{2}) + \frac{\alpha}{2K}(\cos 2K(z-\frac{1}{2}) + 1) \end{cases} \tag{17.30}$$

[4]Det kan konstrueres spesielle bakgrunnspotensial hvor overstående bryter sammen i et gitt punkt. Eventuelle kritiske punkter må kontrolleres separat. For dette tilfellet gjelder dette $K = 0$.

[5]Dette nullpunktet vil gi en asymptote fordi det har multiplisitet 2.

Figur 17.4: Drøfting av nevner i urenhetsnivå i periodisk deltapotensial med deltaurenhet. Det periodiske deltapotensialet har styrke $\alpha = -6$ og $z = 0.2$. Legg merke til hvor pent nullpunktene legger seg i energigapene.

Dette kan brukes til å finne $g(K_v)$. Har videre:

$$g(K) = \begin{cases} \frac{\alpha}{2K}(\cos 2K(z-\frac{1}{2})-1) & \text{når } \frac{\alpha}{2K} = -\cot\frac{K}{2} \\ \frac{\alpha}{2K}(\cos 2K(z-\frac{1}{2})+1) & \text{når } \frac{\alpha}{2K} = \tan\frac{K}{2} \end{cases} \tag{17.31}$$

Ved sammenlikning med (**??**) og (**??**) finnes da for tilfellet $\alpha > -4$[6]:

$$g(K_v^{(n)})/\alpha \leq 0 \text{ når } n = 2m+1 \geq 1 \text{ d.v.s. i et odde gap} \tag{17.32}$$

(17.33)

$$g(K_v^{(n)})/\alpha \geq 0 \text{ når } n = 2m \geq 2 \text{ d.v.s. i et like gap} \tag{17.34}$$

Evaluering av $g(K)$ for $K_e^{(n)} = n\pi$ er enkelt:

$$g(n\pi) = \frac{\alpha}{2n\pi}(\cos 2n\pi(z-\frac{1}{2}) - (-1)^n),\ n \geq 1 \tag{17.35}$$

Dette gir:

$$g(K_e^{(n)})/\alpha \geq 0 \text{ når } n = 2m+1 \geq 1 \text{ d.v.s. i et odde gap} \tag{17.36}$$

(17.37)

$$g(K_e^{(n)})/\alpha \leq 0 \text{ når } n = 2m \geq 2 \text{ d.v.s. i et like gap} \tag{17.38}$$

Sammenligning med (**??**) gir at g har minst et nullpunkt i alle $\overline{I_{\rho,n}}$ for $n \geq 1$ og $\alpha > -4$.

[6]Se figur 16.2 for forklaring på hvorfor jeg begrenser meg til $\alpha > -4$. Denne betingelsen forenkler litt her ved at de tilhørende energier alltid er positive. Dermed slipper jeg å se på komplekse K.

Å vise direkte at g maksimalt har et nullpunkt synes vanskelig. Her er det heldigvis gitt et annet hjelpemiddel. Anta at det fantes to nullpunkt for g i tillukningen til gap n. Fordi disse nullpunktene ville ha multiplisitet ≥ 1, så ville dette gi to asymptoter for $\beta_n(K)$. Dette er i strid med at perturbasjonen med en deltafunksjon maksimalt kan gi en egenverdi i gapene.

Det finnes derfor alltid akkurat 1 nullpunkt for g i gapene. $\boxed{\hbar}$

Plott av nevneren $P_{12}(K)$ er vist i figur A.9-A.14 for varierende α og i figur A.16-A.27 for varierende z. Kan notere at det er tilstrekkelig å drøfte for $z \in (0, 0.5]$. Dette fordi tilfellene $z = z_0 \in (0, 0.5]$ og $z = 1 - z_0 \in [0.5, 1)$ er samme fysiske krystall (sett fra hver sin kant). Direkte sees denne symmetrien fra uttrykket for $P_{12}(K)$ i (**??**).

Sammenligning av fortegnet til telleren og nevneren til $\beta_n(K)$ gir nå hovedresultatet for en deltaurenhet i et periodisk deltapotensial:

Teorem 17.2 *La H være som i (**??**). Det diskret spekteret er gitt ved løsninger til $\beta = \beta_n(K)$ for $K \in I_{\rho,n}$. Her vil $K \in I_{\rho,n}$ for en $n \geq 0$ være det samme som at $E = K^2 \in \rho(-\Delta_{\alpha,\mathbf{Z}})$. Definer $K = K_0$ til å være asymptoten til $\beta_n(K)$ i gap $I_{\rho,n}$[7]. Det finnes nøyaktig en slik $K_0 \in \overline{I_{\rho,n}}$ for alle n. For gap $n = 0$ er $K_0 = -\infty$. Når $E = K^2$ varierer fra $-\infty$ til nederste båndkant, så vil $\beta_0(K)$ variere fra $-\infty$ til 0. Definerer K verdiene for gap n ved $I_{\rho,n} = (K_B, K_T)$ av notasjonshensyn. Her vil $K_B = K_e$ og $K_T = K_v$ for $\alpha > 0$ og $K_B = K_v$ og $K_T = K_e$ for $\alpha < 0$. For alle gap $n \geq 1$ er det tre mulige tilfeller for urenhetsnivået:*

1. *$K_0^2 \in \rho(-\Delta)$. $\beta_n(K)$ varierer monotont fra 0 til ∞ når K varierer fra K_B til K_0. Når K varierer fra K_0 til K_T varierer $\beta_n(K)$ fra $-\infty$ til 0.*

2. *$K_0 = K_T$. $\beta_n(K)$ varierer monotont fra 0 til ∞ ved økende K i gapet .*

3. *$K_0 = K_B$. $\beta_n(K)$ varierer monotont fra 0 til $-\infty$ ved avtagende K i gapet.*

Bevis. For gap $n \geq 1$ og $\alpha > -4$ er dette en direkte konsekvens av foregående lemma samt forutgående diskusjon.

Se så på gap 0 for $\alpha > 0$. På båndkanten gitt ved $K = K_v$ hvor $K_v^2 > 0$:

$$1 = TrP/2 = \cos K_v + \frac{\alpha}{2K_v} \sin K_v, \quad \frac{\alpha}{2K_v} = \tan \frac{K_v}{2} \tag{17.39}$$

er telleren $f(K_v) = 0$. For mindre energier er:

$$f(K) = -2\,\mathrm{sgn}(p)\sqrt{(TrP/2)^2 - 1} < 0 \tag{17.40}$$

Ved omskrivningen av g som tidligere følger og at:

$$P_{12}(K) = g(K)/K > 0 \tag{17.41}$$

[7] $\beta_n(K)$ er definert på den positive imaginære aksen og den positive reelle aksen i det komplekse K-plan. $I_{\rho,n}$ kan være på formen $(i\mathcal{K}_v, 0) \cap (0, \pi)$ for gap 1 og tilsvarende for gap 0. De tilhørende energi intervall er reelle.

når $E = K^2 \leq K_v^2$. Dermed er $\beta_0(K) \leq 0$ når $K^2 \leq K_v^2$ og $\beta_0(K) = 0$ bare når $K = K_v$. I grensen $\kappa = K/i \to \infty$ vil $\beta_0(K) \to -\infty$. Dette fordi:

$$f(K) \sim -e^{K/i} \tag{17.42}$$

og:

$$P_{12}(K) \sim e^{K/i}/(-2Ki) \tag{17.43}$$

ved store $\kappa = K/i$. Dette gir det asymptotiske egenverdinivået i gap 0 for svært negative urenheter:

$$\beta_0(K) \sim -2K/i \tag{17.44}$$

Dette er identisk med det ene energinivået for et enkelt deltapotensial. Tilsammen må derfor $\beta_0(K)$ være monotont voksende i gap 0, fra $-\infty$ til 0. Monotoniteten følger direkte fra at det maksimalt kan være en egenverdi i gap 0.

Se så på $\alpha < 0$. For det nullte energigapet blir diskusjonen og konklusjonen akkurat som over.

For $\alpha < -4$ må også gap 1 diskuteres spesielt. Det holder å evaluere $\beta_1(K)$ i båndkantene. Telleren f har som før nullpunkt med multiplisitet lik 1/2. Nevneren finnes ved:

$$P_{12}(\pi)/\alpha = g(\pi)/(\alpha\pi) = \frac{1}{2\pi^2}(\cos 2\pi(z - \frac{1}{2}) + 1) \geq 0 \tag{17.45}$$

$$P_{12}(K_v)/\alpha = g(K_v)/(\alpha K_v) = \frac{1}{2K_v^2}(\cos 2K_v(z - \frac{1}{2}) - 1) \leq 0 \tag{17.46}$$

Den siste likningen fulgte ved $K_v^2 < 0$ og $\cos(ix) = \cosh(x) \geq 1$ for reell $x = 2K_v(z - \frac{1}{2})/i$. Benyttet og $\alpha/(2K_v) = -\cot(K_v/2)$ som gjelder for denne båndkanten. Nevneren P_{12} har dermed minst et nullpunkt i tillukningen til gap 1 også for $\alpha < -4$. Telleren delt på α er negativ eller 0. Dette gir som før at $\beta_n(K)$ er større eller lik 0 i bunnen av et gap og mindre eller lik 0 i toppen av et gap. $\boxed{\hbar}$

Det er tilfredstillende å se at det intuitive bildet av urenhetsnivåer holder. En tiltrekkende (negativ) forurensning vil føre til et energinivå (donornivå) nær toppen av et gap, mens en frastøtende (positiv) forurensning fører til et energinivå (akseptornivå) nær bunnen av et gap. Når styrken til urenheten øker i absoluttverdi, så nærmer energinivået seg en asymptotisk verdi i gapet [8]. Denne asymptotiske verdien ligger kun unntaksvis på båndkanten.

Grensen $\beta = \pm\infty$, d.v.s. Dirichletbetingelsen $\psi(0) = 0$ er spesielt interesant. Fra (**??**) er det gitt at betingelsen $\psi(0) = 0$ er det samme som betingelsen $P_{12} = 0$[9]. Egenverdiene til H med Dirichletbetingelsen i origo er dermed fullstendig gitt av nullpunkten til P_{12} som er i gapene. H vil da ha en egenverdi i gap n bortsett fra når nullpunktet til P_{12} faller på en båndkant. Dette skjer for et endelig antall z verdier beskrevet i:

[8] For gap 0 er dette verdien $-\infty$.

[9] En er ikke ute etter løsninger hvor spranget i den deriverte er 0 i origo. Disse løsningene vil aldri være i L_2 og kan ikke gi en egenverdi.

Teorem 17.3 *I gap $n \geq 1$ vil egenverdien til H med Dirichletbetingelsen $\psi(0) = 0$ forsvinne i tilfellene:*

1. $\alpha > 0$.

   - *Et odde gap,$n = 2m + 1$. For:*

     $$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n'}{2n}, \quad n' \in \{\pm 1, \pm 3, \dots, \pm(n-2)\} \tag{17.47}$$

     forsvinner egenverdien i bunnen av gapet og for:

     $$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n'}{n + r_v^{(n)}}, \quad n' \in \{0, \pm 1, \dots, \pm(n-1)/2\} \tag{17.48}$$

     forsvinner egenverdien i toppen av gapet. Her er $K_v^{(n)} = \pi(n + r_v^{(n)})$,$0 < r_v^{(n)} < 1$.

   - *Et like gap,$n = 2m$. For:*

     $$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n'}{2n}, \quad n' \in \{\pm 0, \pm 2, \dots, \pm(n-2)\} \tag{17.49}$$

     forsvinner egenverdien i bunnen av gapet og for:

     $$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n' + 1/2}{n + r_v^{(n)}}, \quad n' \in \{-n/2, \dots, -1, 0, 1, \dots, (n-2)/2\} \tag{17.50}$$

     forsvinner egenverdien i toppen av gapet. Her er $K_v^{(n)} = \pi(n + r_v^{(n)})$,$0 < r_v^{(n)} < 1$.

2. $\alpha < 0$

   - *Et odde gap,$n = 2m + 1$. For:*

     $$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n'}{n - r_v^{(n)}}, \quad n' \in \{0, \pm 1, \dots, \pm(n-1)/2\} \tag{17.51}$$

     forsvinner egenverdien i bunnen av gapet. Her er $K_v^{(n)} = \pi(n - r_v^{(n)})$,$0 < r_v^{(n)} < 1$.
     *Et unntak her er gap 1 for $\alpha < -4$, men (**??**) holder også der.*
     For:

     $$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n'}{2n}, \quad n' \in \{\pm 1, \pm 3, \dots, \pm(n-2)\} \tag{17.52}$$

     forsvinner egenverdien i toppen av gapet.

- *Et like gap,* $n = 2m$. *For:*

$$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n' + 1/2}{n - r_v^{(n)}}, \quad n' \in \{-n/2, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, (n-2)/2\} \tag{17.53}$$

forsvinner egenverdien i bunnen av gapet. Her er $K_v^{(n)} = \pi(n - r_v^{(n)})$*,*$0 < r_v^{(n)} < 1$*. For:*

$$z_{n'} = \frac{1}{2} + \frac{n'}{2n}, \quad n' \in \{\pm 0, \pm 2, \ldots, \pm(n-2)\} \tag{17.54}$$

forsvinner egenverdien i toppen av gapet.

Bevis. Alt over følger ved å lete etter nullpunktene til P_{12} som funksjon av z når K er fiksert på en båndkant.

For de enkle båndkantene $K_e^{(n)} = n\pi$ finnes z verdiene ved likning (**??**):

$$\cos n\pi = \cos 2n\pi(z - 1/2), \; 2n\pi(z - 1/2) = n'\pi \tag{17.55}$$

hvor n' er odde hvis og bare hvis n er odde. Videre finnes:

$$|n|' \leq \max \left\{ n' : \left| \frac{n'}{2n} \right| < 1/2 \right\} = n - 2 \tag{17.56}$$

fordi $z \in (0, 1)$. Hvis $z = 0$ og $z = 1$ regnes som tillatte verdier,så ville skranken økes med 2. Disse to tilfellene er strengt tatt ikke dekket av mine beregninger, men det er klart at en ved en separat regning ville finne samme uttrykk for $\beta_n(K)$ som mitt i grensene $z = 0+$ og $z = 1-$.

For de vanskelige båndkantene $K_v^{(n)}, n \geq 1$ er situasjonen naturlig nok litt mer kronglete. Med utgangspunkt i likning (**??**) finnes naturlig to tilfeller:

$$2K_v^{(n)}(z - 1/2) = 2n'\pi \text{ for } n = 2m + 1 \tag{17.57}$$

$$2K_v^{(n)}(z - 1/2) = (2n' + 1)\pi \text{ for } n = 2m \tag{17.58}$$

Deretter benyttes:

$$K_v^{(n)} = \pi(n - r_v^{(n)}), 0 < r_v^{(n)} < 1 \text{ for } \alpha < 0 \tag{17.59}$$

$$K_v^{(n)} = \pi(n + r_v^{(n)}), 0 < r_v^{(n)} < 1 \text{ for } \alpha > 0 \tag{17.60}$$

Et unntak her er gap 1 for $\alpha < -4$ fordi ${K_v^{(0)}}^2 < 0$ i dette tilfellet. For dette gapet er uansett $z = 1/2$ den eneste verdien som gir et nullpunkt for $g(K)$ i $K_v^{(1)}$. Bortsett fra dette unntaket finnes da fordi $z \in (0, 1)$:

$$|n'| \leq \max\left\{n' \in \mathbf{N}_0 : \frac{n'}{n \pm r_v^{(n)}} < 1/2\right\}, n = 2m+1 \tag{17.61}$$

(17.62)

$$n' \leq \max\left\{n' \in \mathbf{N}_0 : \frac{n'+1/2}{n \pm r_v^{(n)}} < 1/2\right\}, n = 2m \tag{17.63}$$

(17.64)

$$n' \geq -\max\left\{n' \in \mathbf{N}_0 : \frac{n'-1/2}{n \pm r_v^{(n)}} < 1/2\right\}, n = 2m \tag{17.65}$$

Dette gir overstående resultater. $\boxed{\hbar}$

Når nullpunktet til P_{12} faller sammen med en båndkant, så sier jeg at egenverdien til H forsvinner inn i samme båndkant. Denne språkbruken støttes ved at en kan få egenverdien til en H med endelig β så nær denne båndkanten en vil ved å velge β stor nok. β må velges stor positiv hvis nullpunktet er i bunnen av et ledningsbånd og stor negativ hvis nullpunktet er i toppen av et ledningsbånd.

Nullpunktet $K_0(z)$ til P_{12} i $\overline{I_{\rho,n}}$ vil variere kontinuerlig som en funksjon av $z \in (0,1)$. Overstående resultat gir (ved litt ettertanke) at K_0 oscillerer frem og tilbake til utgangsposisjonen når z varierer fra $0+$ til $1-$. For gap 1 vil K_0 gå frem og tilbake 1 gang. For gap 2 vil K_0 gå frem og tilbake 2 ganger. For gap n vil K_0 gå frem og tilbake n ganger. Dette sees direkte ved overstående resultat (tell!).

En beskrivelse av hva som skjer med K_0 i gap $1-3$ når z varierer er vist i figur A.15-A.24.

Avslutter historien om en uendelig sterk deltaurenhet med "generaliseringen":

Korollar 17.4 *Se på operatoren:*

$$D(H) = \left\{\begin{array}{l} f \in W_{2,1}(\mathbf{R}) \cap W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus \mathbf{Z} + \{0,z\}) : \\ f'(y+) - f'(y-) = \alpha f(y) \text{ for } y \in \mathbf{Z} + \{z\}, \\ f'(y_j+) - f'(y_j-) = \beta_j f(y_j) \text{ for } y_j \in \mathbf{Z} \setminus \{0\}, \\ 0 = f(0), \quad \alpha, \beta_j \in \mathbf{R}, 0 < z < 1 \end{array}\right\} \tag{17.66}$$

(17.67)

$$Hf = -f'' \text{ når } f \in D(H) \tag{17.68}$$

Denne operatoren vil ha egenverdiene $E_0^{(n)} = K_0^{(n)^2}$ *for de* n *og* z *hvor* $K_0^{(n)} \in I_{\rho,n}$ *hvor* $I_{\rho,n}$ *gir energigapene for det periodiske deltapotensial alene*[10]*. Spesielt dekker dette tilfellet hvor* $\beta_j = \beta$ *for alle* $j \in \mathbf{Z} \setminus \{0\}$.

Bevis. La oss si at K_0^2 er en egenverdi for operatoren beskrevet tidligere for alle $\beta_j = 0$. La egenvektoren for denne egenverdien være:

$$f(x) = \left\{\begin{array}{l} u_k(x)e^{-kx}, \ x, k > 0 \\ u_{-k}(x)e^{kx}, \ -x, k > 0 \end{array}\right. \tag{17.69}$$

[10] Jeg sier ikke at dette er alle egenverdiene!

Her er $u_k(0) = 0 = u_{-k}(0)$ og u_k, u_{-k} har periode 1. Dette følger direkte fra min eksplisitte konstruksjon av egenvektorene i (**??**). Dette gir:

$$f(j) = f(0) = 0, \;\; f'(j+) - f'(j-) = 0 \text{ for alle } j \in \mathbf{Z} \tag{17.70}$$

At den deriverte er kontinuerlig på $\mathbf{Z} \setminus \{0\}$ er klart fordi f er egenvektor for operatoren i tilfellet alle $\beta_j = 0$.

Tilsammen er derfor f også med i domenet til H for vilkårlige β_j og påstanden er bevist. $\boxed{\hbar}$

17.2 Enkel deltaderivert urenhet

Foregående beregning dekket tilfellet med en deltaurenhet i en vilkårlig posisjon z i forhold til et periodisk potensial. Den vanskelige delen av drøftingen var gitt ved å se på P_{12} elementet som var fullstendig gitt av z og det periodiske potensialet. Den konkrete drøftingen ble gjort for tilfellet at P kom fra et periodisk deltapotensial.

Vil nå se på den andre enkle formen for urenhet gitt ved en deltaderivert. Ser på Hamiltonoperatoren[11]:

$$H = -\Delta_{\alpha,\mathbf{Z}+z} + \beta\delta'(\cdot), \;\; z \in (0,1) \tag{17.71}$$

En spesifisering av H er gitt ved:

$$D(H) = \left\{ \begin{array}{l} f \in W_{2,2}(\mathbf{R} \setminus Y) \cap W_{2,1}(\mathbf{R}) : \\ Y = (z + \mathbf{Z}) \cup \{0\}, \\ f'(0+) - f'(0-) = 0, \;\; f(0+) - f(0-) = \beta f'(0) \\ f'(y+) - f'(y-) = \alpha f(y), \;\; y \in \mathbf{Z} + z \end{array} \right\} \tag{17.72}$$

(17.73)

$$Hf = -f'', \;\; f \in D(H) \tag{17.74}$$

Det essensielle spekteret er som for en deltaurenhet uforandret ved en slik endimensjonal perturbasjon:

$$\sigma_e(H) = \sigma(-\Delta_{\mathbf{Z},\alpha}) \tag{17.75}$$

Ved løsninger skrevet opp i samme notasjon som for deltaurenheten finnes en kopling:

$$\begin{bmatrix} A_V \\ B_V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1, -\beta \\ 0, 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_H \\ B_H \end{bmatrix} \tag{17.76}$$

[11] Velger en periodisk deltabakgrunn fordi det gir lett regning. Resultatene i form av matriselikninger er generelle.

Figur 17.5: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.50$.

Utskrevet blir dette[12]:

$$B_V = B_H \tag{17.77}$$
$$\beta = \frac{A_H - A_V}{B_H} = -\operatorname{sgn}(p)\left(\frac{1}{r_+} - \frac{1}{r_-}\right) = \frac{-\operatorname{sgn}(p) 2\sqrt{(TrP/2)^2 - 1}}{P_{21}} \stackrel{def}{=} \beta_n(K) \tag{17.78}$$

I regningen benyttet jeg likning **??**:

$$r_\pm = \frac{\eta^\pm}{\zeta^\pm} = \frac{p^{\pm 1} - P_{11}}{P_{12}} = \frac{P_{21}}{p^{\pm 1} - P_{22}} \tag{17.79}$$

For en periodisk deltabakgrunn har vi fra før ((**??**)):

$$P = T_{1-z} {M_0}^{-1} T_z \tag{17.80}$$
$$P_{21} = -K\sin(K) + \alpha\cos K(1-z)\cos(Kz) \tag{17.81}$$

Som for deltaurenheten er nå urenhetsnivået i gap n gitt ved β[13]. Et plott av urenhetsnivået er gitt i figur 17.5. Legg spesielt merke til nivået i gap 0. Flere er gitt i figur A.44-A.54. Nevneren f i $\beta_n(K)$ er den samme f som er drøftet tidligere. Den interessante delen av β_n er gitt i nevneren $P_{21}(K)$. Denne er vist i figur 17.6 for et tilfelle. Mange flere plott for varierende z er vist i figur A.30-A.43. Ved sammenlikning med tilsvarende plott for en deltaurenhet ser man at odde og like gap har skiftet rolle. Dette gir spesielt at P_{21} generelt også har et nullpunkt i gap 0. Tilsvarende resultatet for en deltaurenhet finnes:

[12] Neumannbetingelsen $f'(0) = 0$ kan regnes separat. Er bare opptatt av egenverdiene slik at tilfellet $f(0+) = f(0-)$ er uinteressant. Ved "grensen" $\beta \to \pm\infty$ er det klart at en finner resultat tilsvarende Neumannbetingelsen. Her tilsvarer dette kravet $P_{21}(K) = 0$.

[13] Det er veldig takknemlig å her kunne bruke resultatene fra utregningen av P. Dette er en maksimal utnyttelse av P som er funnet. P.g.a. symmetriegenskapene er all informasjon om P gitt i P_{12} og P_{21}.

Figur 17.6: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.50$.

Lemma 17.5 *La $I_{\rho,n}$ være K intervallene*[14] *som gir resolventmengden til det periodiske deltapotensial. Da vil $P_{21}(K)$ ha akkurat et nullpunkt $K_0^{(n)}$ i $\overline{I_{\rho,n}}$ for alle $z \in (0,1)$.*

Bevis. Ved å benytte identiteten:

$$\cos K(1-z)\cos Kz = \frac{1}{2}\left[\cos K + \cos K(1-2z)\right] \tag{17.82}$$

Finnes:

$$P_{21}(K) = -K\left[\sin K + \frac{\alpha}{2K}(-\cos K(1-2z) - \cos K)\right] \tag{17.83}$$

Denne kan sammenliknes med likning (**??**) og (**??**) og man har direkte:

$$P_{21}(K) = -K \cdot \begin{cases} \sin(K)(1 + \frac{\alpha}{2K}\tan\frac{K}{2}) + \frac{\alpha}{2K}(-\cos 2K(z-\frac{1}{2}) - 1) \\ \sin(K)(1 - \frac{\alpha}{2K}\cot\frac{K}{2}) + \frac{\alpha}{2K}(-\cos 2K(z-\frac{1}{2}) + 1) \end{cases} \tag{17.84}$$

Dermed finnes for de like og odde "vanskelige" båndkantene $K_v^{(n)}$:

$$P_{21}(K) = -K \cdot \begin{cases} \frac{\alpha}{2K}(-\cos 2K(z-\frac{1}{2}) - 1) \text{ når } K = K_v^{(2m+1)} \\ \frac{\alpha}{2K}(-\cos 2K(z-\frac{1}{2}) + 1) \text{ når } K = K_v^{(2m)} \end{cases} \tag{17.85}$$

hvor $m \in \{0, 1, \ldots\}$. Da er $P_{21}/\alpha \geq 0$ for odde båndkant og $P_{21}/\alpha \leq 0$ for en like båndkant. For de enkle båndkantene $K_e^{(n)} = n\pi$ finnes enkelt $P_{21}/\alpha \leq 0$ for n odde og $P_{21}/\alpha \geq 0$ for n like.

[14]Dette er intervall i en litt utvidet betydning. Resultatet gjelder også for de negative energiene, d.v.s. for komplekse K.

Da må P_{21} ha minst 1 nullpunkt i tillukningen til alle gapene. En kan bare ha en egenverdi i et gap slik at to nullpunkter for P_{21} i et gap er en umulighet. $\boxed{\hbar}$

Diskusjonen videre går videre akkurat som for deltaurenheten. En trenger bare å bytte ut ordene "odde" og "like". Spesielt vil en finne et diskret sett med z verdier som gir nullpunkt til P_{21} på en båndkant. Dette gir samme morsomme oscillasjon av et nullpunkt i et gitt gap når z varierer i $(0, 1)$. Hvilke gap som har urenhetsnivå ved en fiksert z og en fiksert β er direkte gitt av fortegnet på $\beta_n(K)$. F.eks. gir en positiv β ved $z = 0+$ en egenverdi i alle gap (inklusive gap 0!!).

Egenverdiene for Neumann betingelsen $f'(0) = 0$ er som tidligere påpekt, gitt ved nullpunktene til P_{21} i et gap. Bortsett fra for $z = 1/2$[15] vil operatoren med Neumann betingelsen også gi en egenverdi i gap 0. Dette er spesielt og alt annet enn intuitivt. Ved sammenlikning med tilfellet med vakuum som bakgrunn skulle en vente at en egenverdi i gap 0 bare kunne opptre ved en negativ urenhet[16].

Et resultat som var å forvente, er at en svakt positiv deltaurenhet gir en egenverdi i toppen av gapet, mens en svakt negativ gir en urenhet i bunnen av gapet. Dette var å forvente p.g.a. oppførselen til en enkel deltaurenhet i vakuum. Der vil egenverdien gå mot null når styrken[17] β går mot $-\infty$.

[15] $z = 1-$ eller $z = 0+$ krever en ekstra diskusjon som jeg ikke rekker nå på tampen av oppgaven.

[16] At resultatet ikke stemmer med intuisjonen er å forvente da δ'-potensialet er prototypen på et "urimelig" potensial. Dette resultatet er allikevel mye mer urimelig en jeg hadde forventet.

[17] P.g.a. dette ville det kanskje være rimelig å kalle $1/\beta$ for styrken til δ'-potensialet.

Del V

Appendiks

Tillegg A

Figurer til hovedteksten

A.1 Potensial med kompakt bærer

A.1.1 To deltapotensial

Figur A.1: To positive deltapotensial gir ingen egenverdier.

Figur A.2: To negative deltapotensial gir en egenverdi ved små avstander mellom potensialene.

Figur A.3: Ved store avstander gir to negative deltapotensial to egenverdier.

Figur A.4: To deltapotensial med motsatt fortegn hvor det positive dominerer gir ingen egenverdi ved små avstander.

Figur A.5: To deltapotensial med motsatt fortegn hvor det positive dominerer gir en egenverdi ved store avstander.

Figur A.6: To deltapotensial med motsatt fortegn hvor det negative dominerer gir en egenverdi.

A.2 Periodiske potensial

Figur A.7: Når gitteravstanden er $a = 1$ vil energigapene ligge ved $(n\pi)^2$.

Figur A.8: Når gitteravstanden er $a = 2$ vil energigapene ligge ved $(n\pi/2)^2$.

A.3 Potensial på periodisk bakgrunn

A.3.1 Et deltapotensial

Den kritiske nevneren P_{12} er plottet ved varierende styrke α på potensialet. Nullpunktene til P_{12} er egenverdiene til H med Dirichletbetingelsen $f(0) = 0$, hvis de er i gapene. Den første figuren har $z = 0.50$, men de resterende har $z = 0.20$.

Figur A.9: Kritisk nevner. $\alpha = -4, z = 0.50$.

Figur A.10: Kritisk nevner. $\alpha = -4, z = 0.20$.

Figur A.11: Kritisk nevner. $\alpha = -2, z = 0.20$.

Figur A.12: Kritisk nevner. $\alpha = 2, z = 0.20$.

Figur A.13: Kritisk nevner. $\alpha = 4, z = 0.20$.

Figur A.14: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 0.20$.

Den kritiske nevneren P_{12} er plottet ved varierende posisjon z på urenheten. Nullpunktene til P_{12} er egenverdiene til H med Dirichletbetingelsen $f(0) = 0$, hvis de er i gapene. Figurene viser at egenverdiene oscillerer i gapene når z varierer. Styrken $\alpha = -6$ på potensialet er fiksert.

Figur A.15: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.001$.

Figur A.16: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.1$.

Figur A.17: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.2$.

Figur A.18: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.3$.

Figur A.19: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.4$.

Figur A.20: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.5$.

Figur A.21: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.6$.

Figur A.22: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.7$.

Figur A.23: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.8$.

Figur A.24: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.9$.

Den kritiske nevneren P_{12} er plottet ved varierende posisjon z på urenheten. Styrken $\alpha = 6$ på potensialet er fiksert.

Figur A.25: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 0.2$.

Figur A.26: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 0.5$.

Figur A.27: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 0.9$.

To plott som de foregående,men med telleren $f(K)$ med på samme figur. Telleren er delt på 10 for å få den inn på figuren. På den første figuren er telleren tegnet to ganger p.g.a. en tabbe i skaleringen. Det er først og fremst fortegnet som er viktig å se kontra fortegnet til nevneren P_{12}. Ved toppen av et gap har $\beta_n(K) = f(K)/P_{12}(K)$ negativt fortegn, mens den har positivt fortegn ved bunnen av et gap.

Figur A.28: Kritisk nevner og teller. $\alpha = -6, z = 0.35$.

Figur A.29: Kritisk nevner og teller. $\alpha = 6, z = 0.35$.

A.3.2 Et deltaderivert-potensial

Den kritiske nevneren P_{21} er plottet ved varierende posisjon på deltaderivert urenheten. Nullpunktene til P_{21} er egenverdiene til H med Neumann betingelsen $f'(0) = 0$, hvis de er i gapene.

Figur A.30: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.10$.

Figur A.31: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.20$.

Figur A.32: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.30$.

Figur A.33: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.40$.

Figur A.34: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.50$.

Figur A.35: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.60$.

Figur A.36: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.70$.

Figur A.37: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.80$.

Figur A.38: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.90$.

Figur A.39: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.999$.

Figur A.40: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 1$.

Figur A.41: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 1$.

Figur A.42: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 0.50$.

Figur A.43: Kritisk nevner. $\alpha = 6, z = 0.20$.

Urenhetsnivået $\beta_n(K)$ er plottet ved varierende posisjon på deltaderivert urenheten. Legg spesielt merke til nivået i gap 0.

Figur A.44: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.001$.

Figur A.45: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.10$.

Figur A.46: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.20$.

Figur A.47: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.30$.

Figur A.48: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.40$.

Figur A.49: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.50$.

Figur A.50: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.60$.

Figur A.51: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.70$.

Figur A.52: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.80$.

Figur A.53: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.90$.

Figur A.54: Kritisk nevner. $\alpha = -6, z = 0.999$.

Tillegg B

Matlab kildekode

B.1 Hovedprogrammet i Matlab

For å lette drøftingen av de forskjellige potensialtyper, så har jeg laget et menystyrt program. Dette startes opp fra Matlab ved å skrive **hovedmnu¡CR¿**. Ved hjelp av menyer kan du definere forskjellige sammensatte potensial og få tegnet de opp. Byggeklossene er deltapotensialet, deltaderivert-potensialet og firkant-potensialet. Forskjellige fysiske egenskaper hos disse sammensatte potensialene kan deretter drøftes. Det er først og fremst fokusert på energispekteret til et elektron som beveger seg i et slikt endimensjonalt potensial.

Slik ser Matlabkilden for **hovedlst.m** og **hovedmnu.m** ut.

```
% Listing av hovedmnu.m og hovedlst.m.

echo off
% Hovedmeny for enklere bruk av MATLAB rutiner i forbindelse
% med diplomoppgaven: 'Schrdinger likningen for endimensjonal
% bevegelse i et periodisk potensial med defekter'.

% Gunnar Taraldsen,13.2.1988
% Siste endring 13.2.1988, G.T.
% Siste endring 25.3.1988, G.T.
% Siste endring 30.3.1988, G.T.
% Siste endring 06.4.1988, G.T.
% Siste endring 07.4.1988, G.T.

%clear

% Srger for eksistens av diverse variable.
if ~(exist('Init')==1)
init;
end;
if ~(Init==1)
init;
end;
```

```
while 1
Nmeny=9;
Ameny= ['initmenu'
'periodin'
'urenhtin'
'potplot '
'drurenhe'
'drperiod'
'drdefekt'
'prdefmnu'
'keyboard'];
Ahelp= ['help initmenu'
'help periodin'
'help urenhtin'
'help potplot '
'help drurenhe'
'help drperiod'
'help drdefekt'
'help prdefmnu'
'help keyboard'];
clc
help hovedlst
n = input('Velg et alternativ: ');
if ((n <-Nmeny) | (n > Nmeny))
break
end
if n==0
 break
end;
if n>0
Ameny = Ameny(n,:);
eval(Ameny)
else
Ahelp=Ahelp(-n,:);
eval(Ahelp)
pause
end
end
%clear
%clc

%  -----HOVEDMENY FOR GT'S DIPLOM 1987-1988   -----
%
% 1) Initiering av energiintervall etc..
%
% 2) Initiering av parametre for periodisk potensial.
% 3) Initiering av parametre for urenhet.
```

```
% 4) Plott av de valgte potensial.
%
% 5) Drfting av urenhet.
% 6) Drfting av periodisk gitter.
% 7) Drfting av defekt periodisk gitter.
%
% 8) Noen predefinerte drftinger.
%
% 9) MATLAB kommandoer. Avsluttes med CTRL-Z.
%
% 0) Avslutt.
%
% Mere forklaring til alternativene finnes ved  svare med
% negativt tall. -1 <CR> gir f.eks. mere opplysninger om valg 1.
```

P.g.a. tidsnd er ikke alternativ 5 og 7 i overstende implementert.
De forskjellige rutinene som **hovedmnu.m** kaller opp direkte.

```
% Fil: INITMENU.M
% Meny for endring av INIT sine valg.

if Init~=1
init;
end;

Endrenergi=0;
while 1
Nmeny=9;
Ameny= ['inikrmin'
'inikrmax'
'inikdim '
'iniz    '
'iniealph'
'iniebeta'
'inialpha'
'iniabsp '
'iniyint '];

clc;
fprintf('1) Krmin   = %g\n',Krmin);
fprintf('2) Krmax   = %g\n',Krmax);
fprintf('3) Kdim   = %g\n',Kdim);
fprintf('4) z   = %g\n',z);
fprintf('5) alpha   = %g\n',alpha);
fprintf('6) beta   = %g\n',beta);
fprintf('7) Alpha(1)-Alpha(%2.0f) = (%g)-(%g)\n',...
```

```
NAlpha,Alpha(1),Alpha(NAlpha));
fprintf('8) Absp   = %g\n',Absp);
fprintf('9) Yint   = (%g)-(%g)\n',Yint(1),...
Yint(length(Yint)));
fprintf('0) Avslutt');
n = input('Velg et alternativ: ');
if ((n <= 0) | (n > Nmeny))
break
end
Ameny = Ameny(n,:);
eval(Ameny)
end;

% Hvis noen av energivariablene er endret:
if Endrenergi==1
Kr=Krmin:(Krmax-Krmin):Krmax;Kr=nvektor(Kr',Kdim);
K=kcomplex(Kr*pi);

% Etter en forandring her m M_p, M_u og M_d beregnes p nytt.
Mberegn_p=0;Mberegn_d;Mberegn_u=0;
end;

%*******************************************************************
% INIrutiner
while 1
Krmin=input('Krmin=');
if (length(Krmin)==1)
break
end;
end;
Endrenergi=1;
%*******************************************************************
while 1
Krmax=input('Krmax=');
if (length(Krmax)==1)
break
end;
end;
Endrenergi=1;
%*******************************************************************
while 1
Kdim=input('Kdim=');
if (length(Kdim)==1)
break
end;
end;
Endrenergi=1;
```

```
%*****************************************************************
while 1
z=input('z=');
if (length(z)==1)
break
end;
end;
%*****************************************************************
while 1
alpha=input('alpha=');
if (length(alpha)==1)
break
end;
end;
%*****************************************************************
while 1
beta=input('beta=');
if (length(beta)==1)
break
end;
end;
%*****************************************************************
Alpha=input('Alpha=');
NAlpha=length(Alpha);
%*****************************************************************
while 1
Absp=input('Absp=');
if ((Absp==1) | (Absp==0))
break
end;
end;
%*****************************************************************
fprintf(' Minste og strste verdi gir bl.a. intervall for urenhet i');
fprintf(' periodisk gitter.');
Yint=input('Yint=');

%*****************************************************************
% Diverse hjelperutiner:
function X=nvektor(Vektor,N)
%function X=nvektor(vektor,N)
%Returnerer X vektor med samme frste og siste element som
%Vektor, men med N elementer likt separert.

X=Vektor(1):(Vektor(length(Vektor))-Vektor(1))/(N-1):Vektor(length(Vektor));
Dim=size(Vektor);
if Dim(2)==1
X=X';
```

```
end
%*********************************************************************
function K=kcomplex(Kr)
%function K=kcomplex(Kr)
%Konversjon fra reelt til komplekst blgetall.

K=sqrt(Kr.*abs(Kr));



%*********************************************************************
% Fil: INIT.M
% Initiering av globale variable. Samtidig en samlet oversikt over
% variable som benyttes globalt via hovedmnu.

%************** Logiske variable *************************************
% Logisk variabel for markering av at init.m er kjrt.
Init=1;

% For markering av at disse rutinene ikke er kjrt enda.
Urenhtin=0;
Periodin=0;
Mberegn_p=0;Mberegn_u=0;Mberegn_d=0;

% Logisk variabel til styring av defekt periodisk plott.
Pltdefek=0;

% Logisk variabel som bestemmer om abs(p) (1) eller cos(k) (0)
% eller bare den rette delen av abs(p) (2) skal
% benyttes ved illustrasjon av spekter.
% Mitt valg:
Absp=1;

% Tar ikke kopi til *.met fil hvis ikke beskjed om annet.
Kopi=0;

% For  plotte abs(p) p samme figur for forskjellige pot. sammensetn.
Saxon=.5;Saxonp=0;

% For at skalering av Yaksen skal bestemmes av Yint(1),Yint(..).
Yaks=0;

%************** Parametre for styring av plott *****************
% Parameter ved plotting av potensialet deltaderivert.
DELDavst=.1;

% Antall gjentagelser av basis p hver side av 'origo' ved
```

```
% illustrasjon av periodisk potensial.
ANTper=2;

% Energiintervall. Dette er den reelle Kr skalert med PI.
Krmin=eps;Krmax=5;Kdim=100;
Kr=Krmin:(Krmax-Krmin):Krmax;Kr=nvektor(Kr',Kdim);
K=kcomplex(Kr*pi);

% Skalering ved ddplot etc...
Yint=[-50,50];

% y-intervall ved plott av abs(p) og cos(k).
yminabsp=-.5;ymaxabsp=4.5;
ymincosk=-2;ymaxcosk=2;



%************** Parametre som spesifiserer potensial *****************
% Antall potensialtyper.
Ant_pot_type=3;

% Parametre som spesifiserer periodisk potensial.
Alpha_p=0;Beta_p=0;V_0_p=0;l_p=0;xmin_p=0;xmax_p=0;z_p=0;Type_p=0;N_p=0;
a=0;
% Typene:
Pot_p_type=['delta-potensial        '
    'deltaderivert-potensial'
    'firkant-potensial      '];


% Parametre som spesifiserer urenheten.
Alpha_u=0;Beta_u=0;V_0_u=0;l_u=0;xmin_u=0;xmax_u=0;z_u=0;Type_u=0;N_u=0;
L=0;

%************************ Gammelt opplegg ******************************
% Styrken til deltapotensialet.
Alpha=[-6:-1,1:6];NAlpha=length(Alpha);
alpha=Alpha(1);
beta=Alpha(4);

% For farger.
col(1)='w';col(2)='r';col(3)='g';col(4)='b';

% Farger.
for  i=1:NAlpha
j=rem(i,4)+1;
colAlpha(i)=col(j);
```

```
end;

% Plassering av deltapotensial i basis. Avstand mellom to deltapot..
z=.5;


% Fil: PERIODIN.M
% Bygger opp parameterliste for spesifisering av basis i periodisk
% potensial.
% Gunnar Taraldsen,28.3.1988
echo off
% Siste endring 28.3.1988, G.T.

% Etter en forandring her m M_p og M_d beregnes p nytt.
Mberegn_p=0;Mberegn_d;

% Navn p rutiner som initierer parametre for de respektive potensial.
Potensial=['deltai_p'
   'deltdi_p'
   'firkti_p'];

echo on
% Spesifisering av basis innenfor [xmin_p,xmax_p) gir perioden
% a=xmax_p-xmin_p.
echo off
xmin_p=input('xmin_p=');xmax_p=input('xmax_p=');a=xmax_p-xmin_p;

echo on
% N kommer spesifiseringen av de enkelte potensial.
% Ved  anngi en z_p(i)<=z_p(i-1), z_p(i)>=xmax_p
% eller en z_p(i)<xmin_p, s avsluttes utsprringen.
%
echo off

z_p(1)=input(['Posisjon z_p(1) i [',num2str(xmin_p),',',num2str(xmax_p),...
') til potensial 1, z_p(1)=']);
flerepot=(z_p(1)>=xmin_p)&(z_p(1)<xmax_p);

echo on
% Type_p=1 gir delta-potensial.
% Type_p=2 gir deltaderivert-potensial.
% Type_p=3 gir firkant-potensial.
%
echo off

% Logisk variabel som bekrefter at et periodisk potensial er spesifisert.
Periodin=flerepot;
```

```
N_p=0;
while flerepot
N_p=N_p+1;

% Nullstiller alle potensialparametre for  sikre lik dimensjon!
nulla_p;

Type_p(N_p)=0;
while ( (Type_p(N_p)>3)|(Type_p(N_p)<1) )
Type_p(N_p)=input(['Type_p(',num2str(N_p),')=']);
end
Pvalg = Potensial(Type_p(N_p),:);
eval(Pvalg);

z_p(N_p+1)=input(['Posisjon z_p(',num2str(N_p+1),') i (',...
num2str(z_p(N_p)),',',num2str(xmax_p),') til potensial ',num2str(N_p+1),...
', z_p(',num2str(N_p+1),')=']);

flerepot=( (z_p(N_p+1)>z_p(N_p))&(z_p(N_p+1)<xmax_p) );
end;

%clear z_p(N_p+1);
%*******************************************************************
% Fil: NULLA_P.M
Alpha_p(N_p)=0;
Beta_p(N_p)=0;
V_0_p(N_p)=0;
l_p(N_p)=0;



% Fil: URENHTIN.M
% Bygger opp parameterliste for spesifisering av
% potensial.
% Gunnar Taraldsen,28.3.1988
echo off
% Siste endring 28.3.1988, G.T.
% Siste endring 29.3.1988, G.T.

% Etter en forandring her m M_u og M_d beregnes p nytt.
Mberegn_u=0;Mberegn_d;

% Navn p rutiner som initierer parametre for de respektive potensial.
Potensial=['deltai_u'
   'deltdi_u'
   'firkti_u'];
```

```
echo on
% Spesifisering av basis innenfor [xmin_u,xmax_u) gir potensialets
% lengde L=xmax_u-xmin_u.
echo off

xmin_u=input('xmin_u=');xmax_u=input('xmax_u=');L=xmax_u-xmin_u;

echo on
% N kommer spesifiseringen av de enkelte potensial.
% Ved  anngi en z_u(i)<=z_u(i-1), z_u(i)>=xmax_u
% eller en z_u(i)<xmin_u, s avsluttes utsprringen.
%
echo off

N_u=0;
z_u(1)=input(['Posisjon z_u(1) i [',num2str(xmin_u),',',num2str(xmax_u),...
') til potensial 1, z_u(1)=']);

flerepot=(z_u(1)>=xmin_u)&(z_u(1)<xmax_u);

echo on
% Type_u=1 gir delta-potensial.
% Type_u=2 gir deltaderivert-potensial.
% Type_u=3 gir firkant-potensial.
%
echo off

% Logisk variabel som bekrefter at urenhet er spesifisert.
Urenhtin=flerepot;

while flerepot
N_u=N_u+1;

% Nullstiller de andre potensialparametre for  sikre lik dimensjon!
nulla_u;

Type_u(N_u)=0;
while ( (Type_u(N_u)>3)|(Type_u(N_u)<1) )
Type_u(N_u)=input(['Type_u(',num2str(N_u),')=']);
end
Pvalg = Potensial(Type_u(N_u),:);
eval(Pvalg);

z_u(N_u+1)=input(['Posisjon z_u(',num2str(N_u+1),') i (',...
num2str(z_u(N_u)),',',num2str(xmax_u),') til potensial ',num2str(N_u+1),...
', z_u(',num2str(N_u+1),')=']);
```

```
flerepot=( (z_u(N_u+1)>z_u(N_u))&(z_u(N_u+1)<xmax_u) );
end;

%clear z_u(N_u+1);
%*****************************************************************
% Fil: POTPLOT.M
echo on
% Plot=1 gir illustrasjon av det periodiske gitter.
% Plot=2 gir illustrasjon av urenheten.
% Plot=3 gir illustrasjon av det defekte periodiske gitter.
echo off

Nmeny=3;
Potensial=['pltperio'
   'plturenh'
   'pltdefek'];

Plot=0;
while (Plot<1)|(Plot>Nmeny);
Plot=input('Plot=');
end;

Potensial=Potensial(Plot,:);
eval(Potensial);
pause;
%*****************************************************************
% Fil: DRPERIO
% Serverer meny for drfting av periodisk gitter.

while 1
Nmeny=5;
Ameny= ['initmenu'
'genspplt'
'dispersj'
'saxonhut'
'keyboard'];
Ahelp= ['help initmenu'
'help genspplt'
'help dispersj'
'help saxonhut'
'help keyboard'];
clc
help drperlst
n = input('Velg et alternativ: ');
if ((n <-Nmeny) | (n > Nmeny))
break
```

```
end
if n==0
 break
end;
if n>0
Ameny = Ameny(n,:);
eval(Ameny)
else
Ahelp=Ahelp(-n,:);
eval(Ahelp)
end
end
%**********************************************************************
% Fil: PRDEFMNU.M
echo off
% Meny for enklere bruk av MATLAB rutiner i forbindelse
% med diplomoppgaven: 'Schrdinger likningen for endimensjonal
% bevegelse i et periodisk potensial med defekter'.
% Her kan man velge mellom predefinerte problem,
% f.eks. deltaurenhet i periodisk deltapotensial.

% Gunnar Taraldsen,06.04.1988
% Siste endring 06.4.1988, G.T.

%clear

while 1
Nmeny=7;
Ameny= ['initmenu'
'ddplot  '
'dkrplot '
'dddplot '
'ddkrplot'
'dspeplot'
'keyboard'];
Ahelp= ['help initmenu'
'help ddplot  '
'help dkrplot '
'help dddplot '
'help ddkrplot'
'help dspeplot'
'help keyboard'];
clc
help drprelst
n = input('Velg et alternativ: ');
if ((n <-Nmeny) | (n > Nmeny))
break
```

```
end
if n==0
 break
end;
if n>0
Ameny = Ameny(n,:);
eval(Ameny)
else
Ahelp=Ahelp(-n,:);
eval(Ahelp)
pause;
end
end
%clear
%clc

% DRPERIOD.
%\input{rutiner4}

% FIL: GENSPPLT.M
% Plott av abs(p) eller cos(k) for det periodiske potensial.
% abs(p) velges hvis Absp=1.
% Absp er logisk variabel som bestemmer om abs(p) (1) eller cos(k) (0)
% eller bare den rette delen av abs(p) (2) skal
% benyttes ved illustrasjon av spekter.

echo off
% Siste endring 29.3.1988, G.T.
% Siste endring 11.4.1988, G.T.
i=sqrt(-1);

% Returnerer elementene M_11,M_12,M_21,M_22 i kolonne 1-4.
% Antall rader blir lik Kdim.
if ~Mberegn_p
[M_p,Mberegn_p]=msammens(Alpha_p,Beta_p,V_0_p,l_p,z_p,Type_p,N_p,K,Kdim);
end;

% cos(k)
p=(M_p(:,1).*exp(-i*K*a)+M_p(:,4).*exp(i*K*a))/2;

clg;hold off;

if (Absp==1)
p=p+sqrt(p.^2-1);
p=abs(p);
axis([Krmin Krmax yminabsp ymaxabsp]);
plot(Kr,p);
```

```
hold on;
grid;
xlabel('Kr/pi');ylabel('abs(p)');
elseif (Absp==2)
p=p+sqrt(p.^2-1);
p=abs(p);
[Krband,Nband]=krband(p,Kr,Kdim);
axis([Krmin Krmax yminabsp ymaxabsp]);
hold on;
spektplo(Krband,Nband,0);
hold on;
grid;
xlabel('Kr/pi');%ylabel('abs(p)');
else
axis([Krmin Krmax ymincosk ymaxcosk]);
plot([Krmin, Krmax], [1 1], 'b');
hold on;
grid;
plot([Krmin, Krmax], [-1 -1], 'b');
plot(Kr,p);
xlabel('Kr/pi');ylabel('cos(k)');
end;

if ~Saxonp
 pause;
end;
%*********************************************************************
% FIL: DISPERSJ.M
% For plotting av dispersjonsrelasjonen E=E(k)=K^2.
%
% Pbegynt 21.1.87, Gunnar Taraldsen.
%
% Siste endring: 12.04.88,Gunnar Taraldsen.

%Setter energi- og styrke-intervall samt colAlpha(.).
%init;

i=sqrt(-1);

% Returnerer elementene M_11,M_12,M_21,M_22 i kolonne 1-4.
% Antall rader blir lik Kdim.
if ~Mberegn_p
[M_p,Mberegn_p]=msammens(Alpha_p,Beta_p,V_0_p,l_p,z_p,Type_p,N_p,K,Kdim);
end;

% cos(k)
p=(M_p(:,1).*exp(-i*K*a)+M_p(:,4).*exp(i*K*a))/2;
```

```
% k/pi.
k=real(acos(p))/pi;

clg;hold off;

ylabel('k/pi'),xlabel('E/pi^2');
hold on;

axis([(K(1)/pi).^2,(K(Kdim)/pi).^2,0,1]),grid,plot((K/pi).^2,k);
pause;
%meta met\dispplot;
%hold off;

%*********************************************************************
% FIL: SAXONHUT.M
% Plott av abs(p) for de substitusjonelle periodiske potensial.

echo off
% Siste endring 30.3.1988, G.T.
i=sqrt(-1);

% Frst plottes det spesifiserte periodiske potensial.
cAbsp=Absp;
Absp=1;Saxonp=1;
gensppplt;
Absp=cAbsp;Saxonp=0;

hold on;grid;
%Deretter plottes de 'rene' periodiske.
for iS=1:N_p
Alpha_s=ones(z_p)*Alpha_p(iS);
Beta_s=ones(z_p)*Beta_p(iS);
V_0_s=ones(z_p)*V_0_p(iS);
l_s=ones(z_p)*l_p(iS);
Type_s=ones(Type_p)*Type_p(iS);

% Returnerer elementene M_11,M_12,M_21,M_22 i kolonne 1-4.
% Antall rader blir lik Kdim.
[M_s,Mberegn_s]=msammens(Alpha_s,Beta_s,V_0_s,l_s,z_p,...
 Type_s,N_p,K,Kdim);

% cos(k)
p=(M_s(:,1).*exp(-i*K*a)+M_s(:,4).*exp(i*K*a))/2;
p=p+sqrt(p.^2-1);
p=abs(p);
axis([Krmin Krmax yminabsp ymaxabsp]);
```

```
plot(Kr,p+(iS-1/2-N_p/2)*Saxon,'w');
end;
pause;
%*************************************************************************
%  -----MENY FOR GT'S DIPLOM 1987-1988   -----
%
% 1) Initiering av diverse variable.
%
% 2) Illustrerer gap i spekter ved plott av abs(p) eller cos(k).
%
% 3) Plotter dispersjonsrelasjonen E(k).
%
% 4) For  teste Saxon-Hutner konjekturen.
%
% 5) MATLAB kommandoer. Avsluttes med CTRL-Z.
%
% 0) Avslutt.
%
% Mere forklaring til alternativene finnes ved  svare med
% negativt tall. -1 <CR> gir f.eks. mere opplysninger om valg 1.
%*************************************************************************
%*************************************************************************
% Fil: MSAMMENS.M
function [Ms,Mberegn]=msammens(Alpha,Beta,V_0,l,z,Type,N,K,Kdim);
% Beregner M-matrisen.

Mberegn=1;
fprintf('M tilsvarende %4.0f potensial beregnes for %4.0f energiverdier..',N,Kdim);
% Hvis dette gr bra !!!!!
Mpot=['mdelta(Alpha(j),K(i))      '
      'mdeltade(Beta(j),K(i))     '
      'mfirkant(V_0(j),l(j),K(i))'];
I=[1 0
   0 1];

% Beregner for alle K-verdier.
for i=1:Kdim
% Bygger opp M,j.m.f. STYKKEVIS KONSTANT POTENSIAL I EN DIMENSJON.
M=I;
for j=1:N-1;
Mk=eval(Mpot(Type(j),:));
M=M*Mk;
T=tmatrise(z(j)-z(j+1),K(i));
M=M*T;
end;
j=N;
MN=eval(Mpot(Type(j),:));
```

```
M=M*MN;
T=tmatrise(-z(1),K(i));
M=T*M;
T=tmatrise(z(N),K(i));
M=M*T;

% Svaret...
Ms(i,1)=M(1,1);Ms(i,2)=M(1,2);Ms(i,3)=M(2,1);Ms(i,4)=M(2,2);
end;

%*************************************************************************
function M=tmatrise(z, K)
%function M=tmatrise(z, K)
%Returnerer T-matrisen for translasjon.
i=sqrt(-1);
M(1,2)=0;
M(1,1)=exp(i*K*z);
M(2,2)=exp(-i*K*z);
M(2,1)=0;
%*************************************************************************

%*************************************************************************
function M=mdelta(alpha, K)
%function M=mdelta(alpha, K)
%Returnerer M-matrisen for deltapotensial.
i=sqrt(-1);
M(1,2)=i*alpha/(2*K);
M(1,1)=1+M(1,2);
M(2,1)=-M(1,2);
M(2,2)=1-M(1,2);
%*************************************************************************

%*************************************************************************
function M=mdeltade(beta, K)
%function M=mdeltade(beta, K)
%Returnerer M-matrisen for deltaderivert-potensial.
i=sqrt(-1);
M(1,2)=i*beta*K/2;
M(1,1)=1-M(1,2);
M(2,1)=-M(1,2);
M(2,2)=1+M(1,2);
%*************************************************************************

%*************************************************************************
function M=mfirkant(V_0,l, K)
%function M=mfirkant(V_0,l, K)
%Returnerer M-matrisen for firkant-potensial.
```

```
i=sqrt(-1);
K1=sqrt(K^2-V_0);
eps=K1/K+K/K1;
eta=K1/K-K/K1;
K=l*K;
K1=l*K1;
Cos=cos(K1);
Sin=sin(K1);
Exp=exp(K*i);
M(1,2)=-i*eta*Sin/2;
M(1,1)=(Cos-i*eps*Sin/2)*Exp;
M(2,1)=-M(1,2);
M(2,2)=(Cos+i*eps*Sin/2)/Exp;
%*********************************************************************

%*********************************************************************
% FIL: KRBAND.M
function [Krband,Nband]=krband(Abs_p,Kr,Kdim)
% function [Krgap,Nband]=krgap(Abs_p,Kr,Kdim)
% Beregner spektralbnd ut fra abs(p).

Krband=[];
% Hvis kolonner s omgjr til rader.
[m,n]=size(Abs_p);
if m>n
transpA=1;Abs_p=Abs_p';
end;
[m,n]=size(Kr);
if m>n
transpK=1;Kr=Kr';
end;

% 1'ere der hvor spekteret er.
q=(abs(Abs_p-1)<(eps*10));

% (+/-)1'ere der hvor bndkantene er.+1 starter et bnd.
q=[q,0]-[0,q];
q=q(1:Kdim);

% Indeks til bndkanter.
istart=find(q==1);
islutt=find(q==-1);islutt=islutt-1;

% Hvor i spekteret har vi kommet inn? Hvis dette virker......
if isempty([istart,islutt])
Krband(1,1)=Kr(1);Krband(2,1)=Kr(Kdim);
elseif isempty(istart)
```

```
Krband(1,1)=Kr(1);Krband(2,1)=islutt;
elseif isempty(islutt)
Krband(1,1)=istart;Krband(2,1)=Kr(Kdim);
elseif (istart(1)<=islutt(1))
if (length(istart)>length(islutt))
Krband(1,:)=Kr(istart);Krband(2,:)=[Kr(islutt),Kr(Kdim)];
elseif (length(istart)==length(islutt))
Krband(1,:)=Kr(istart);Krband(2,:)=Kr(islutt);
end;
else (istart(1)>islutt(1))
if (length(istart)<length(islutt))
Krband(1,:)=[Kr(1),Kr(istart)];Krband(2,:)=Kr(islutt);
elseif (length(istart)==length(islutt))
Krband(1,:)=[Kr(1),Kr(istart)];
Krband(2,:)=[Kr(islutt),Kr(Kdim)];
end;
end;

Nband=length(Krband(1,:));

% Bytt tilbake.
if transpA==1;
Abs_p=Abs_p';
end;
if transpK==1;
Kr=Kr';
end;
%*********************************************************************
%*********************************************************************

%*********************************************************************
% FIL: SPEKTPLO.M
function [dum]=spektplo(Krband,Nband,alpha)
%function [dum]=spektplo(Krband,Nband,alpha)
% Plotter horisontale linjer i spekteret i ykoordinat alpha.

% For alle band.
for iband=1:Nband
plot([Krband(1,iband),Krband(2,iband)],[alpha,alpha]);
end;
dum=1;
%*********************************************************************
% FIL: BANDSPLI.M
%function [dum]=bandspli(Nb,SAlpha,Nspline,Krspline,Alpha)
% For  f trukket SPLINES gjennom bndkantene har jeg mtte
% ty til en halvmanuell metode.
% Etter  ha tegnet opp bndene velges alternativet "MATLAB KOMMANDOER".
```

```
% Gi kommandoen : hold on;
% Gi kommandoen : shg;
% Noter nummeret Nb(j) til nsket bndkant tilsvarende Alpha(j).
% Disse er nummerert fra venstre (1,2,..).
% SAlpha er indeksen til de riktige Alpha verdier.
%
% Valget Nb=[2 2 2 3 3 3] og SAlpha=[1 2 3 4 5 6]  vil gi
% SPLINE gjennom kant 2 for de tre laveste Alpha(1:3) og gjennom
% kant 3 for de tre hyeste Alpha(4:6).
%
% Gi kommandoen : bandspli(Nb,SAlpha,Nspline,Krspline);
% Nspline gir totalt antall beregnede punkter ved tegning av SPLINE.
% N br den riktige spline bli tegnet opp. Prosessen gjentas
% hvis nskelig!
%
% Husk at grafikkbildet kan lagres ved :meta <filnvn.>; !!!!!

n=length(SAlpha);
xi=Alpha(SAlpha(1)):(Alpha(SAlpha(n))-Alpha(SAlpha(1)))/(Nspline-1):...
Alpha(SAlpha(n));
Kband=diag(Krspline(SAlpha,Nb));
Kband=Kband';
yi=spline(Alpha(SAlpha),Kband,xi);
plot(yi,xi);
%*********************************************************************


% PRDEFMNU
%\input{rutiner5}

%**************************************************************
% FIL: DDPLOT.M
% Ser p tilfellet med urenhet beta*delta og periodisk (periode=1)
% alpha*delta.
% For plotting av funksjon som gir hvilket gap som inneholder egenverdier.
%
% Variable inn er alpha, z, K. Disse kan med fordel settes via
% initier.m
%
% Plotter kritisk funksjon sammen med spekter for  se
% urenhetsnivet i gapene.

% Gunnar Taraldsen, 13.2.1988
%
% Siste endring,06.04.1988

[D_d,Abs_p,P12]=ddegen(z,alpha,K);
```

```
clg;
% Yint er intervallet for styrken p deltaurenheten, beta.
axis([Krmin,Krmax,Yint(1),Yint(length(Yint))]);
grid;
hold on;
% Beregner energiband.
[Krband,Nband]=krband(Abs_p,Kr,Kdim);

% Plotter horisontale linjer i spekteret i ykoordinat 0.
spektplo(Krband,Nband,0);

% Plotter urenhetsniv i gap.
for j=1:Nband
if (j>1)
Krc=Krband(2,j-1):...
(Krband(1,j)-Krband(2,j-1)):Krband(1,j);
else
Krc=Krmin:...
(Krband(1,j)-Krmin):Krband(1,j);
end;
Krc=nvektor(Krc',Kdim*2/Nband);
Kc=kcomplex(Krc*pi);
[D_d,Abs_p,P12]=ddegen(z,alpha,Kc);
plot(Krc,D_d,'w');
% plot(Krc,D_d,'.r');
end;

xlabel('Kr/pi');
ylabel('Beta_n(Kr)');
%title(['alpha=',num2str(alpha),'  z=',num2str(z)]);

%Hvis kopiering til Grafikkfil er bekreftet.
if Kopi==1
meta met\ddplot
end;
pause;
hold off;
%*************************************************************
% FIL: DDEGEN.M
function [D_d,Abs_p,Nevn]=ddegen(z,alpha,K)
%function [D_d,Abs_p]=ddegen(z,alpha,K)
%Kritisk funksjon for egenverdier i gap.
%Denne dekker tilfellet : deltaurenhet i periodisk deltapotensial.

D_d=cos(K)+alpha*sin(K)./(2*K);
Fortegn=sign(D_d);
```

```
Abs_p=abs(D_d+sqrt(D_d.^2-1));
D_d=2*sqrt(D_d.^2-1);
Nevn=(sin(K)+alpha*sin(K*(1-z)).*sin(K*z)./K)./K;
D_d=-Fortegn.*D_d./Nevn;

%*****************************************************************
% FIL: DKRPLOT.M
% Ser p tilfellet med urenhet beta*delta og periodisk (periode=1)
% alpha*delta.
% For plotting av funksjon som gir hvilket gap som inneholder egenverdier
% ved uendelig styrke.
%
% Variable inn er alpha, z, K. Disse kan med fordel settes via
% initier.m
%
% Plotter kritisk funksjon sammen med spekter for  se
% urenhetsnivet i gapene.

% Gunnar Taraldsen, 13.2.1988
%
% Siste endring,06.04.1988

% For  sikre initiering.
%if (Inidelta~=1)
% dini;
%end;

[D_d,Abs_p,Nevn]=ddegen(z,alpha,K);

ymax=min([max(Nevn),-min(Nevn)]);ymin=-ymax;
clg;
axis([Krmin,Krmax,ymin,ymax]);
grid;
hold on;
plot(Kr,Nevn,'r');
% Beregner energiband.
[Krband,Nband]=krband(Abs_p,Kr,Kdim);
% Plotter horisontale linjer i spekteret i ykoordinat 0.
spektplo(Krband,Nband,0);

xlabel('Kr/pi');
ylabel('P12');
title(['alpha=',num2str(alpha),'  z=',num2str(z)]);

%Hvis kopiering til Grafikkfil er bekreftet.
if Kopi==1
meta met\dkrplot
```

```
end;
pause;
hold off;
%*****************************************************************
% FIL: DDDplot.m
% Ser p tilfellet med urenhet beta*deltaderivert og periodisk (periode=1)
% alpha*delta.
% For plotting av funksjon som gir hvilket gap som inneholder egenverdier.
%
% Variable inn er alpha, z, K. Disse kan med fordel settes via
% initier.m
%
% Plotter kritisk funksjon sammen med spekter for  se
% urenhetsnivet i gapene.

% Gunnar Taraldsen, 13.2.1988
%
% Siste endring,06.04.1988
% Siste endring,12.04.1988

[D_d,Abs_p,P21]=dddegen(z,alpha,K);

clg;
% Yint er intervallet for styrken p deltaurenheten, beta.
axis([Krmin,Krmax,Yint(1),Yint(length(Yint))]);
grid;
hold on;
% Beregner energiband.
[Krband,Nband]=krband(Abs_p,Kr,Kdim);

% Plotter horisontale linjer i spekteret i ykoordinat 0.
spektplo(Krband,Nband,0);

% Plotter urenhetsniv i gap.
for j=1:Nband
if (j>1)
Krc=Krband(2,j-1):...
(Krband(1,j)-Krband(2,j-1)):Krband(1,j);
else
Krc=Krmin:...
(Krband(1,j)-Krmin):Krband(1,j);
end;
Krc=nvektor(Krc',Kdim*2/Nband);
Kc=kcomplex(Krc*pi);
[D_d,Abs_p,P21]=dddegen(z,alpha,Kc);
plot(Krc,D_d,'w');
% plot(Krc,D_d,'.r');
```

```
end;

xlabel('Kr/pi');
ylabel('Beta_n(Kr)');
%title(['alpha=',num2str(alpha),'  z=',num2str(z)]);

%Hvis kopiering til Grafikkfil er bekreftet.
if Kopi==1
meta met\dddplot
end;
pause;
hold off;
%*****************************************************************
% FIL: DDDEGEN.M
function [D_d,Abs_p,Nevn]=dddegen(z,alpha,K)
%function [D_d,Abs_p]=ddegen(z,alpha,K)
%Kritisk funksjon for egenverdier i gap.
%Denne dekker tilfellet : deltaurenhet i periodisk deltapotensial.

D_d=cos(K)+alpha*sin(K)./(2*K);
Fortegn=sign(D_d);
Abs_p=abs(D_d+sqrt(D_d.^2-1));
D_d=2*sqrt(D_d.^2-1);
Nevn=(-K.*sin(K)+alpha*cos(K*(1-z)).*cos(K*z));
D_d=-Fortegn.*D_d./Nevn;
%*****************************************************************

%*****************************************************************
% FIL: DDKRPLOT.m
% Ser p tilfellet med urenhet beta*deltaderivert og periodisk (periode=1)
% alpha*delta.
% For plotting av funksjon som gir hvilket gap som inneholder egenverdier
% ved uendelig styrke.
%
% Variable inn er alpha, z, K. Disse kan med fordel settes via
% initier.m
%
% Plotter kritisk funksjon sammen med spekter for  se
% urenhetsnivet i gapene.

% Gunnar Taraldsen, 13.2.1988
%
% Siste endring,06.04.1988
% Siste endring,12.04.1988

% For  sikre initiering.
%if (Inidelta~=1)
```

```
% dini;
%end;

[D_d,Abs_p,Nevn]=dddegen(z,alpha,K);

ymax=min(max(Nevn),-min(Nevn));
ymin=-ymax;
if Yaks
ymin=Yint(1);ymax=Yint(length(Yint));
end;
clg;
axis([Krmin,Krmax,ymin,ymax]);
grid;
hold on;
plot(Kr,Nevn,'r');
% Beregner energiband.
[Krband,Nband]=krband(Abs_p,Kr,Kdim);
% Plotter horisontale linjer i spekteret i ykoordinat 0.
spektplo(Krband,Nband,0);

xlabel('Kr/pi');
ylabel('P21');
title(['alpha=',num2str(alpha),'  z=',num2str(z)]);

%Hvis kopiering til Grafikkfil er bekreftet.
if Kopi==1
meta met\ddkrplot
end;
pause;
hold off;
%*************************************************************
% FIL: DSPEPLOT.M
% Plotter spekter som funksjon av styrken alpha til det periodiske
% deltapotensial.
% Verdiomrdet til alpha er gitt ved vektoren Alpha.
%
% Gunnar Taraldsen, 07.04.1988
%
% Siste endring,07.04.1988

NAlpha=length(Alpha);
clg;hold off;
axis([Krmin,Krmax,Alpha(1),Alpha(NAlpha)]);
plot([Krmin,Krmax],[0 0]);
grid;
hold on;
```

```
Krband=[];Krspline=[];
for j=1:NAlpha
if (Alpha(j)~=0)
[D_d,Abs_p,Nevn]=ddegen(z,Alpha(j),K);

% Beregner energiband.
[Krband,Nband]=krband(Abs_p,Kr,Kdim);

% Plotter horisontale linjer i spekteret i ykoordinat Alpha(j).
spektplo(Krband,Nband,Alpha(j));

% Tar vare p koordinatene til energiband.
if (j>1)
Nbandnu=length(Krspline(j-1,:))/2;
if (Nbandnu>Nband)
Krspline=Krspline(:,[1:Nband,(Nband+2):(2*Nband+1)]);
elseif (Nbandnu<Nband)
Krband=Krband(:,[1:Nbandnu]);
end;
end;
Krspline(j,:)=[Krband(1,:),Krband(2,:)];
end;
end;

xlabel('Kr/pi');
ylabel('alpha');
%title(['Spekter til periodisk deltapotensial.']);

% Sorterer koordinatene til energiband.
Nbandnu=length(Krspline(1,:))/2;
ind=[1:Nbandnu;(1:Nbandnu)+Nbandnu];
ind=ind(:);
Krspline=Krspline(:,ind);

%Hvis kopiering til Grafikkfil er bekreftet.
if Kopi==1
meta met\dspeplot
end;
pause;
hold off;
%*****************************************************************
%*****************************************************************
```

B.2 Noen Matlab rutiner utenom hovedprogrammet

```
% Fil: VS.M
```

```
% For figur b11-b16.
% Gunnar Taraldsen,24.3.1988
function VS=vs(Alpha, Beta, z, Kappa)
VS=Alpha*Beta*(exp(-2*Kappa*z)-1);

%*********************************************************************

% Fil: HS.M
% For figur b11-b16.
% Gunnar Taraldsen,24.3.1988
function HS=hs(Alpha, Beta, Kappa)
Alpha=(Alpha+Beta)/2;
HS=(2*Kappa+Alpha)^2-Alpha^2;

%*********************************************************************

% Fil: B1116.M
% For figur b11-b16.
% Gunnar Taraldsen,24.3.1988

hold off;
clg;
axis([0 10 -10 10]);
x=0:.1:10;
for i=1:length(x) y(i)=vs(Alpha, Beta, z, x(i)); end;
plot(x,y);
for i=1:length(x) y(i)=hs(Alpha, Beta, x(i)); end;
hold on;
plot(x,y);
xlabel('Kappa=sqrt(-E)');
ylabel('VS, HS');
grid;
plot(x,-Alpha*Beta.*ones(x),'g');
```

Del VI

Referanseliste

Bibliografi

[1] Arnol'd, V.I.: Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Springer, 1983.

[2] Ashcroft, Neil W. and Mermin, N. David: Solid State Physics. Holt-Saunders International Editions, 1981.

[3] A.O., Barut: Electrodynamics and Classical Theory of Fields and Particles. Dover, 1980.

[4] Berthier, A.M. Spectral theory and wave operators for the Schrödinger equation. Research Notes in Mathematics 71, Pitman Advanced Publishing Program, 1982.

[5] Ebbinghaus,H.D.,Flum,J.,Thomas,W.: Mathematical Logic. Springer, 1984.

[6] Frielander, F.G.: Introduction to the theory of distributions. Cambridge University Press, 1982.

[7] Hemmer, Per C.: Faste Stoffers Fysikk 1. Kompendium NTH, Vår 1986.

[8] Hemmer, Per C.: Kvantemekanikk. Tapir, 1980.

[9] Albeverio,S.,Gesztesy, F.,Høegh-Krohn, R., Holden, H.: Solvable Models in Quantum Mechanics. Springer, 1988.

[10] Jauch,M. Josef: Foundations of Quantum Mechanics. Addison Wesley, 1968.

[11] Kato,Tosio: A short introduction to pertubation theory for linear operator. Springer, 1982.

[12] Kreyzig,Erwin: Introductory Functional Analysis with Applications, Wiley, 1978.

[13] Merzbacher, Eugene: Quantum Mechanics. second edition, Wiley International Edition, 1970.

[14] Naimark, M.A.: Linear Differential Operators. Ungar, New York 1968.

[15] Olsen,Haakon: Theory of fields. Kompendium,AVH.

[16] Ramond, Pierre: Field Theory, A Modern Primer. Benjamin/Cummings, 1981.

[17] Reed, Michael /Simon, Barry: Methods of modern mathematical physics. bind I-IV. Academic Press, 1978.

[18] Rottmann, Karl:Mathematische Formelsammlung.
B.I. Hochschultaschenbücher,Band 13,1960.

[19] Royden, H.L.: Real Analysis. Macmillan, 1964.

[20] Rudin, Walter: Real and Complex analysis. McGraw-Hill, 1987.

[21] Strang, Gilbert: Linear Algebra and Its Applications. Harcourt Brace Jovanovich, 1980.

[22] Thirring, Walter: A Course in Mathematical Physics 3; Quantum Mechanics of Atoms and Molecules. Springer, 1979.

[23] Weidmann, Joachim: Linear Operators in Hilbert Spaces, Springer-Verlag, 1980.

[Dö] Döhler, G.H.: Solid-State Superlattices, Sci.Am.(s.118-126), Nov. 1983.

[GHK] Gesztesy,F. ,Holden,H., Kirsch, W.: On energy gaps in a new type of analytically solvable model in quantum mechanics. J. Math. Anal. Appl., to appear.

[GH] Gesztesy,F. ,Holden,H.: A new class of solvable models in quantum mechanics describing point interactions on the line. J.Phys. A.:Math. Gen. 20(s.5157-5177), 1987.

[Ke] Kerner,E.H.: Periodic impurities in a periodic lattice. Phys.Rev.95(s.687-689), 1954.

[KP] Kronig,R.L.,Penney,W.G.: Quantum Mechanics of electrons in crystal lattices. Proc. Roy. Soc.(London)A130(s.499), 1931.

[SH] Saxon, D.S.,Hutner, R.A.: Some electronic properties of a one-dimensional crystal model. Philips Res. Rep. 4.(s.81-122). 1949.

[Si1] Siedentop,Heinz K. H.: Dilation Analytic Methods. Proc. 8th. Autumn School on Few Body Physics, Lisbon, 1986.

[Si2] Siedentop,Heinz K. H.: On the localization of Resonances. International Journal of Quantum Chemistry, vol.XXXI,ppp-ppp, 1987.

[SP] Schrum, D.C.,Peat, F.D.: Localized states of a one-dimensional crystal model. Physica 39(s.94-106), 1968.

[SS] Sah, P.,Srivastava, K.P.: A generalized diatomic Kronig-Penney model. Physica 43(s.528-532), 1969.

[Ta] Tamm, I.: Über eine mögliche Art der Electronenbindung an Kristalloberflächen, Phys. Z. Sowjet 1(s.733-746), 1933.