Schrödingeroperator mit einer auf einem Rotationsellipsoid konzentrierten Wechselwirkung

Gerald Teschl

Diplomarbeit,
verfaßt am
Institut für Theoretische Physik
der Technischen Universität Graz
unter der Betreuung von
Doz. Dr. Wolfgang Bulla

Mai 1993

Inhaltsverzeichnis

0.0 Danksagungen

Ich möchte mich bei den Herrn Doz. Dr. Wolfgang Bulla, Prof. Dr. Bernhard Schnizer, Doz. Dr. Ferdinand Schürrer und Dr. Karl Unterkofler für die Vielzahl von Hilfestellungen während meines ganzen Studiums bedanken.

Weiters möchte ich mich auch bei meiner Mutter Edeltrude Teschl und meiner Freundin Susanne Timischl für ihren positiven Einflußauf meinen Werdegang bedanken.

0.1 Einleitung

Punktwechselwirkungen (oder δ–Potentiale) sind ein in der Quantenmechanik beliebtes Modell, da sie den Vorteil besitzen, analytisch lösbar zu sein. Sie finden sich deshalb auch in beinahe jedem Buch über Quantenmechanik. Die Wechselwirkung ist formal durch folgenden Hamiltonoperator gegeben (in geeigneten Koordinaten und Einheiten):

$$\mathrm{H} = -\Delta + \sum_y \alpha_y \delta_y(.)$$

Dabei bezeichnet y den Ort des Potentials, α_y seine Stärke und $\delta_y(.)$ die Diracsche Deltadistribution. Eine (mathematisch exakte) Behandlung dieses Problems mit Hilfe der Distributionentheorie ist mühsam, es gibt jedoch eine einfachere (und vor allem dem Hilbertraum–Konzept der Quantenmechanik angepaßte) Methode, diese Wechselwirkungen zu beschreiben: Die Theorie der selbstadjungierten Fortsetzungen von Operatoren ([WD] Kapitel 8). Eine umfassende Beschreibung der Lösung von Punktwechselwirkungen mit Hilfe dieser Methode findet sich in [AG].

Eine Zwischenbemerkung: Bei der Separation des Laplace–Operators in (z.B.:) Kugelkoordinaten zeigt sich, daßdie entstehenden Differentialoperatoren nicht wesentlich selbstadjungiert sind und es verschiedene Möglichkeiten für Randbedingungen gibt. Es werden dann verschiedene (oft nicht stichhaltige) Argumente gebracht, welche Randbedingungen nun ¨richtig¨ sind. Eine einfache Überlegung zeigt jedoch, daßdie durch Separation gefundenen Eigenfunktionen zumindest stetig sein müssen, damit der Laplace–Operator überhaupt auf sie anwendbar ist (Das beinhaltet auch die periodischen Randbedingungen für den φ-Anteil ([SW] Kap. 5.3) und damit die Ganzzahligkeit des Bahndrehimpulses!). Eine andere Wahl der Randbedingung kann zu Punktwechselwirkungen führen. Vergleiche dazu [SW] Kap. 6.1 S 110 (und [AG] für die mathematischen Einzelheiten).

Eine Weiterführung des obigen Modells ist es, auf Flächen konzentrierte Potentiale zu betrachten. Dabei wurde jedoch bis jetzt nur der kugelsymmetrische Fall behandelt. Vergleiche [ag] für den Schrödingeroperator und [de1], [de2] für den Diracoperator. Deshalb war es das Ziel dieser Arbeit, Verallgemeinerungen des kugelsymmetrischen Problems zu finden. Es wurde daher versucht, ein auf der Oberfläche eines Rotationsellipsoids konzentriertes Potential (funktionalanalytisch) zu beschreiben, da für diesen Fall die Separierbarkeit des Problems erhalten bleibt.

Die physikalische Motivation für dieses Modell kommt hauptsächlich aus der Kernphysik [gm] (für weitere Literaturangaben und andere Anwendugsmöglichkeiten siehe [ag]). Da versucht wurde Kernkräfte damit zu beschreiben, ist die Erweiterung auf Ellipsenschalen naheliegend.

In Abschnitt 1 wurde die freie Schrödingergleichung in sphäroidalen Koordinaten separiert. Da keine Ergebnisse (wie sie für die weitere funktionalanalytische Behandlung notwendig sind) über die Lösung der freien Schrödingergleichung in diesen Koordinaten gefunden werden konnten, wurde dieses Problem zuerst betrachtet. Es wurde die Selbstadjungiertheit der bei der Separation auftretenden Operatoren, ihre Resolventen, Spektren, Vollständigkeit der Eigenfunktionen und Klassen von relativkompakten Störpotentialen untersucht. Die wesentlichen Unterschiede (und zugleich mathematischen Schwierigkeiten) liegen darin, daßdas Volumselement (1.4) nicht faktorisiert und die bei der Separation entstehenden Gleichungen (1.12) und (1.13) kompliziert verkoppelt sind. Der erste führt dazu, daßes keinen einfachen Zusammenhang zwischen dem ursprünglichen Raum (2.1) und dem Tensorprodukt der bei der Separation entstehenden Räume (2.5) gibt. Der zweite bewirkt, daßman nicht mehr ein einfaches Eigenwertproblem der Form $\mathrm{T}f = zf$, sondern eines der Form $\mathrm{T}(z)f = zf$ erhält.

In Abschnitt 2 wurde dann die δ–Wechselwirkung eingeführt und untersucht. Es wurden zunächst elementare Eigenschaften wie Selbstadjungiertheit, Gestalt von Resolvente und Spektrum bewiesen. Als nächstes wurde gezeigt, wie die δ–Wechselwirkung als Grenzwert von skalierten Potentialen erhalten werden kann, woraus eigentlich erst die physikalische Signifikanz dieses Modells hervorgeht: Die auf einem Rotationsellipsoid konzentrierte Wechselwirkung ist eine Näherung für ein hohes, nur in einer kleinen Umgebung des Rotationsellipsoides wesentlich von Null verschiedenen Potentials.

In Abschnitt 3 wurden dann noch einige Resultate über das H_2^+–Ion (fixe Kerne) gesammelt, die sich großteils aus den vorangehenden Kapiteln ergaben.

Im Anhang befindet sich eine Zusammenfassung der Weyl–Titchmarsch–Theorie über die Selbstadjungiertheit von Sturm–Liouville–Operatoren mit einem etwas einfacheren Beweis für die Selbstadjungiertheit bei getrennten Randbedingungen.

Als Ausblick wäre noch festzuhalten, daßes wahrscheinlich kein Problem darstellt, die Ergebnisse auf endlich viele konzentrische Rotationsellipsoide zu erweitern, wie dies für den kugelsymmetrischen Fall in [sh] gemacht wurde. Es ist auch möglich, die δ–Wechselwirkung mit anderen Potentialen (z.B. jene aus Abschnitt 3) zu kombinieren (vgl. [ag]).

0.2 Bezeichnungen

Funktionentheorie:

i	... imaginäre Einheit ($\mathrm{i} = \sqrt{-1}$)
$\overline{z}$	... zu $z \in \mathbb{C}$ konjugiert komplexe Zahl
$\mathrm{Re}(z)$	... Realteil von z
$\mathrm{Im}(z)$	... Imaginärteil von z
$\lvert z \rvert$	... Betrag von z
$\arg(z)$	... Argument von $z = \lvert z \rvert \exp(\mathrm{i} \arg(z))$ mit $0 \leq \arg(z) < 2\pi$
z^ρ	... komplexe Potenz: $z = \exp(\rho \ln \lvert z \rvert + \mathrm{i}\rho \arg(z))$

Funktionalanalysis (vgl. [WD]):

$\mathfrak{H}$	... Hilbertraum
$\langle .,. \rangle$	... Skalarprodukt
$\Vert . \Vert$	... Norm
$\Vert . \Vert_{HS}$	... Hilbert-Schmidt-Norm
$\mathfrak{L}\{.\}$	... $\mathfrak{L}\{f_1, \ldots\}$ lineare Hülle der Vektoren $f_1, \ldots$
$\oplus$	... direkte Summe von Hilberträumen
$\otimes$	... Tensorprodukt von Hilberträumen
T	... Operator im Hilbertraum
$\mathfrak{D}(\mathrm{T})$	... Definitionsbereich von T
$\mathfrak{K}(\mathrm{T})$	... Nullraum von T
$\mathfrak{R}(\mathrm{T})$	... Wertebereich von T
$\overline{\mathrm{T}}$	... Abschlußvon T
T^*	... zu T adjungierter Operator
T^{-1}	... zu T inverser Operator
$\mathrm{R}_z(\mathrm{T})$	... Resolvente $(\mathrm{T} - z)^{-1}$
$\mathrm{R}(.,.)$	... Kern des Integraloperators R
$\rho(\mathrm{T})$	... Resolventenmenge von T
$\sigma(\mathrm{T})$	... Spektrum von T
$\sigma_{ess}(\mathrm{T})$	... wesentliches Spektrum
$\sigma_{ac}(\mathrm{T})$	... absolut stetiges Spektrum
$\sigma_{sc}(\mathrm{T})$	... singulär stetiges Spektrum
$\sigma_p(\mathrm{T})$	... Punkt–Spektrum
$\sigma_{disc}(\mathrm{T})$	... diskretes Spektrum
$\mathfrak{H}_{ac}(\mathrm{T})$	... absolut stetiger Teilraum von $\mathfrak{H}$ bezüglich T
$\mathfrak{H}_{sc}(\mathrm{T})$	... singulär stetiger Teilraum von $\mathfrak{H}$ bezüglich T
$\mathfrak{H}_p(\mathrm{T})$	... unstetiger Teilraum von $\mathfrak{H}$ bezüglich T

Räume komlexwertiger Funktionen:

$\mathrm{L}^2(\Omega)$ ... Menge der auf dem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ quadratintegrablen Funktionen
$\mathrm{L}^2(\Omega, r)$ ... Menge der auf dem Intervall $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ bezüglich der Gewichtsfunktion r quadratintegrablen Funktionen
$\mathrm{L}^2(I)$ ... Menge der auf dem Intervall $I \subset \mathbb{R}$ quadratintegrablen Funktionen
$\mathrm{L}^2(I, r)$ ... Menge der auf dem Intervall $I \subset \mathbb{R}$ bezüglich der Gewichtsfunktion r quadratintegrablen Funktionen
$\mathrm{L}^2_{loc}(I)$ ... Menge der auf jedem kompakten Teilintervall $\hat{I} \subset I$ quadratintegrablen Funktionen
$\mathrm{L}^2_0(I)$ ... Menge der quadratintegrablen Funktionen, die außerhalb eines kompakten, von der Funktion abhängigen, Intervalls $\hat{I} \subset I$ identisch verschwinden
$\mathrm{L}^1(I)$ ... Menge der auf I integrierbaren Funktionen
$\mathrm{L}^1_{loc}(I)$ ... Menge der auf jedem kompakten Teilintervall $\hat{I} \subset I$ integrablen Funktionen
$\mathrm{L}^\infty(I)$ ... Menge der auf I beschränkten, meßbaren Funktionen
$\mathrm{C}(I)$ ... Menge der auf I stetigen Funktionen
$\mathrm{C}^\infty_0(I)$ ... Menge der beliebig oft differenzierbaren Funktionen, die außerhalb eines kompakten, von der Funktion abhängigen, Intervalls $\hat{I} \subset I$ identisch verschwinden
$\mathrm{AC}(I)$ ... Menge der auf dem Intervall $I \subset \mathbb{R}$ absolut stetigen, Funktionen
$\mathrm{AC}^1(I)$ ... Menge der Funktionen mit $f, f' \in \mathrm{AC}(I)$
$\mathrm{AC}_{loc}(I)$ ... Menge der auf jedem kompakten Teilintervall $\hat{I} \subset I$ absolut stetigen Funktionen
$\mathrm{AC}_0(I)$ ... Menge der absolut stetigen Funktionen, die außerhalb eines kompakten, von der Funktion abhängigen, Intervalls $\hat{I} \subset I$ identisch verschwinden
$\mathrm{AC}^1_{loc}(I)$ ... Menge der Funktionen mit $f, f' \in \mathrm{AC}_{loc}(I)$
$\mathrm{AC}^1_0(I)$ ... $\mathrm{AC}_0(I) \cap \mathrm{AC}^1(I)$

Abkürzungen:

GKF ... Grenzkreisfall
GPF ... Grenzpunktfall
RB ... Randbedingung
s.e.c. ... *salvo errore calculi* (mit Vorbehalt eines Rechenfehlers)

Abschnitt 1

Lösung der freien Schrödingergleichung in sphäroidalen Koordinaten

1.1 Separation der freien Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung in kartesischen Koordinaten (und geeigneten Einheiten) lautet:

$$-\Delta\Psi + \mathrm{V}\,\Psi = k^2\Psi \qquad \Psi(x,y,z) \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad k^2 \in \mathbb{C} \tag{1.1}$$

Der Laplace–Operator ist durch

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{1.2}$$

gegeben. In diesem Abschnitt sollen ihre Lösungen in (gestreckt) sphäroidalen Koordinaten untersucht werden. Diese lauten [MS] [MF]:

$$\begin{aligned} x &= a\,\sinh\rho\sin\vartheta\cos\varphi = a\,\sqrt{\xi^2-1}\sqrt{1-\eta^2}\cos\varphi \\ y &= a\,\sinh\rho\sin\vartheta\sin\varphi = a\,\sqrt{\xi^2-1}\sqrt{1-\eta^2}\sin\varphi \\ z &= a\,\cosh\rho\cos\vartheta = a\,\xi\,\eta \end{aligned} \tag{1.3}$$

mit $a > 0$ und

$$\rho \in [0,\infty),\ \vartheta \in [0,\pi]\ \varphi \in [0,2\pi) \text{ bzw. } \xi \in [1,\infty),\ \eta \in [-1,1],\ \varphi \in [0,2\pi)$$

Das Volumselement lautet:

$$\begin{aligned} dx\,dy\,dz &= a^3(\sinh^2\rho + \sin^2\vartheta)\sinh\rho\sin\vartheta\,d\rho\,d\vartheta\,d\varphi \\ &= a^3(\cosh^2\rho - \cos^2\vartheta)\sinh\rho\sin\vartheta\,d\rho\,d\vartheta\,d\varphi \\ &= a^3(\xi^2-\eta^2)d\xi\,d\eta\,d\varphi \end{aligned} \tag{1.4}$$

Die Koordinatenflächen $\xi = const$ sind gestreckte Rotationsellipsoide mit Brennpunkten bei $z = \pm a$. Abgeflachte Rotationsellipsoide können durch die Substitution $a \to -ia$ und $\xi \to i\xi$ bzw. $\cosh\rho \to i\sinh\rho$ erhalten werden. Damit (1.1) separiert werden kann, muß das Potential V die folgende Gestalt besitzen [MF]:

$$V = \frac{W_1(\cosh\rho) + W_2(\cos\vartheta)}{\cosh^2\rho - \cos^2\vartheta} + \frac{W_3(\varphi)}{\sinh\rho\sin\vartheta} \tag{1.5}$$

mit willkürlichen Funktionen W_i $i = 1, 2, 3$. Führt man die Abstände von den Brennpunkten r_1, r_2 ein ($\cosh\rho = (r_1 + r_2)/2a, \cos\vartheta = (r_1 - r_2)/2a$), so erhält man die physikalisch aussagekräftigere Form:

$$V = \frac{a^2\left(W_1(\frac{r_1+r_2}{2a}) + W_2(\frac{r_1-r_2}{2a})\right)}{r_1r_2} + \frac{4a^2\,W_3(\varphi)}{\sqrt{8a^2(r_1^2 + r_2^2) - (r_1^2 - r_2^2)^2 - 16a^4}} \tag{1.6}$$

Man erkennt, daß insbesondere Potentiale der Form $V = C_1/r_1 + C_2/r_2$ in die Gestalt (1.6) gebracht werden können (vgl. [MF] Übungsbeispiel 5.3). Der Laplace–Operator ist in diesen Koordinaten durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{a^2(\sinh^2\rho + \sin^2\vartheta)}\left[\frac{1}{\sinh\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\sinh\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \right.\\ &\quad \left.\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + (\frac{1}{\sinh^2\xi} + \frac{1}{\sin^2\eta})\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\\ &= \frac{1}{a^2(\xi^2 - \eta^2)}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2 - 1)\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta}(1 - \eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta} + \right.\\ &\quad \left.(\frac{1}{\xi^2 - 1} + \frac{1}{1 - \eta^2})\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\end{aligned} \tag{1.7}$$

Es soll nun die freie Schrödingergleichung ($V = 0$) untersucht werden. Dazu werden zunächst Produktlösungen der folgenden Form gesucht:

$$\begin{aligned}\Psi(x, y, z) &= \Psi(a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\cos\varphi, a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\sin\varphi, a\xi\eta)\\ &= \hat{\Psi}(\xi, \eta, \varphi) = J(\xi)S(\eta)\Theta(\varphi)\end{aligned} \tag{1.8}$$

Einsetzen von Ansatz (1.8) in (1.1) mit $V = 0$ unter Verwendung von (1.7) ergibt drei gewöhnliche Differentialgleichungen für die Funktionen $J(\xi), S(\eta), \Theta(\varphi)$:

$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2 - 1)\frac{d}{d\xi}J - [\lambda - \gamma^2(\xi^2 - 1) + \frac{m^2}{\xi^2 - 1}]J = 0 \tag{1.9}$$

$$\frac{d}{d\eta}(1 - \eta^2)\frac{d}{d\eta}S + [\lambda + \gamma^2(1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2}]S = 0 \tag{1.10}$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\Theta + m^2\Theta = 0 \tag{1.11}$$

mit $\gamma = ak$. λ bzw. m^2 bezeichnen die Separationsparameter. Man beachte, daß die beiden Gleichungen für J und S identisch sind.
Umschreiben zeigt, daß drei (verkoppelte) Sturm–Liouville Probleme vorliegen:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{a^2(\xi^2-1)}\left[-\frac{d}{d\xi}(\xi^2-1)\frac{d}{d\xi}+\lambda+\frac{m^2}{\xi^2-1}\right]J &= k^2 J \qquad \xi\in(1,\infty) \qquad (1.12)\\
\left[-\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta}-\gamma^2(1-\eta^2)+\frac{m^2}{1-\eta^2}\right]S &= \lambda S \qquad \eta\in(-1,1) \qquad (1.13)\\
-\frac{d^2}{d\varphi^2}\Theta &= m^2\Theta \qquad \varphi\in(0,2\pi) \qquad (1.14)
\end{aligned}$$

Diese sollen in den nächsten drei Punkten der Reihe nach untersucht werden.

1.2 Untersuchung des $\Theta(\varphi)$–Anteils

Gleichung (1.14) zeigt, daß der folgende Operator untersucht werden muß:

$$\begin{aligned}
\mathrm{T}:\mathfrak{D}(\mathrm{T})\subset \mathrm{L}^2(0,2\pi) &\to \mathrm{L}^2(0,2\pi)\\
u &\mapsto \mathrm{T}u=-u''
\end{aligned} \qquad (1.15)$$

Die Randbedingungen, die T zu einem selbstadjungierten Operator in $\mathrm{L}^2(0,2\pi)$ machen sind längst bekannt und werden analog zum kugelsymmetrischen Fall gewählt:

$$\begin{aligned}
\mathfrak{D}(\mathrm{T})=\{u\in \mathrm{L}^2(0,2\pi)|\quad & u\in \mathrm{AC}^1(0,2\pi),\ u''\in \mathrm{L}^2(0,2\pi),\\
& u(0)=u(2\pi), u'(0)=u'(2\pi)\}
\end{aligned} \qquad (1.16)$$

Anmerkungen: $u(0)=\lim_{\varepsilon\downarrow 0}u(0+\varepsilon) \quad u(2\pi)=\ldots$
Diese Wahl der Randbedingungen gewährleistet, daß (beim Übergang von sphäroidalen auf kartesische Koordinaten) die Anwendung des Laplace–Operators auf die Funktion $\Psi = JS\Theta$ (vgl. Gl. (1.8)) überhaupt sinnvoll möglich ist.

Satz 1.1 *Der Operator* T *ist auf* $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert. Das Spektrum ist zweifach und rein diskret:*

$$\sigma(\mathrm{T})=\sigma_{disc}(\mathrm{T}) \qquad (1.17)$$

Die Eigenwerte m^2 und dazugehörigen (normierten) Eigenfunktionen u_m lauten:

$$\mathrm{T}u_m=m^2u_m \qquad u_m(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx} \qquad \textit{mit } m\in\mathbb{Z} \qquad (1.18)$$

Die Funktionen $u_m(x)$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem für den Hilbertraum $\mathrm{L}^2(0,2\pi)$.

Beweis: Diese Tatsachen folgen aus der (regulären) Sturm–Liouvilleschen Theorie. **s.e.c.**

1.3 Untersuchung des $S(\eta)$–Anteils

Aus Gleichung (1.13) ersieht man, daß der zu untersuchende Operator lautet:

$$\begin{aligned} \mathrm{T} : \mathfrak{D}(\mathrm{T}) \subset \mathrm{L}^2(-1,1) &\rightarrow \mathrm{L}^2(-1,1) \\ u &\mapsto \mathrm{T}u = \tau u \end{aligned} \tag{1.19}$$

$$\tau u = -((1-x^2)u')' - \gamma^2(1-x^2)\,u + \frac{m^2}{1-x^2}u \qquad \gamma^2 \in \mathbb{R}, m^2 \in \mathbb{N}_0 \tag{1.20}$$

Man beachte, daß man für $\gamma = 0$ die Legendre–Differentialgleichung erhält. Es liegt also ein singulärer Sturm–Liouvillescher Differentialausdruck vor:

$$\tau u = \frac{1}{k}(-(p\,u')' + q\,u) \tag{1.21}$$

$$p(x) = 1 - x^2 \qquad q(x) = -\gamma^2(1-x^2) + \frac{m^2}{1-x^2} \qquad k(x) \equiv 1 \tag{1.22}$$

Beide Endpunkte $x_0 = \pm 1$ sind singulär, und um den Operator T selbstadjungiert zu machen, stellt sich die Frage, ob bzw. welche Randbedingungen notwendig sind. Dazu werden zuerst die Endpunkte nach Weyl klassifiziert (Definition A.1). Da die Koeffizienten $p(x), q(x)$ analytische Funktionen sind, und die Lösungen der Differentialgleichung sich nach verallgemeinerten Potenzreihen entwickeln lassen, kann ein Kriterium aus [JR] (3.8 Satz 1) verwendet werden. Danach liegt bei $x_0 = \pm 1$ genau dann der Grenzkreisfall vor, wenn folgende Bedingung erfüllt ist:

$$n_0 > (1-\sigma)^2 + 4\frac{q_0}{p_0} \tag{1.23}$$

Dabei sind die Zahlen σ, p_0 und q_0 aus den Reihenentwicklungen für $p(x)$ bzw. $q(x)$ um $x_0 = \pm 1$ zu entnehmen:

$$p(x) = (x-x_0)^{\sigma} \sum_{\ell=0}^{\infty} p_\ell\,(x-x_0)^\ell \qquad \Rightarrow \quad p_0 = \mp 2 \quad \sigma = 1 \tag{1.24}$$

$$q(x) = (x-x_0)^{\sigma-2} \sum_{\ell=0}^{\infty} q_\ell\,(x-x_0)^\ell \qquad \Rightarrow \quad q_0 = \mp\frac{m^2}{2} \tag{1.25}$$

$$k(x) = (x-x_0)^{\sigma-2} \sum_{\ell=0}^{\infty} k_\ell\,(x-x_0)^\ell \qquad \Rightarrow \quad \ell_0 = 1 \tag{1.26}$$

k_{n_0} ist der erste nichtverschwindende Koeffizient der Entwicklung von $k(x)$. Damit erhält man unter Verwendung von (1.23) folgende Bedingung:

$$m^2 < 1 \quad \Rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{lcl} m = 0 & : & \text{Grenzkreisfall} \\ m \neq 0 & : & \text{Grenzpunktfall} \end{array} \right. \qquad m \in \mathbb{N}_0 \tag{1.27}$$

Es ist also nur im Fall $m = 0$ eine Randbedingung (RB) notwendig (Satz A.5). Der Definitionsbereich wird wie folgt gewählt:

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}(\mathrm{T}) = \{u \in \mathrm{L}^2(-1,1) |\quad u \in \mathrm{AC}^1_{loc}(-1,1),\ \tau u \in \mathrm{L}^2(-1,1), \\ \text{RB für } m = 0\} \end{aligned} \tag{1.28}$$

Das Auffinden einer geeigneten Randbedingung ist also das nächste Ziel. Der hier gewählte Zugang entspricht dem in [JR]. Vergleiche dazu auch Anhang A. Für eine etwas heuristischere Darstellung vgl. [ST], in dem auch die nichtfunktionalanalytischen Methoden von [TM] beschrieben werden. Dazu wird zunächst das Verhalten der Lösung der Differentialgleichung

$$\tau\, u = \lambda\, u \tag{1.29}$$

in der Nähe der singulären Punkte $x_0 = \pm 1$ untersucht. Da die Differentialgleichung, wie bereits erwähnt, einen Reihenansatz gestattet, soll dieser nun durchgeführt werden. Die Gleichung für die charakteristischen Exponenten lautet (vgl. z.B.: [JR] S 152):

$$\rho^2 + (a_0 - 1)\rho + b_0 = \rho^2 - \frac{m^2}{4} = 0 \quad \Rightarrow \quad \rho_{2,1} = \pm\frac{m}{2} \tag{1.30}$$

mit $a_0 = \lim\limits_{x\to\pm1}(x \mp 1)\dfrac{p'(x)}{p(x)} = 1$ und $b_0 = \lim\limits_{x\to\pm1}(x \mp 1)^2\dfrac{\lambda - q(x)}{p(x)} = \dfrac{-m^2}{4}$

Es gilt $\rho_2 - \rho_1 = m \in \mathbb{N}_0$, daher gibt es ein Fundamentalsystem der folgenden Form (vgl. wiederum [JR]):

$$\begin{aligned} u_1(x) &= (x - x_0)^{m/2} \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell\, (x - x_0)^\ell \\ u_2(x) &= (x - x_0)^{-m/2} \sum_{\ell=0}^{\infty} d_\ell\, (x - x_0)^\ell + c\, u_1(x) \ln(x - x_0) \end{aligned} \tag{1.31}$$

Allgemein gilt $d_m = 0$ und $c_0 \neq 0$. Für $m \neq 0$ ist $d_0 \neq 0$, und für $m = 0$ ist sicher $c \neq 0$. Der Koeffizient c ist ein Polynom in λ und γ^2 (und zwar in λ und γ zusammen vom Grad m) und kann rekursiv berechnet werden (vgl. [MX]). Man erkennt auch sofort, daß nur für $m = 0$ beide Lösungen im Hilbertraum liegen. Jede Funktion u aus dem Definitionsbereich von T (ohne RB) kann (Vorliegen des Grenzkreisfalls vorausgesetzt) in der Nähe von x_0 in der Form:

$$\begin{aligned} u(x) &= u_1(x)\{C_1 + \phi_1(x)\} + u_2(x)\{C_2 + \phi_2(x)\} \\ u'(x) &= u_1'(x)\{C_1 + \phi_1(x)\} + u_2'(x)\{C_2 + \phi_2(x)\} \end{aligned} \tag{1.32}$$

mit u_1, u_2 aus (1.31) und $\phi_{1,2}$ absolut stetig, $\phi_{1,2}(x_0) = 0$ dargestellt werden (vgl. (A.11) und (A.10)). Die beiden komplexen Zahlen C_1, C_2 sind eindeutig bestimmt, und die Randbedingung läßt sich mit ihnen wie folgt ausdrücken:

$$C_1 \cos\alpha + C_2 \sin\alpha = 0 \qquad \alpha \in [\,0, \pi) \tag{1.33}$$

oder, für die Praxis geeigneter:

$$W(u_1, u)_{x_0} + A\, W(u_2, u)_{x_0} = 0 \tag{1.34}$$

mit $W(u, v)_{x_0} = \lim\limits_{x\to x_0} p(x)(u(x)v'(x) - u'(x)v(x))$

Da für die Darstellung (1.32) ja nur das Verhalten der Lösungen u_1, u_2 in der Nähe von x_0 von Bedeutung ist, kann man endgültig schreiben:

$$W(1, u(x))_{x_0} + \hat{A}\, W(\ln(x - x_0), u(x))_{x_0} = W(1 + \hat{A}\, \ln(x - x_0), u(x))_{x_0} =$$
$$\lim_{x \to x_0} [\hat{A}(u(x) - (x - x_0)u'(x) \ln(x - x_0)) - (x - x_0)u'(x)] = 0 \tag{1.35}$$

Um für $\gamma = 0$ wiederum Bekanntes zu erhalten, wird $\hat{A} = 0$ gewählt. Vergleiche auch die Argumentation beim $\Theta(\varphi)$–Anteil. Damit lautet $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ nun:

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}) = \{u \in \mathrm{L}^2(-1,1) | \quad \begin{array}{l} u \in \mathrm{AC}^1_{loc}(-1,1),\ \tau u \in \mathrm{L}^2(-1,1), \\ \lim_{x \to \pm 1}(1 \mp x)u'(x) = 0 \text{ für } m = 0\} \end{array} \tag{1.36}$$

Wie man aus (1.31) und (1.32) ersieht, ist die angegebene Randbedingung mit der in der physikalischen Literatur üblichen Stetigkeitsforderung an den Randpunkten äquivalent (vgl. Bemerkung nach Lemma 1.2). Aus der Konstruktion des Operators T ergibt sich folgender

Satz 1.2 *Der Operator* T *ist auf* $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert.*

Beweis: Satz A.5 **s.e.c.**

Als nächstes ist natürlich das Spektrum $\sigma(\mathrm{T})$ des Operators von Interesse. Dazu soll die Resolvente des Operators untersucht werden:

Satz 1.3 *Die Resolvente* $\mathrm{R}_\lambda(\mathrm{T})$ *ist ein Integraloperator mit folgendem Kern:*

$$\mathrm{R}_\lambda(x, x') = \frac{u_+(x_>)u_-(x_<)}{W(u_+, u_-)} \qquad \lambda \in \rho(\mathrm{T}) \tag{1.37}$$

mit $x_> = \mathrm{Max}(x, x') \quad x_< = \mathrm{Min}(x, x')$ *und*

$$W(u_+, u_-) = (1 - x^2)(u_+(x)u_-'(x) - u_+'(x)u_-(x)) \neq 0$$

Für $u_\pm$ *gilt* $u_\pm, u_\pm' \in AC_{loc}(-1,1)$, *es erfüllt die Differentialgleichung*

$$\tau u_\pm = \lambda u_\pm$$

und u_+ (u_-) *erfüllt die Randbedingung bei* $+1(-1)$ *für* $m = 0$ *bzw. ist für* $m \neq 0$ *in der Nähe von* $+1(-1)$ *quadratintegrierbar.*

Beweis: Satz A.5 **s.e.c.**

Bemerkung: Es gilt $\mathrm{R}_\lambda(x, x') = \mathrm{R}_\lambda(x', x)$ und $\mathrm{R}_\lambda(., c) = \mathrm{R}_\lambda(c, .) \in \mathrm{L}^\infty(-1,1)$ $(c \in (-1,1)$ konstant)
Wir beweisen nun zwei kleine Lemmata, die wir benötigen.

Lemma 1.1 *Für beliebige* $V \in \mathrm{L}^2(-1,1)$ *gilt:*

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} |V(x)\mathrm{R}_\lambda(x, x')|^2 dx\, dx' < \infty \tag{1.38}$$

Beweis: Aus der Darstellung (1.31) und der Tatsache, daß $u_\pm$ in der Nähe von ± 1 stetig ist, und daß $u_\pm$ bei ∓ 1 nicht stetig sein darf (da $u_\pm$ sonst in $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ liegen würde und damit Eigenfunktion wäre), folgt:

$$
\begin{aligned}
|u_\pm| &< const\,(1\mp x)^{\frac{m}{2}} \quad \text{für} \quad x \in \begin{matrix}(0,1)\\(-1,0)\end{matrix}\\
|u_\pm| &< \begin{cases} const\ \ln(1\pm x) & m=0\\ const\ (1\pm x)^{-\frac{m}{2}} & m>0\end{cases} \quad \text{für} \quad x\in(-1,1)
\end{aligned}
$$

Daraus folgt weiter durch Quadrieren:

$$
\begin{aligned}
|u_\pm|^2 &< const\,(1\mp x)^{m} \quad \text{für} \quad x \in \begin{matrix}(0,1)\\(-1,0)\end{matrix}\\
|u_\pm|^2 &< \begin{cases} const\ \ln^2(1\pm x) & m=0\\ const\ (1\pm x)^{-m} & m>0\end{cases} \quad \text{für} \quad x\in(-1,1)
\end{aligned}
$$

Es ist nun

$$
\begin{aligned}
&\int_{-1}^{1} |V(x)|^2 f_1(x)dx < \infty \quad \text{mit} \quad f_1(x) = |u_+(x)|^2 \int_{-1}^{x} |u_-(x')|^2 dx'\\
&\int_{-1}^{1} |V(x)|^2 f_2(x)dx < \infty \quad \text{mit} \quad f_2(x) = |u_-(x)|^2 \int_{x}^{1} |u_+(x')|^2 dx'
\end{aligned}
$$

zu zeigen. Da $f_{1,2}$ in $(-1,1)$ stetig sind, genügt es, das Verhalten an den Randpunkten zu untersuchen:

$$
\begin{aligned}
f_1(x) &< const\,(1-x)^m \int_{-1}^{x} \begin{matrix}\ln^2(1-x')\\(1-x')^{-m}\end{matrix}\, dx' && \begin{matrix}m=0\\m>0\end{matrix}\\
&< const && x\in(0,1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
f_1(x) &< const\ \begin{matrix}\ln^2(1-x)\\(1-x)^{-m}\end{matrix} \int_{-1}^{x}(1-x')^m dx' && \begin{matrix}m=0\\m>0\end{matrix}\\
&< const && x\in(-1,0)
\end{aligned}
$$

f_1 ist also beschränkt und daher gilt $|V|^2 f_1 \in \mathrm{L}^1(-1,1)$. Analog zeigt man $|V|^2 f_2 \in \mathrm{L}^1(-1,1)$. **s.e.c.**

Lemma 1.2 *Alle Funktionen $f\in\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ lassen sich stetig auf die Randpunkte fortsetzen.*

Beweis: Sei $f\in\mathfrak{D}(\mathrm{T})$, dann existiert ein $g\in\mathrm{L}^2(-1,1)$ mit

$$
f(x) = u_+(x)\int_{-1}^{x} u_-(x')g(x')\,dx' + u_-(x)\int_{x}^{1} u_+(x')g(x')\,dx'
$$

Wir zeigen, daß beide Summanden in der Nähe von 1 beschränkt sind. Ein Blick auf (1.32) zeigt, daß es genügt den Fall $m > 0$ zu betrachten. Denn zusammen mit Gleichung (1.31) folgt damit die Behauptung für $m = 0, 1$.

$$\begin{aligned}
|u_+(x) \int_{-1}^{x} u_-(x')g(x')\,dx'| &< \mathit{const}\ (1-x)^{m/2} \int_{-1}^{x} (1-x')^{-m/2} |g(x')|\,dx' \\
&< \mathit{const} \int_{-1}^{x} |g(x')|\,dx' \\
&< \mathit{const}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|u_-(x) \int_{x}^{1} u_+(x')g(x')\,dx'| &< \mathit{const}\ (1-x)^{-m/2} \int_{x}^{1} (1-x')^{m/2} |g(x')|\,dx' \\
&< \mathit{const} \int_{x}^{1} |g(x')|\,dx' \\
&< \mathit{const}
\end{aligned}$$

Analog zeigt man, daß $f(x)$ bei -1 beschränkt ist. **s.e.c.**

Bemerkung: Der Definitonsbereich von T kann also auch wie folgt charakterisiert werden:

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}) = \{u \in \mathrm{L}^2(-1,1) | u \in \mathrm{AC}(-1,1),\ u' \in \mathrm{AC}_{loc}(-1,1),\ \tau u \in \mathrm{L}^2(-1,1)\} \tag{1.39}$$

Wir können nun zwei Sätze beweisen:

Satz 1.4 *Die Resolvente des Operators* $\mathrm{R}_\lambda(\mathrm{T})$ *ist ein Hilbert–Schmidt–Operator*

Beweis: Man wähle in Lemma 1.1 $V \equiv 1$. **s.e.c.**

Also kann man festhalten:

Korollar 1.4 *Es folgt insbesondere, daß die Resolvente kompakt ist, das Spektrum rein diskret und die Eigenfunktionen vollständig.*

$$\sigma(\mathrm{T}) = \sigma_{disc}(\mathrm{T}) \tag{1.40}$$

Das Spektrum ist einfach.

Satz 1.5 *Sei* $V \in \mathrm{L}^2(-1,1)$ *reellwertig, dann ist* V *relativkompakt bezüglich* T. *Der Operator*

$$\mathrm{T} + \mathrm{V} \tag{1.41}$$

ist auf $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert und für das wesentliche Spektrum gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}) = \sigma_{ess}(\mathrm{T} + \mathrm{V}) \tag{1.42}$$

Das Spektrum ist also weiterhin rein diskret und einfach.

Beweis: Wegen Lemma 1.2 gilt $\mathfrak{D}(\mathrm{T}) \subset \mathfrak{D}(\mathrm{V})$, der Rest folgt dann aus Lemma 1.1, [RS] Satz XIII.14 und den darauffolgenden Korollaren 1 und 2. **s.e.c.**

Nun stellt sich die Frage, inwieweit diese Ergebnisse für nichtreelles γ^2 gültig bleiben. Dazu wird γ^2 in Real– und Imaginärteil zerlegt, und der Imaginärteil als Störung betrachtet:

$$\hat{\mathrm{T}} = \mathrm{T} + \mathrm{iM} \tag{1.43}$$

$$\hat{\tau} u = -((1-x^2)u')' - \mathrm{Re}(\gamma^2)(1-x^2)\,u + \frac{m^2}{1-x^2}u - \mathrm{i}\,\mathrm{Im}(\gamma^2)(1-x^2)\,u \tag{1.44}$$

Da M beschränkt ist ($\|\mathrm{M}\| = 1$), kann $\mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}) = \mathfrak{D}(\mathrm{T})$ gewählt werden, und es folgt sofort, daß $\hat{\mathrm{T}}$ abgeschlossen ist, und der adjungierte Operator durch $\hat{\mathrm{T}}^* = \mathrm{T} - \mathrm{iM}$ mit $\mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^*) = \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}})$ gegeben ist [WD] Satz 5.5 und Satz 4.20c. Man kann weiter schließen, daß die Resolvente kompakt bleibt:

Satz 1.6 *Die Resolvente von* $\hat{\mathrm{T}}$ *ist ebenfalls ein Hilbert–Schmidt–Operator.*

Beweis: Aus der zweiten Resolventengleichung ([WD] Satz 5.13 c) folgt

$$\mathrm{R}_\lambda(\mathrm{T} + \mathrm{i}\,\mathrm{M}) = \mathrm{R}_\lambda(\mathrm{T})[1 - \mathrm{i}\,\mathrm{M}\,\mathrm{R}_\lambda(\mathrm{T} + \mathrm{i}\,\mathrm{M})] \tag{1.45}$$

Da die Menge der Hilbert–Schmidt–Operatoren ein zweiseitiges Ideal (bezüglich der beschränkten Operatoren) bildet und M beschränkt ist, folgt die Behauptung. **s.e.c.**

Aus der Darstellung (1.45) ersieht man auch, daß die Voraussetzungen von [GK] Satz 8.1 erfüllt sind:

Satz 1.7 *Die verallgemeinerten Eigenfunktionen des Operators* $\hat{\mathrm{T}}$ *sind vollständig.*

Als verallgemeinerte Eigenfunktion zum Eigenwert λ bezeichnet man dabei Funktionen, die

$$(\hat{\mathrm{T}} - \lambda)^n u = 0 \qquad n \in \mathbb{N}$$

erfüllen. Nun werde der Operator noch auf Liouvillesche Normalform transformiert (vgl. [DS] S 1504, [KM] Absch. 3.9). Dazu führen wir unitäre Operatoren U ein:

$$\begin{aligned} \mathrm{U} : \mathrm{L}^2(-1,1) &\rightarrow \mathrm{L}^2(0,\pi) \\ u(x) &\mapsto f(\vartheta) = (\mathrm{U}u)(\vartheta) = \sqrt[4]{1 - x^2(\vartheta)}\,u(x(\vartheta)) \end{aligned} \tag{1.46}$$

mit

$$\vartheta(x) = \frac{\pi}{2} + \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = \arccos(-x) \quad \Rightarrow \quad x = -\cos\vartheta$$

also

$$f(\vartheta) = \sqrt{\sin\vartheta}\,u(-\cos\vartheta)$$

$$\tilde{\tau} = \mathrm{U}\tau\mathrm{U}^{-1} = -\frac{d^2}{d\vartheta^2} - \frac{1}{4} - \gamma^2\sin^2\vartheta + \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2\vartheta} \tag{1.47}$$

Die Randbedingung (1.35) geht über in

$$\lim_{\vartheta\to 0,\pi} \sqrt{\sin\vartheta}(f'(\vartheta) - \frac{f(\vartheta)}{2\sin\vartheta}) = 0$$

Man beachte, daß die charakteristischen Exponenten von (1.47) durch $\rho_{1,2} = \frac{1}{2} \pm m$ gegeben sind. Somit haben wir für $\tilde{\mathrm{T}}$:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathrm{T}} : \mathfrak{D}(\tilde{\mathrm{T}}) &\to \mathrm{L}^2(0,\pi) \\ f &\mapsto \tilde{\mathrm{T}} f = \tau f = -f'' - (\tfrac{1}{4} + \gamma^2 \sin^2\vartheta - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2\vartheta}) f \end{aligned} \tag{1.48}$$

$$\mathfrak{D}(\tilde{\mathrm{T}}) = \{ f \in \mathrm{L}^2(0,\pi) | \begin{array}{l} f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(0,\pi),\ \tilde{\tau} f \in \mathrm{L}^2(0,\pi), \\ \lim_{\vartheta \to 0,\pi} \sqrt{\sin\vartheta}(f'(\vartheta) - \frac{f(\vartheta)}{2\sin\vartheta}) = 0 \\ \text{für } m = 0 \} \end{array} \tag{1.49}$$

Nun fehlen noch die Eigenfunktionen und Eigenwerte. Die Darstellung folgt [MX] und [MF], die Bezeichnungen stimmen im wesentlichen mit [MF] überein. Aus der Kompaktheit der Resolvente (Satz 1.4) folgt sofort, daß die Eigenwerte abzählbar sind und keinen endlichen Häufungspunkt besitzen. Sie werden mit $\lambda_n^m(\gamma)$ bezeichnet und können nach Potenzen von γ^2 entwickelt werden:[1]

$$\begin{aligned} \lambda_n^m(\gamma) &= n(n+1) - \frac{1}{2}\left[1 + \frac{(2m-1)(2m+1)}{(2n-1)(2n+3)}\right]\gamma^2 + O(\gamma^4) \\ & \qquad n = m, m+1, m+2, \ldots \end{aligned} \tag{1.50}$$

Für weitere Glieder sei auf [MX] S 240 Gl. (10) verwiesen. Die dazugehörigen Eigenfunktionen werden wie folgt bezeichnet:

$$S_n^m(\gamma, x) \qquad S_n^m(0,x) = P_n^m(x) \tag{1.51}$$

($P_n^m(x)$ bezeichnet die zugeordneten Legendrepolynome.) Sie sind mit $n-m$ gerade bzw. ungerade

$$S_n^m(\gamma, -x) = (-1)^{n-m} S_n^m(\gamma, x) \tag{1.52}$$

und $S_n^m(\gamma, x)$ besitzt genau $n-m$ Nullstellen. Es erweist sich als zweckmäßig, sie nach zugeordneten Legendrepolynomen zu entwickeln:

$$S_n^m(\gamma, x) = \begin{cases} \sum\limits_{\ell=0}^{\infty} d_{2\ell}(\gamma, m, n) P_{m+2\ell}^m(x) & n-m \text{ gerade} \\ \sum\limits_{\ell=0}^{\infty} d_{2\ell+1}(\gamma, m, n) P_{m+2\ell+1}^m(x) & n-m \text{ ungerade} \end{cases} \tag{1.53}$$

Für die Entwicklungskoeffizienten findet man durch Einsetzen von (1.53) in die Differentialgleichung folgende Rekursionsrelation:[2]

$$\begin{aligned} &\frac{\ell(\ell-1)\gamma^2}{(2\ell+2m-1)(2\ell+2m-3)} d_{\ell-2} + \frac{(\ell+2m+1)(\ell+2m+2)\gamma^2}{(2\ell+2m+3)(2\ell+2m+5)} d_{\ell+2} - \\ &\quad \left[\frac{2(\ell+m)(\ell+m+1) - m^2 + 2}{(2\ell+2m+3)(2\ell+2m-1)}\gamma^2 - (\ell+m)(\ell+m+1) + \lambda\right] d_\ell = 0 \end{aligned} \tag{1.54}$$

[1] Man beachte, daß der Unterschied zwischen $\lambda_n^m(\gamma)$ bei [MF] und hier γ^2 beträgt!

[2] Man beachte, daß zwar die Rekursionsrelation nicht, die $d_\ell(\gamma, m, n)$ dennoch mit [MF] übereinstimmen!

Daraus ersieht man das asymptotische Verhalten der Koeffizienten:

$$\frac{d_\ell}{d_{\ell-2}} \approx -\left(\frac{\gamma}{2\ell}\right)^{\pm 2} \tag{1.55}$$

Für uns ist natürlich nur der negative Exponent von Interesse. Wählt man für $\lambda = \lambda_n^m(\gamma)$, so erhält man $d_\ell(\gamma, m, n)$, die wie folgt normiert werden:[3]

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+2m)!}{2\ell!} d_{2\ell}(\gamma, m, n) &= \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad n-m \text{ gerade} \\ \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+2m+1)!}{2\ell!} d_{2\ell+1}(\gamma, m, n) &= \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad n-m \text{ ungerade} \end{aligned} \tag{1.56}$$

Die Funktionen $S_n^m(\gamma, x)$ können auch nach Potenzen von γ^2 entwickelt werden (vgl. [MX] [MF]).

Satz 1.8 *Die Sphäroidfunktionen $S_n^m(\gamma, x)$ bilden für jedes $m \in \mathbb{N}_0$ und jedes $\gamma^2 \in \mathbb{R}$ ein vollständiges Orthogonalsystem. Es gilt also für beliebige Funktionen $f(x) \in \mathrm{L}^2(-1,1)$:*

$$f(x) = \sum_{n=m}^{\infty} \frac{S_n^m(\gamma, x)}{\Lambda_n^m(\gamma)} \int_{-1}^{1} S_n^m(\gamma, \xi) f(\xi) d\xi \tag{1.57}$$

$$\int_{-1}^{1} S_n^m(\gamma, \xi) S_{n'}^m(\gamma, \xi) d\xi = \Lambda_n^m(\gamma) \delta_{n,n'} \tag{1.58}$$

Beweis: Der Satz ist eine direkte Folgerung aus der Selbstadjungiertheit (Satz 1.2) und Korollar 1.4. **s.e.c.**

Eine zweite (linear unabhängige) Lösung erhält man, wenn die $P_n^m(x)$ durch zugeordnete Legendrefunktionen zweiter Art $Q_n^m(x)$ ersetzt werden. Ist m negativ, so wird

$$S_n^m(\gamma, x) = S_n^{-m}(\gamma, x) \tag{1.59}$$

festgelegt.

1.4 Untersuchung des $J(\xi)$–Anteils

Es soll nun der letzte Operator (Gl. (1.12)), der dem Radialteil des kugelsymmetrischen Falls entspricht, untersucht werden:

$$\begin{aligned} \mathrm{T} : \mathfrak{D}(\mathrm{T}) \subset \mathrm{L}^2((1,\infty); a^2(x^2-1)) &\rightarrow \mathrm{L}^2((1,\infty); a^2(x^2-1)) \\ u &\mapsto \mathrm{T}u = \tau u \end{aligned} \tag{1.60}$$

$$\tau u = \frac{1}{a^2(x^2-1)} \left[-((x^2-1)u')' + \lambda\, u + \frac{m^2}{x^2-1} u \right] \qquad \lambda \in \mathbb{R}, m^2 \in \mathbb{N}_0 \tag{1.61}$$

[3] Man beachte, daß diese Normierung in der Literatur alles andere als einheitlich ist!

Wir führen zunächst die Transformation auf Liouvillesche Normalform durch. Dazu führen wir wieder unitäre Operatoren U ein:

$$\begin{aligned} \mathrm{U} : \mathrm{L}^2((1,\infty); a^2(x^2-1)) &\rightarrow \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ u(x) &\mapsto f(y) = (\mathrm{U}u)(y) = \sqrt{x^2(y)-1}\, u(x(y)) \end{aligned} \tag{1.62}$$

mit

$$y(x) = a \int_1^x \frac{\sqrt{t^2-1}}{\sqrt{t^2-1}} dt = ax - a \qquad \Rightarrow \qquad x = \frac{y}{a} + 1$$

also

$$f(y) = \frac{\sqrt{y(y+2a)}}{a} u(\frac{y}{a}+1)$$

$$\tilde{\tau} = \mathrm{U}\tau\mathrm{U}^{-1} = -\frac{d^2}{dy^2} + \frac{\lambda}{y(y+2a)} + a^2 \frac{m^2-1}{y^2(y+2a)^2} \tag{1.63}$$

Man beachte, daß für $a = 0$ Gleichung (1.63) in den Radialteil der freien Schrödingergleichung übergeht. Der Differentialausdruck $\tilde{\tau}$ besitzt zwei singuläre Punkte bei $y = 0$ und $y = \infty$. Es stellt sich daher wieder die Frage nach geeigneten Randbedingungen. Anwendung des Kriteriums (1.23) am Punkt $y = 0$ ergibt:

$$k(y) \equiv 1, \quad p(y) \equiv 1, \quad q(y) = \frac{\lambda}{y(y+2a)} + a^2 \frac{m^2-1}{y^2(y+2a)^2}$$

$$\sigma = 0,\ n_0 = 2,\ p_0 = 1,\ q_0 = \frac{m^2-1}{4} \qquad \Rightarrow \qquad m^2 < 2$$

Also gilt:

$$m < \sqrt{2} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} m = 0,1 & : \ \text{Grenzkreisfall} \\ m > 1 & : \ \text{Grenzpunktfall} \end{cases} \qquad m \in \mathbb{N}_0$$

Für $m = 0,1$ ist bei $y_0 = 0$ eine zusätzliche Randbedingung notwendig. Es wird wiederum das Verhalten der Lösungen von

$$\tilde{\tau} f = k^2 f \tag{1.64}$$

in der Nähe des Punktes $y_0 = 0$ untersucht. Die Gleichung für die charakteristischen Exponenten lautet:

$$\rho^2 - \rho + b_0 = \rho^2 - \rho + \frac{1-m^2}{4} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \rho_{2,1} = \frac{1 \pm m}{2} \tag{1.65}$$

mit $b_0 = \lim_{y\to 0} y^2(k^2 - q(y)) = \frac{1-m^2}{4}$

Es gilt $\rho_2 - \rho_1 = m \in \mathbb{N}_0$, daher gibt es ein Fundamentalsystem der Form (1.31):

$$\begin{aligned} f_1(y) &= y^{(1+m)/2} \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell\, y^\ell \\ f_2(y) &= y^{(1-m)/2} \sum_{\ell=0}^{\infty} d_\ell\, y^\ell + c\, f_1(y) \ln(y) \end{aligned} \tag{1.66}$$

Die Randbedingung wird analog zur Vorgangsweise beim $S(\eta)$–Anteil gewählt. Und zwar so, daß $u(y/a+1) = a\, f(y)/\sqrt{y(y+2a)}$ stetig ist (vgl. Argumentation beim $\Theta(\varphi)$–Anteil).

$$\begin{aligned} m = 0: \quad & W(f_1, f)_0 = 0 \;\Rightarrow\; \lim_{y\to 0} \frac{1}{\sqrt{y}}(f - 2yf') = 0 \\ m = 1: \quad & W(f_1, f)_0 = 0 \;\Rightarrow\; \lim_{y\to 0}(f - yf') = 0 \end{aligned} \tag{1.67}$$

Die Randbedingung für $m = 1$ kann durch $f(0) = \lim_{y\to 0} f(y) = 0$ ersetzt werden (vgl. 1.32). Es verbleibt, den Endpunkt $y = \infty$ zu untersuchen. Wir schreiben die Gleichung (1.64) in der folgenden Form:

$$f'' + (k^2 - q)f = 0$$

Da $q(y) \in \mathrm{L}^1(1,\infty)$ gilt, kann daraus für $k \neq 0$ das asymptotische Verhalten der Lösung abgelesen werden:

Satz 1.9 *Für $k \neq 0$ gibt es zwei linear unabhängige Lösungen der Gleichung (1.64) mit folgendem asymptotische Verhalten:*[4]

$$f_\pm(y) = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i} k y}(1 + o(1)) \qquad \text{für } y \to \infty \tag{1.68}$$

Beweis: $f_{1,2}$ und $f_{+,-}$ können natürlich nicht linear unabhängig sein, es muß also jedes Paar als Linearkombination des anderen darstellbar sein.
Das folgt aus [NE] Satz 22.7, da die Gleichung $\rho^2 - k^2 = 0$ für $k^2 \neq 0$ zwei Lösungen $\rho_{1,2}$ mit verschiedenen Realteilen $\mathrm{Re}(\rho_1) \neq \mathrm{Re}(\rho_2)$ besitzt und $q \in \mathrm{L}^1(1,\infty)$ liegt. (Vergleiche auch [KM] [CH].) **s.e.c.**

Für $k \neq 0$ liegt also höchstens eine Lösung in $\mathrm{L}^2(1,\infty)$, und es liegt für $y = \infty$ immer der Grenzpunktfall vor (dies folgt auch aus [DS] Teil 2 Satz XIII 6.16 da $q(y)$ beschränkt ist). Es kann für $k > 0$ also auch keine Eigenwerte geben. Wir können somit den Definitionsbereich für $\tilde{\mathrm{T}}$ vollständig angeben:

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}(\tilde{\mathrm{T}}) = \{f \in \mathrm{L}^2(0,\infty) |\; & f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(0,\infty),\; \tilde{\tau} f \in \mathrm{L}^2(0,\infty); \\ & \lim\nolimits_{y\to 0}(f - 2yf')/\sqrt{y} = 0 \text{ für } m = 0; \\ & \lim\nolimits_{y\to 0} f(y) = 0 \text{ für } m = 1\} \end{aligned} \tag{1.69}$$

Es kann wiederum folgender Satz formuliert werden:

Satz 1.10 *Der Operator $\tilde{\mathrm{T}}$ ist auf $\mathfrak{D}(\tilde{\mathrm{T}})$ selbstadjungiert.*

Beweis: Satz A.5 **s.e.c.**

Als nächstes ist natürlich das Spektrum von Interesse. Aufgrund der Form von $q(y)$ ist zu erwarten, daß der Operator T durchaus Eigenwerte besitzt. Diese sind für uns aber nicht von Interesse, da λ eigentlich von k^2 abhängt. Wir beschränken uns daher auf das wesentliche Spektrum und hoffen, daß es von λ unabhängig ist.

[4] $f(x) = o(g(x)) \Leftrightarrow \lim_{x\to x_0} |f(x)/g(x)| = 0$ ... Landausymbol

Satz 1.11 *Für das wesentliche Spektrum des Operators* T *gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \qquad \sigma_{ac}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \qquad \sigma_{sc}(\mathrm{T}) = \emptyset \tag{1.70}$$

Das Spektrum ist in $\mathbb{R}\backslash\{0\}$ *einfach (insgesamt höchstens zweifach).*

Beweis: Wir zerlegen $(0,\infty) = (0,c) \cup (c,\infty)$ mit $0 < c < \infty$, schränken den Operator T auf $(0,c)$ bzw. (c,∞) ein und bezeichnen ihn mit T_- bzw. T_+. Der Randpunkt c ist sicher regulär. Es gilt nun $\sigma_{ess}(\mathrm{T}) = \sigma_{ess}(\mathrm{T}_-) \cup \sigma_{ess}(\mathrm{T}_+)$ unabhängig von den Randbedingungen bei c (Satz A.7). Aus

$$\lim_{y\to\infty} q(y) = 0$$

und [DS] Teil 2,XIII.7 Satz 16 folgt $\sigma_{ess}(\mathrm{T}_+) = [0,\infty)$. Aus Satz 1.13 folgt $\sigma_{ess}(\mathrm{T}_-) = \emptyset$. Insgesamt erhalten wir also:

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0,\infty)$$

Da $q \in \mathrm{L}^1(c,\infty)$, und jede Lösung von (1.64) nur endlich viele Nullstellen in $(0,c)$ besitzen kann (reelle charakteristische Exponenten), folgt aus [wd] Satz 5.1, daß das Spektrum in $(0,\infty)$ einfach und absolut stetig ist:

$$\sigma_{ac}(\mathrm{T}) \subset (0,\infty)$$

Da $\sigma_{ac}(\mathrm{T})$ abgeschlossen ist, und $\sigma_{ac}(\mathrm{T}) \subset \sigma_{ess}(\mathrm{T})$ gilt, folgt weiter:

$$\sigma_{ac}(\mathrm{T}) = [0,\infty)$$

Wegen $\sigma_{sc}(\mathrm{T}) \subset \sigma_{ess}(\mathrm{T})$ und der Einfachheit des Spektrums in $(0,\infty)$ muß $\sigma_{sc}(\mathrm{T}) \subset \{0\}$ sein. Wäre $\sigma_{sc}(\mathrm{T}) = \{0\}$, dann hätte $\mathrm{T}_{sc} = \mathrm{T}|_{\mathfrak{H}_{sc}}$ bei 0 einen Eigenwert im Widerspruch zur Stetigkeit:

$$\sigma_{sc}(\mathrm{T}) = \emptyset$$

Damit sind alle Behauptungen bewiesen. **s.e.c.**

Befriedigende Aussagen über das Punktspektrum können nur unter Berücksichtigung von $\lambda = \lambda_n^m(\gamma)$ gemacht werden. Wir betrachten dazu die ursprüngliche Gleichung in der gesamten komplexen Ebene:

$$\frac{d}{dz}(z^2-1)\frac{d}{dz}J - [\lambda_n^m(\gamma) - \gamma^2(z^2-1) + \frac{m^2}{z^2-1}]J = 0 \qquad z \in \mathbb{C} \tag{1.71}$$

Für $k^2 > 0$ gibt es nach dem vorigen Satz keine Eigenwerte. Sei nun $k^2 < 0$ und $J(z) \not\equiv 0$ eine bei $z = 1$ stetige Lösung der obigen Gleichung. Da die Eigenwerte $\lambda_n^m(\gamma)$ gerade so definiert sind, daß die bei $z = 1$ stetige Lösung auch bei $z = -1$ stetig ist, folgt die Stetigkeit von $J(z)$ bei $z = -1$. Da (1.71) nicht vom Vorzeichen von z abhängt, ist $J(-z)$ wieder eine bei $z = \pm 1$ stetige Lösung. Da es aber (bis auf ein Vielfaches) nur eine solche Lösung geben kann, folgt $J(-z) = \pm J(z)$. Aus Satz 1.9 und Gleichung (1.62) folgt, daß sich jede Lösung von (1.71) asymptotisch für $|z| \to \infty$ wie $(A\exp(\mathrm{i}kaz) + B\exp(-\mathrm{i}kaz))/\sqrt{z^2-1}$ verhält $(A, B \in \mathbb{C})$. Für $J(z)$ folgt sofort $A = \pm B \neq 0$. $J(z)$ kann also nicht quadratintegrabel sein, und es gibt keine Eigenfunktionen für $k^2 < 0$. Für $k^2 = 0$ ist $\gamma = 0$ und $\lambda_n^m(\gamma) = n(n+1)$

und die Gleichung stimmt mit der Legendregleichung überein. Die bei $z = 1$ stetige Lösung der Legendregleichung ist aber eine Polynom und daher sicher nicht quadratintegrabel. Wir wollen nun die Lösungen der Gleichung

$$\tilde{\tau} f = k^2 f \tag{1.72}$$

untersuchen. Wir bezeichnen jene Lösung, die bei $y = 0$ die Randbedingung erfüllt, mit:

$$je_\lambda^m(k, y) \tag{1.73}$$

Sie kann für $k^2 \in \mathbb{R}$ reell gewählt werden (da $\overline{je_\lambda^m(k, y)}$ ebenfalls die Randbedingung erfüllt, also linear abhängig ist!). Insbesondere können wir sie für $k \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ so normieren, daß für $y \to \infty$ gilt (Beachte Satz 1.9):

$$je_\lambda^m(k, y) \to \cos(ky - \delta(\lambda, k)) \qquad \text{für } y \to \infty \tag{1.74}$$

Eine zweite Lösung bezeichnen wir mit:

$$ne_\lambda^m(k, y) \tag{1.75}$$

und wählen sie so, daß für $y \to \infty$ gilt:

$$ne_\lambda^m(k, y) \to \sin(ky - \delta(\lambda, k)) \qquad \text{für } y \to \infty \tag{1.76}$$

Ihre Wronski–Determinante ist wegen (A.6) konstant und kann aus dem asymptotischen Verhalten ablesen werden:

$$je_\lambda^m(k, y) ne_\lambda^m(k, y)' - je_\lambda^m(k, y)' ne_\lambda^m(k, y) = k \tag{1.77}$$

Weiters definieren wir noch eine dritte Lösung:

$$he_\lambda^m(k, y) = je_\lambda^m(k, y) + \mathrm{i}\, ne_\lambda^m(k, y) \tag{1.78}$$

mit

$$he_\lambda^m(k, y) \to \exp(\mathrm{i}ky - \mathrm{i}\delta(\lambda, k)) \qquad \text{für } y \to \infty \tag{1.79}$$

Die Funktionen sind dabei bis auf das Vorzeichen eindeutig festgelegt. Ist $k \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, so ist diese Vorgansweise nicht mehr möglich. Wir bezeichnen jene Lösung, die bei $y = 0$ die Randbedingung erfüllt weiter mit $je_\lambda^m(k, y)$ und legen $he_\lambda^m(k, y)$ durch ihr asymptotisches Verhalten (1.79) fest (für $k^2 \neq 0$). Sind beide linear unabhängig, so fordern wir:

$$je_\lambda^m(k, y) he_\lambda^m(k, y)' - je_\lambda^m(k, y)' he_\lambda^m(k, y) = \mathrm{i}k \tag{1.80}$$

In diesem Fall sind beide Funktionen wieder bis auf das Vorzeichen eindeutig festgelegt. Wählt man für λ speziell die Werte λ_n^m, so erhält man die radialen „Eigenfunktionen“. Sie werden mit

$$je_n^m(k, y) \qquad\qquad ne_n^m(k, y) \tag{1.81}$$

bezeichnet, und man kann zeigen [MF], daß für ihr asymptotisches Verhalten gilt:

$$\begin{aligned} je_n^m(k,y) &\rightarrow \cos\left(ky - \frac{\pi}{2}(n+1) + \gamma\right) \qquad \text{für } y \rightarrow \infty \\ ne_n^m(k,y) &\rightarrow \sin\left(ky - \frac{\pi}{2}(n+1) + \gamma\right) \qquad \text{für } y \rightarrow \infty \end{aligned} \tag{1.82}$$

Unter Verwendung von Zusammenhängen zwischen zugeordneten Legendre- und sphärischen Besselfunktionen kann die Reihe (1.53) umgeformt werden [MF]:

$$\begin{aligned} je_n^m(k,y) = k\frac{(n+m)!}{(n-m)!}\frac{(y^2+2ay)^{\frac{m+1}{2}}}{(y+a)^m} \times \\ \sum_{\ell=0}^{\infty} \mathrm{i}^{2\ell+m-n} d_{2\ell}(\gamma,m,n) j_{2\ell+m}(ky+\gamma) \qquad & n-m \text{ gerade} \\ \sum_{\ell=0}^{\infty} \mathrm{i}^{2\ell+m-n+1} d_{2\ell+1}(\gamma,m,n) j_{2\ell+m+1}(ky+\gamma) \qquad & n-m \text{ ungerade} \end{aligned} \tag{1.83}$$

wobei $j_\ell(x)$ die sphärische Besselfunktion l-ter Ordnung bezeichnet. Ersetzt man $j_\ell(x)$ durch $n_\ell(x)$ (sphärische Neumannfunktion), so erhält man eine Reihe für $ne_n^m(k,x)$, die jedoch nur als asymptotische Reihe zu verstehen ist. Eine Entwicklung nach Potenzen von γ^2 ist wiederum möglich [MF]. Zum Schluß kann analog zu Satz 1.3 die Resolvente des Operators T angegeben werden:

Satz 1.12 *Die Resolvente* $\mathrm{R}_k(\mathrm{T})$ *ist ein Integraloperator mit folgendem Kern:*

$$\mathrm{R}_k(y,y') = \frac{\mathrm{i}}{k} je_\lambda^m(k,y_>)\, he_\lambda^m(k,y_<) \qquad k \in \rho(\mathrm{T}) \tag{1.84}$$

mit $y_> = \mathrm{Max}(y,y')$ $\quad y_< = \mathrm{Min}(y,y')$.

Beweis: Satz A.5 **s.e.c.**

Bemerkung: Es gilt $\mathrm{R}_k(y,y') = \mathrm{R}_k(y',y)$ und $\mathrm{R}_k(.,c) = \mathrm{R}_k(c,.) \in \mathrm{L}^1(0,\infty) \cap \mathrm{L}^\infty(0,\infty)$ ($c \in (0,\infty)$ konstant).
Wir beweisen nun wieder zwei kleine Lemmata, die wir benötigen.

Lemma 1.3 *Für beliebige* V *mit* $\mathrm{Min}(1,\sqrt{y})V(y) \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$ *gilt:*

$$\int_0^\infty\int_0^\infty |V(y)\mathrm{R}_k(y,y')|^2 dy\, dy' < \infty \tag{1.85}$$

Beweis: Aus Gleichung (1.66) und Satz 1.9 folgt:

$$\begin{aligned} |je_\lambda^m(k,y)| &< const\; y^{(1+m)/2} && \text{für } y \in (0,1) \\ |je_\lambda^m(k,y)| &< const\; \mathrm{e}^{\mathrm{Im}(k)y} && \text{für } y \in (0,\infty) \\ |he_\lambda^m(k,y)| &< \begin{cases} const\; \sqrt{y}\ln y & m=0 \\ const\; y^{(1-m)/2} & m>0 \end{cases} && \text{für } y \in (0,\infty) \\ |he_\lambda^m(k,y)| &< const\; \mathrm{e}^{-\mathrm{Im}(k)y} && \text{für } y \in (1,\infty) \end{aligned}$$

Daraus folgt weiter durch Quadrieren:

$$\begin{array}{ll}
|je_\lambda^m(k,y)|^2 < const\; y^{1+m} & \text{für } y \in (0,1) \\
|je_\lambda^m(k,y)|^2 < const\; \mathrm{e}^{2\mathrm{Im}(k)y} & \text{für } y \in (0,\infty) \\
|he_\lambda^m(k,y)|^2 < \begin{cases} const\; y \ln^2 y & m = 0 \\ const\; y^{1-m} & m > 0 \end{cases} & \text{für } y \in (0,\infty) \\
|he_\lambda^m(k,y)|^2 < const\; \mathrm{e}^{-2\mathrm{Im}(k)y} & \text{für } y \in (1,\infty)
\end{array}$$

Es ist nun

$$\int_0^\infty |V(y)|^2 f_1(y)dy < \infty \quad \text{mit} \quad f_1(y) = |he_\lambda^m(k,y)|^2 \int_0^y |je_\lambda^m(k,y')|^2 dy'$$
$$\int_0^\infty |V(y)|^2 f_2(y)dy < \infty \quad \text{mit} \quad f_2(y) = |je_\lambda^m(k,y)|^2 \int_y^\infty |he_\lambda^m(k,y')|^2 dy'$$

zu zeigen. Da $f_{1,2}$ in $(0,\infty)$ stetig sind, genügt es, das Verhalten an den Randpunkten zu untersuchen:

$$\begin{array}{rcll}
f_1(y) & < & const \begin{array}{c} y\ln^2(1-y) \\ y^{1-m} \end{array} \displaystyle\int_0^y y'^{1+m} dy' & \begin{array}{c} m = 0 \\ m > 0 \end{array} \\
& < & const\; y & \quad y \in (0,1)
\end{array}$$

$$\begin{array}{rcll}
f_1(y) & < & const\; \mathrm{e}^{-2\mathrm{Im}(k)y} \displaystyle\int_0^y \mathrm{e}^{2\mathrm{Im}(k)y'} dy' & \\
& < & const & \quad y \in (1,\infty)
\end{array}$$

Es gilt also $|V|^2 f_1 \in \mathrm{L}^1(0,\infty)$. Analog zeigt man $|V|^2 f_2 \in \mathrm{L}^1(0,\infty)$. **s.e.c.**

Lemma 1.4 *Alle Funktionen $f \in \mathfrak{D}(\mathrm{T})$ lassen sich stetig auf die Randpunkte fortsetzen. Für $y \to 0$ gilt $f(y) = O(\sqrt{y})$*[5]

Beweis: Sei $f \in \mathfrak{D}(\mathrm{T})$, dann existiert ein $g \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$ mit

$$f(y) = he_\lambda^m(k,y) \int_0^y je_\lambda^m(k,y')g(y')\,dy' + je_\lambda^m(k,y) \int_y^\infty he_\lambda^m(k,y')g(y')\,dy'$$

Wir zeigen zuerst, daß beide Summanden in der Nähe von 0 unsere Bedingung erfüllen Ein Blick auf Gleichung (1.32) zeigt, daß es genügt den Fall $m > 1$ zu betrachten. Denn zusammen mit Gleichung (1.66) folgt damit die Behauptung für $m = 0, 1$.

$$\begin{array}{rcll}
|he_\lambda^m(k,y) \displaystyle\int_0^y je_\lambda^m(k,y')g(y')\,dy'| & < & const\; y^{(1-m)/2} \displaystyle\int_0^y y'^{(1+m)/2} |g(y')|\,dy' & \\
& < & const\; y \displaystyle\int_0^y |g(y')|\,dy' & \quad y \in (0,1)
\end{array}$$

[5] $f(x) = O(g(x)) \Leftrightarrow \lim_{x\to x_0} |f(x)/g(x)| = const$ ... Landausymbol

$$
\begin{aligned}
|je_\lambda^m(k,y)\int_y^\infty he_\lambda^m(k,y')g(y')\,dy'| &< const\, y^{(1+m)/2}\Big(\int_y^1 y'^{(1-m)/2}|g(y')|\,dy' \\
&\qquad + \int_1^\infty \mathrm{e}^{-2\mathrm{Im}(k)y}|g(y')|\,dy'\Big) \\
&< const\, y \qquad\qquad\qquad\qquad y \in (0,1)
\end{aligned}
$$

Für den Endpunkt ∞ gilt:

$$f'' = (q-k^2)f - g \in \mathrm{L}^2(1,\infty)$$

Aus [WD] Satz 6.27 folgt damit: $\lim_{y\to\infty} f(y) = 0$. **s.e.c.**

Wir können nun zwei Sätze beweisen:

Satz 1.13 *Jede (selbstadjungierte) Einschränkung* T_- *von* T *auf ein endliches Intervall* $(0,c)$ *(mit* $c > 0$*) führt zu einer Hilbert–Schmidt–Resolvente und zu einem rein diskreten (einfachen) Spektrum* $\sigma(\mathrm{T}_-) = \sigma_{disc}(\mathrm{T}_-)$ *(unabhängig von den Randbedingungen bei c).*

Beweis: Man wähle in Lemma 1.3 $V \equiv 1$ und übernehme die Abschätzung für den Randpunkt 0. Der Randpunkt c ist regulär und bereitet daher keine Schwierigkeiten. $he_\lambda^m(k,y)$ ist natürlich durch eine Linearkombination von je_λ^m und he_λ^m zu ersetzen, die die Randbedingung bei c erfüllt. **s.e.c.**

Satz 1.14 *Sei V reellwertig mit* $\mathrm{Min}(1,\sqrt{y})V(y) \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$*, dann ist* V *relativkompakt bezüglich* T*. Der Operator*

$$\mathrm{T} + \mathrm{V} \tag{1.86}$$

ist auf $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert und für das wesentliche Spektrum gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}+\mathrm{V}) = \sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \tag{1.87}$$

Liegt V noch zusätzlich in $\mathrm{L}^1(0,\infty)$*, so gilt:*

$$\sigma_{ac}(\mathrm{T}+\mathrm{V}) = [0,\infty) \qquad \sigma_{sc}(\mathrm{T}+\mathrm{V}) = \emptyset \tag{1.88}$$

Das Spektrum ist in $\mathbb{R}\backslash\{0\}$ *einfach.*

Beweis: Wegen Lemma 1.4 gilt $\mathfrak{D}(\mathrm{T}) \subset \mathfrak{D}(\mathrm{V})$ und wegen Lemma 1.3 ist V relativkompakt. Die Aussage über das wesentliche Spektrum folgt dann aus Lemma 1.3, [RS] Satz XIII.14 und den darauffolgenden Korollaren 1 und 2, der Rest aus [wd] Satz 5.1. **s.e.c.**

Abschnitt 2

Delta–Wechselwirkung in sphäroidalen Koordinaten

2.1 Zerlegung des Raumes $\mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3)$

Der geeignete Hilbertraum für sphäroidale Koordinaten ist wegen Gleichung (1.4) durch

$$\mathfrak{H}_1 = \mathrm{L}^2(\Omega; \xi^2 - \eta^2) \qquad \Omega = (1, \infty) \times (-1, 1) \times (0, 2\pi) \tag{2.1}$$

gegeben. Wir führen zunächst den Übergang von kartesischen auf sphäroidale Koordinaten mit Hilfe einer unitären Transformation $\hat{\mathrm{U}}$ durch:

$$\begin{array}{rrcl} \hat{\mathrm{U}}: & \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^3) & \to & \mathfrak{H}_1 \\ & \Psi(x,y,z) & \mapsto & \hat{\Psi}(\xi,\eta,\varphi) = (\mathrm{U}\Psi)(\xi,\eta,\varphi) = \\ & & & \Psi(a\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\cos\varphi, a\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\sin\varphi, a\xi\eta) \end{array} \tag{2.2}$$

Weiters führen wir den Hilbertraum

$$\mathfrak{H}_2 = \mathrm{L}^2(\Omega; \xi^2 - 1) \tag{2.3}$$

ein und halten fest, daß wegen

$$\forall(\xi,\eta,\varphi) \in \Omega: \quad 0 \le \xi^2 - 1 \le \xi^2 - \eta^2 \Rightarrow$$

$$\int_\Omega |f|^2(\xi^2-1)d\omega \le \int_\Omega |f|^2(\xi^2-\eta^2)d\omega$$

mit $d\omega = d\xi\, d\eta\, d\varphi$
aus $f \in \mathfrak{H}_1$ auch $f \in \mathfrak{H}_2$ folgt:

$$\mathfrak{H}_1 \subset \mathfrak{H}_2 \tag{2.4}$$

Die Umkehrung gilt offenbar nicht – betrachte $f = \exp(-\xi)/\sqrt{\xi^2 - 1}$! Der Raum $\mathfrak{H}_2$ ist isomorph zum Tensorprodukt (vgl. z.B. [PR] Satz II 6.9)

$$\mathfrak{H}_2 \simeq \mathrm{L}^2((1,\infty); \xi^2 - 1) \otimes \mathrm{L}^2(-1,1) \otimes \mathrm{L}^2(0, 2\pi) \tag{2.5}$$

der Teilräume des $J(\xi), S(\eta)$ und $\Theta(\varphi)$–Anteils. Und da die Funktionen $\exp(\mathrm{i}m\varphi)$ und $S_n^m(\gamma,\eta)$ vollständige Orthogonalsysteme für $\mathrm{L}^2(0,2\pi)$ und $\mathrm{L}^2(-1,1)$ bilden, ist

$$YS_n^m(\gamma,\eta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Lambda_n^m}} S_n^m(\gamma,\eta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \qquad n \in \mathbb{N}_0, m \in \mathbb{Z}, m \leq n \tag{2.6}$$

ein vollständiges Orthonormalsystem für $\mathrm{L}^2(-1,1) \otimes \mathrm{L}^2(0,2\pi)$ (vgl. [PR] Satz II 6.11). Es kann somit jedes Element aus $\mathfrak{H}_2$ – also insbesondere jedes Element aus $\mathfrak{H}_1$ – in der folgenden Form geschrieben werden:

$$f(\xi,\eta,\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} f_{n,m}(\xi)\, YS_n^m(\gamma,\eta,\varphi) \qquad \gamma^2 \in \mathbb{R} \tag{2.7}$$

mit geeigneten Funktionen $f_{n,m}(\xi) \in \mathrm{L}^2((1,\infty);\xi^2-1)$.
Anmerkung: Bei der Verwendung der Notation des Buches [MF] wäre als Gewichtsfunktion ξ^2 anstelle von ξ^2-1 aufgetreten, und es würde der oben angegebene Zusammenhang nicht mehr gelten (betrachte $f = 1/(\xi^2-\eta^2)$)! Es ist also nicht mehr gewährleistet, daß $\mathfrak{H}_2$ genügend Funktionen enthält.

2.2 Einführung der δ–Wechselwirkung

Es soll nun eine δ–Wechselwirkung mit Hilfe von selbstadjungierten Fortsetzungen eingeführt werden. Dazu sei zunächst der Operator des Radialteils (genauer gesagt dessen Liouvillesche Normalform) noch einmal angegeben:

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{T} : \mathfrak{D}(\mathrm{T}) & \to & \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ f & \mapsto & \mathrm{T}f = \tau f \end{array} \tag{2.8}$$

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}) = \{f \in \mathrm{L}^2(0,\infty) | \begin{array}{l} f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(0,\infty),\ \tau f \in \mathrm{L}^2(0,\infty); \\ \lim_{y\to 0}(f - 2yf')/\sqrt{y} = 0 \text{ für } m = 0; \\ \lim_{y\to 0} f(y) = 0 \text{ für } m = 1\} \end{array} \tag{2.9}$$

$$\tau = -\frac{d^2}{dy^2} + \frac{\lambda}{y(y+2a)} + a^2\frac{m^2-1}{y^2(y+2a)^2} \tag{2.10}$$

Wir wollen nun die selbstadjungierten Fortsetzungen des Operators

$$\begin{array}{rcl} \hat{\mathrm{T}} : \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}) & \to & \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ f & \mapsto & \mathrm{T}f = \tau f \end{array} \tag{2.11}$$

mit Definitionsbereich

$$\mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}) = \{f \in \mathfrak{D}(\mathrm{T}) | f(d) = 0\} \qquad \text{mit } d > 0 \tag{2.12}$$

aufsuchen. Dazu müssen wir zuerst den adjungierten Operator berechnen. Es müssen also alle f gefunden werden, für die ein $h \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$ existiert, so daß:

$$\int_0^\infty \overline{f}\tau g\, dy = \int_0^\infty \overline{h} g\, dy \qquad \forall g \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}) \tag{2.13}$$

Beschränken wir uns zunächst auf Funktionen $g \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}})$ mit $g(y) = 0$ für $y \leq d$, so folgt, daß die Einschränkung von f auf (d, ∞) im Definitionsbereich des zu

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{T}_+ : \mathfrak{D}(\mathrm{T}_+) & \rightarrow & \mathrm{L}^2(d, \infty) \\ f & \mapsto & \mathrm{T}_+ f = \tau f \end{array} \tag{2.14}$$

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}_+) = \{f \in \mathrm{L}^2(d, \infty) | f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(d, \infty); \tau f \in \mathrm{L}^2(d, \infty); f(d) = f'(d) = 0\} \tag{2.15}$$

adjungierten Operators liegt. Dieser ist wegen [WD] Satz 8.22, Hilfssatz 8.28 (vgl. auch Satz 8.25) und Satz 5.3 c durch

$$\mathrm{T}_+^* f = \tau f \tag{2.16}$$

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}_+^*) = \{f \in \mathrm{L}^2(d, \infty) | f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(d, \infty); \tau f \in \mathrm{L}^2(d, \infty)\} \tag{2.17}$$

gegeben. Eine ähnliche Rechnung mit $g(y) = 0$ für $y \geq d$ liefert dann insgesamt:

$$\begin{array}{rl} \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^*) \subset \{f \in \mathrm{L}^2(0, \infty) | & f \in \mathrm{AC}^1_{loc}((0, \infty) \backslash \{d\});\ \hat{\tau} f \in \mathrm{L}^2(0, \infty); \\ & \lim_{y \to 0} (f - 2yf')/\sqrt{y} = 0 \text{ für } m = 0; \\ & \lim_{y \to 0} f(y) = 0 \text{ für } m = 1\} \end{array} \tag{2.18}$$

mit $(\hat{\tau} f)(y) = (\tau f)(y)$ für $y \neq d$

Sei nun $f \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^*)$:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \overline{f} \tau g \, dy &= W(\overline{f}, g)_{d+} + \int_0^d \overline{\tau f} g \, dy - W(\overline{f}, g)_{d-} + \int_d^\infty \overline{\tau f} g \, dy \\ &= g'(d) \overline{(f(d+) - f(d-))} + \int_0^\infty \overline{\hat{\tau} f} g \, dy \qquad \forall g \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}) \end{aligned} \tag{2.19}$$

Einsetzen in Gleichung (2.13) liefert:

$$\int_0^\infty (\overline{\hat{\tau} f - h}) g \, dy = g'(d) \overline{(f(d+) - f(d-))} \tag{2.20}$$

Da dies insbesondere für Funktionen $g \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}})$ mit $g'(d) = 0$ gelten muß (und diese dicht liegen), folgt $h = \hat{\tau} f$. Und das wiederum ergibt:

$$f(d+) = f(d-) \equiv f(d) \tag{2.21}$$

Der adjungierte Operator $\hat{\mathrm{T}}^*$ zu $\hat{\mathrm{T}}$ ist also durch

$$\begin{array}{rl} \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^*) = \{f \in \mathrm{L}^2(0, \infty) | & f \in \mathrm{AC}_{loc}(0, \infty); \\ & f' \in \mathrm{AC}_{loc}((0, \infty) \backslash \{d\});\ \hat{\tau} f \in \mathrm{L}^2(0, \infty); \\ & \lim_{y \to 0} (f - 2yf')/\sqrt{y} = 0 \text{ für } m = 0; \\ & \lim_{y \to 0} f(y) = 0 \text{ für } m = 1\} \end{array} \tag{2.22}$$

$$\hat{\mathrm{T}}^* f = \hat{\tau} f \tag{2.23}$$

gegeben. Wir benötigen noch den Abschluß von $\hat{\mathrm{T}}$ und berechnen daher $\hat{\mathrm{T}}^{**}$ ([WD] Satz 5.3b). Es gilt $\mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^{**}) \subset \mathfrak{D}(\mathrm{T})$ ($\mathrm{T} \subset \hat{\mathrm{T}}^* \Rightarrow \hat{\mathrm{T}}^{**} \subset \mathrm{T}^* = \mathrm{T}$). Es müssen also alle $f \in \mathfrak{D}(\mathrm{T})$ gefunden werden, für die ein $h \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$ existiert, so daß:

$$\int_0^\infty \overline{f}\hat{\tau}g\,dy = \int_0^\infty \overline{h}g\,dy \qquad \forall g \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^*) \tag{2.24}$$

Es gilt nun

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \overline{f}\hat{\tau}g\,dy &= \int_0^d \overline{f}(-g'' + qg)dy + \int_d^\infty \overline{f}(-g'' + qg)dy \\ &= \overline{f}(d)(g'(d-) - g'(d+)) + \int_0^\infty \overline{\hat{\tau}f}g\,dy \end{aligned} \tag{2.25}$$

insgesamt folgt also:

$$\int_0^\infty (\overline{\hat{\tau}f - h})g\,dy = \overline{f}(d)(g'(d+) - g'(d-)) \tag{2.26}$$

Wählt man $g \in \mathfrak{D}(\mathrm{T})$, so folgt analog wie zuvor $h = \hat{\tau}f$ und $f(d) = 0$. Also gilt:

$$\hat{\mathrm{T}}^{**} = \hat{\mathrm{T}} \tag{2.27}$$

Um die Defektindizes zu erhalten, muß die Gleichung

$$\tau\mathrm{R}_k = k^2\mathrm{R}_k \qquad \text{mit } \mathrm{R}_k \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}^*) \text{ und } \mathrm{Im}(k^2) \neq 0 \tag{2.28}$$

untersucht werden, also alle Funktionen $\mathrm{R}_k \in \mathfrak{K}(\hat{\mathrm{T}}^* - k^2)$ gefunden werden. Die Lösungen lauten:

$$\mathrm{R}_k(y,d) = \frac{\mathrm{i}}{k}\begin{cases} he_\lambda^m(k,d)je_\lambda^m(k,y) & y \le d \\ je_\lambda^m(k,d)he_\lambda^m(k,y) & d \le y \end{cases} \tag{2.29}$$

Dabei wurde $k = \sqrt{k^2}$ über $\arg(k) \in [0,\pi)$ festgelegt, und $\mathrm{R}_k(y,d)$ so normiert, daß der Sprung in der Ableitung genau -1 beträgt (Beachte Gl. (1.80)). Ein Vergleich mit (1.84) rechtfertigt die Bezeichnung. Die Defektindizes lauten (1,1), sind also gleich. Eine selbstadjungierte Fortsetzung ist möglich.
Aus [WD] Satz 8.12 folgt, daß alle selbstadjungierten Erweiterungen T_θ von $\hat{\mathrm{T}}$ durch die Angabe eines unitären Operators

$$\mathrm{U}_\theta : \quad \mathfrak{L}\{\mathrm{R}_+\} \to \mathfrak{L}\{\mathrm{R}_-\} \tag{2.30}$$

mit $\mathrm{R}_\pm(y) = \mathrm{R}_{\sqrt{\pm\mathrm{i}}}(y,d)$
charakterisiert werden können. Wegen $\|\mathrm{R}_+\| = \|\mathrm{R}_-\|$ (Beachte $\mathrm{R}_+(y) = \overline{\mathrm{R}_-(y)}$) sind alle unitären Operatoren durch

$$\begin{aligned} \mathrm{U}_\theta : \mathfrak{L}\{\mathrm{R}_+\} &\to \mathfrak{L}\{\mathrm{R}_-\} \\ c\mathrm{R}_+ &\mapsto \mathrm{U}_\theta(c\mathrm{R}_+) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}c\mathrm{R}_- \end{aligned} \tag{2.31}$$

mit $c \in \mathbb{C}$ und $\theta \in (-\pi, \pi]$
gegeben. Einsetzen in Satz 8.12 liefert dann endgültig:

$$\mathrm{T}_\theta(f + c\mathrm{R}_+ + c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_-) = \tau f + \mathrm{i}c\mathrm{R}_+ - \mathrm{i}c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_- \tag{2.32}$$

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\theta) = \{f + c\mathrm{R}_+ + c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_- \,|\, f \in \mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}), c \in \mathbb{C}\} \tag{2.33}$$

Wir können sie auch mit Hilfe von Randbedingungen beschreiben:

$$\begin{aligned}(f + c\mathrm{R}_+ + c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_-)'(d+) - (f + c\mathrm{R}_+ + c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_-)'(d-) &= -c(1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}) \\ &= -\frac{1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}}{\mathrm{R}_+(d) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_-(d)}(c\mathrm{R}_+ + c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_-)(d) \\ &= \alpha(\theta)(f + c\mathrm{R}_+ + c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{R}_-)(d)\end{aligned} \tag{2.34}$$

mit

$$\alpha(\theta) = \frac{-|\mathrm{R}_+(d)|^{-1}\cos\dfrac{\theta}{2}}{\cos\left(\dfrac{\theta}{2} - \arg(\mathrm{R}_+(d))\right)} = \frac{-1}{\mathrm{Re}(\mathrm{R}_+(d)) + \mathrm{Im}(\mathrm{R}_+(d))\tan\dfrac{\theta}{2}} \tag{2.35}$$

Dabei wurde im ersten Schritt Gleichung (1.80) und im letzten $f(d) = 0$ verwendet. Für die Umformung von α wurde $\mathrm{R}_+(y) = \overline{\mathrm{R}_-(y)} \neq 0$ und einige elementare trigonometrische Formeln verwendet. Ist $\mathrm{R}_+(d) \notin \mathbb{R}$, so durchläuft α ganz $\mathbb{R}$, wenn θ Werte zwischen $-\pi$ und π durchläuft. $\mathrm{R}_+(d) \in \mathbb{R}$ würde aber bedeuten, daß der Operator T_α aus Satz 2.1 mit $\alpha = 1/\mathrm{R}_+(d)$ (der auf jeden Fall symmetrisch ist) eine Eigenfunktion ($\mathrm{R}_\pm(y)$) zu einem komplexen Eigenwert ($k^2 = \pm\mathrm{i}$) hätte — Widerspruch (Man setze $\mathrm{R}_\pm(y)$ in (2.34) ein.). Alle selbstadjungierten Erweiterungen T_θ können also auch mit $\alpha \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ parametrisiert werden ($\alpha(\theta)$ ist offensichtlich eine Bijektion von $(-\pi, \pi]$ auf $\mathbb{R} \cup \{\infty\}$), und wir haben folgenden

Satz 2.1 *Der Operator* T_α *ist auf* $\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha)$ *selbstadjungiert.*

$$\mathrm{T}_\alpha f = \hat{\tau} f \tag{2.36}$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha) = \{f \in \mathrm{L}^2(0,\infty)| \quad & f \in \mathrm{AC}_{loc}(0,\infty)\,;\, f' \in \mathrm{AC}_{loc}((0,\infty)\backslash\{d\}); \\ & \hat{\tau} f \in \mathrm{L}^2(0,\infty); f'(d_+) - f'(d_-) = \alpha f(d) \\ & \lim_{y\to 0}(f - 2yf')/\sqrt{y} = 0 \text{ für } m = 0; \\ & \lim_{y\to 0} f(y) = 0 \text{ für } m = 1\}\end{aligned} \tag{2.37}$$

Der Fall $\alpha = 0$ entspricht dem ursprünglichen Operator des Radialteils: T_0=T. Der Fall $\alpha \neq 0$ entspricht einer Wechselwirkung, die formal beschrieben wird, indem man in Gleichung (1.5) $W_1 = \alpha\,\delta(\cosh\rho - d/a - 1)$ und $W_2 = W_3 = 0$ setzt.[1] Der Fall $\alpha = \infty$ zerlegt $(0, \infty)$ in die beiden Teilintervalle $(0, d)$ und (d, ∞):

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\infty) = \{f \in \mathrm{L}^2(0,\infty)| \quad & f \in \mathrm{AC}_{loc}(0,\infty)\,;\, f' \in \mathrm{AC}_{loc}((0,\infty)\backslash\{d\}); \\ & \hat{\tau} f \in \mathrm{L}^2(0,\infty); f(d) = 0 \\ & \lim_{y\to 0}(f - 2yf')/\sqrt{y} = 0 \text{ für } m = 0; \\ & \lim_{y\to 0} f(y) = 0 \text{ für } m = 1\}\end{aligned} \tag{2.38}$$

[1] $\delta(x)$... Deltadistribution

Wir wollen nun noch etwas über die Eigenwerte von T_α sagen. $\mathrm{R}_k(y,d)$ ist genau dann Eigenfunktion von T_α, wenn die Randbedingung bei d (2.34) erfüllt ist. Was auf folgende Gleichung führt:

$$1+\alpha\mathrm{R}_k(d,d)=0 \tag{2.39}$$

Um die Eigenwerte unseres Operators im $\mathbb{R}^3$ zu erhalten, muß also die Gleichung

$$1+\frac{\mathrm{i}\alpha}{k}je_n^m(k,d)he_n^m(k,d)=0 \tag{2.40}$$

gelöst werden.

Satz 2.2 *Die Resolvente* R_k^α *ist ein Integraloperator mit folgendem Kern:*

$$\mathrm{R}_k^\alpha(y,y')=\mathrm{R}_k(y,y')-\frac{\alpha}{1+\alpha\mathrm{R}_k(d,d)}\mathrm{R}_k(y,d)\mathrm{R}_k(d,y') \qquad k^2\in\rho(\mathrm{T}_\alpha)\cap\rho(\mathrm{T}) \tag{2.41}$$

Beweis: Der Operator R_k^α ist offensichtlich auf ganz $\mathrm{L}^2(0,\infty)$ definiert und beschränkt (da R_k diese Eigenschaften besitzt und der zweite Summand endlichdimensional ist). Wir zeigen zuerst, daß für $g\in\mathrm{L}^2(0,\infty)$ $h_\alpha=\mathrm{R}_k^\alpha g$ die Randbedingung erfüllt.

$$\begin{aligned} h_\alpha(y) &= (\mathrm{R}_k^\alpha g)(y) \\ &= \int\limits_0^\infty \left(\mathrm{R}_k(y,y')-\frac{\alpha}{1+\alpha\mathrm{R}_k(d,d)}\mathrm{R}_k(y,d)\mathrm{R}_k(d,y')\right)g(y')\,dy' \end{aligned}$$

Wir notieren

$$h_\alpha(d)=\frac{1}{1+\alpha\mathrm{R}_k(d,d)}\int\limits_0^\infty \mathrm{R}_k(d,y')g(y')\,dy'$$

und erhalten damit:

$$\begin{aligned} h_\alpha'(d_+)-h_\alpha'(d_-) &= -\frac{\alpha}{1+\alpha\mathrm{R}_k(d,d)}\int\limits_0^\infty \mathrm{R}_k(d,y')g(y')\,dy'\times \\ &\quad \Big(\mathrm{R}_k(d_+,d)'-\mathrm{R}_k(d_-,d)'\Big)=\alpha h_\alpha(d) \end{aligned}$$

Dabei wurde $\mathrm{R}_k(d_+,d)'-\mathrm{R}_k(d_-,d)'=\mathrm{i}(je_\lambda^m(k,d)he_\lambda^m(k,d)'-je_\lambda^m(k,d)'he_\lambda^m(k,d))/k=1$ verwendet (vgl. Gl. (1.80)). Damit ist offensichtlich $h_\alpha\in\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha)$. Nun berechnen wir $(\hat\tau-k^2)h_\alpha$:

$$\begin{aligned} \Big((\hat\tau-k^2)h_\alpha\Big)(y) &= \Big((\tau-k^2)R_kg\Big)(y)-\frac{\alpha}{1+\alpha\mathrm{R}_k(d,d)}\times \\ &\quad \int\limits_0^\infty \mathrm{R}_k(d,y')g(y')\,dy'\,(\hat\tau-k^2)\mathrm{R}_k(y,d)=g(y) \end{aligned}$$

(Beachte: $(\hat\tau-k^2)\mathrm{R}_k(y,d)=0$) Aus diesen beiden Eigenschaften folgt, da $\mathrm{T}_\alpha-k^2$ eine Bijektion von $\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha)$ auf $\mathrm{L}^2(0,\infty)$ ist, daß $\mathfrak{R}(\mathrm{R}_k^\alpha)=\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha)$ gilt. Alle $h_\alpha\in\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha)$ lassen sich also in der Form

$$h_\alpha=\mathrm{R}_k^\alpha g \qquad g\in\mathrm{L}^2(0,\infty)$$

schreiben. Daraus folgt:

$$\mathrm{R}_k^\alpha(\mathrm{T}_\alpha - k^2)h_\alpha = \mathrm{R}_k^\alpha(\mathrm{T}_\alpha - k^2)\mathrm{R}_k^\alpha g = \mathrm{R}_k^\alpha g = h_\alpha$$

Also insgesamt:

$$\mathrm{R}_k^\alpha = (\mathrm{T}_\alpha - k^2)^{-1} \quad k^2 \in \rho(\mathrm{T}_\alpha) \cap \rho(\mathrm{T})$$

Die Behauptung ist damit bewiesen. **s.e.c.**

Aus dem Beweis folgt unmittelbar:

Korollar 2.2 *Jedes $h_\alpha \in \mathfrak{D}(\mathrm{T}_\alpha)$ läß t sich eindeutig in der Form*

$$h_\alpha = \mathrm{R}_k^\alpha g \qquad g \in \mathrm{L}^2(0,\infty) \tag{2.42}$$

schreiben. Weiter gilt:

$$(\hat{\tau} - k^2)h_\alpha = g \tag{2.43}$$

Für R_k^∞ gilt:

$$\begin{aligned} h_\infty(y) &= (\mathrm{R}_k^\infty g)(y) = \int_0^\infty \left(\mathrm{R}_k(y,y') - \frac{\mathrm{R}_k(y,d)\mathrm{R}_k(d,y')}{\mathrm{R}_k(d,d)}\right) g(y')\,dy' \\ &= \begin{cases} \left(he_\lambda^m(k,y) - \frac{he_\lambda^m(k,d)}{je_\lambda^m(k,d)} je_\lambda^m(k,y)\right) \int_0^y je_\lambda^m(k,y')g(y')\,dy' + \\ je_\lambda^m(k,y) \int_y^d \left(he_\lambda^m(k,y') - \frac{he_\lambda^m(k,d)}{je_\lambda^m(k,d)} je_\lambda^m(k,y')\right) g(y')\,dy' & y \le d \\ \\ he_\lambda^m(k,y) \int_d^y \left(je_\lambda^m(k,y') - \frac{je_\lambda^m(k,d)}{he_\lambda^m(k,d)} he_\lambda^m(k,y')\right) g(y')\,dy' + \\ \left(je_\lambda^m(k,y) - \frac{je_\lambda^m(k,d)}{he_\lambda^m(k,d)} he_\lambda^m(k,y)\right) \int_y^\infty he_\lambda^m(k,y')g(y')\,dy' & y \ge d \end{cases} \end{aligned} \tag{2.44}$$

Daraus ersieht man deutlich die Entkopplung der beiden Teilintervalle.

Satz 2.3 *Für das wesentliche Spektrum von T_α gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}_\alpha) = \sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \tag{2.45}$$

$$\sigma_{ac}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \qquad \sigma_{sc}(\mathrm{T}) = \emptyset \tag{2.46}$$

Das Punktspektrum ist einfach und es gilt:

$$\sigma_p(\mathrm{T}) \subset (-\infty, 0] \tag{2.47}$$

Beweis: Der erste Teil folgt mit dem Satz von Weyl ([RS] Satz XIII.14) aus Satz 1.11 und der Tatsache, daß die Resolventen sich nur um einen endlichdimensionalen (also kompakten) Anteil unterscheiden. Sei nun $\varphi \in \mathrm{C}_0^\infty(0,\infty)$, $p > 1$ beliebig und $0 < a < b < \infty$, dann gilt:

$$\sup_{0<\varepsilon<1} \int_a^b |\mathrm{Im}\langle\varphi, \mathrm{R}_{\sqrt{x+\mathrm{i}\varepsilon}}(\mathrm{T}_\alpha)\varphi\rangle|^p dx < \infty$$

Denn da φ auß erhalb eines kompakten Intervalls $[c,d] \subset (0,\infty)$ verschwindet, kann $\mathrm{R}_k(y,y')$ (auf jedem kompakten Teilintervall stetig!) durch eine geeignete (von k abhängige) Konstante majorisiert werden. ($\mathrm{R}_k(y,y')$ ist dabei für alle k mit $\mathrm{Re}(k^2) \geq 0$ über Gleichung (1.84) definiert.) Insbesondere kann also auch eine Konstante, die das für alle $k^2 = x + i\varepsilon$ mit $(x,\varepsilon) \in [a,b] \times [0,1]$ bewerkstelligt gefunden werden. Der zweite Teil folgt damit aus [RS] Satz XIII.20, wenn man $D = \mathrm{C}_0^\infty(0,\infty)$ wählt. Da a, b beliebig sind folgt zunächst, daß das Spektrum in $(0,\infty)$ rein absolut stetig ist und daraus dann der Rest der Behauptung. **s.e.c.**

Satz 2.4 *Sei V reellwertig mit* $\mathrm{Min}(1,\sqrt{y})V(y) \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$*, dann ist* V *relativkompakt bezüglich* T_α*. Der Operator*

$$\mathrm{T}_\alpha + \mathrm{V} \tag{2.48}$$

ist auf $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert und für das wesentliche Spektrum gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}_\alpha + \mathrm{V}) = \sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \tag{2.49}$$

Das Punktspektrum ist einfach.

$$\sigma_p(\mathrm{T}_\alpha + \mathrm{V}) \subset (-\infty, 0] \tag{2.50}$$

Beweis: Vergleiche Satz 1.14 und Gleichung 2.41. **s.e.c.**

2.3 δ–Wechselwirkung als Grenzwert

Ziel dieses Abschnitts ist es, die δ–Wechselwirkung als (Normresolventen–) Grenzwert von skalierten Potentialen zu erhalten. Wir führen zunächst für $\varepsilon > 0$ einen Skalierungs– und Verschiebungsoperator S_ε ein (vgl. [AG]):

$$\begin{array}{rrcl} \mathrm{S}_\varepsilon: & \mathrm{L}^2(0,\infty) & \to & \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ & f(y) & \mapsto & \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} f\left(\frac{y-d}{\varepsilon}\right) & y > d \\ 0 & y \leq d \end{cases} \end{array} \tag{2.51}$$

Es ist leicht zu sehen, daß S_ε isometrisch ist. Der adjungierte Operator S_ε^* ist durch

$$\begin{array}{rrcl} \mathrm{S}_\varepsilon^*: & \mathrm{L}^2(0,\infty) & \to & \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ & f(y) & \mapsto & \sqrt{\varepsilon} f(\varepsilon y + d) \end{array} \tag{2.52}$$

gegeben. Wir wählen zunächst eine reellwertige Funktion $V \in \mathrm{L}^1(0,\infty) \cap \mathrm{L}^2(0,\infty)$ und definieren:

$$u(y) = \mathrm{sgn}(V(y))\sqrt{|V(y)|} \qquad v(y) = \sqrt{|V(y)|} \tag{2.53}$$

Es gilt: $u, v \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$ und $V = uv$. Wir berechnen nun den Grenzwert des Operators

$$\begin{array}{rrcl} \mathrm{T}(\varepsilon): & \mathfrak{D}(\mathrm{T}) & \to & \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ & f & \mapsto & \tau f + V_\varepsilon f \end{array} \qquad \varepsilon > 0 \tag{2.54}$$

mit $V_\varepsilon(y) = \dfrac{1}{\sqrt{\varepsilon}}(\mathrm{S}_\varepsilon V)(y) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon}V(\frac{y-d}{\varepsilon}) & y > d \\ 0 & y \leq d \end{cases}$

Für später führen wir noch folgende Abkürzung ein:

$$\alpha = \int_0^\infty V_\varepsilon(y)\,dy = \int_0^\infty V(y)\,dy \tag{2.55}$$

Aus Satz 1.14 folgt:

Lemma 2.1 $\mathrm{T}(\varepsilon)$ *ist auf* $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert und es gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}(\varepsilon)) = \sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0, \infty) \tag{2.56}$$

Es gilt sogar:

$$\sigma_{ac}(\mathrm{T}(\varepsilon)) = [0, \infty) \qquad \sigma_{sc}(\mathrm{T}(\varepsilon)) = \emptyset \tag{2.57}$$

Das Spektrum ist in $\mathbb{R}\backslash\{0\}$ *einfach.*

Wir berechnen zuerst die Resolvente von $\mathrm{T}(\varepsilon)$. Dazu gehen wir von der zweiten Resolventengleichung ([WD] Satz 5.13 c) aus:

$$\begin{aligned}
(\mathrm{T} + \mathrm{V}_\varepsilon - k^2)^{-1} &= \mathrm{R}_k - \mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon (\mathrm{T} + \mathrm{V}_\varepsilon - k^2)^{-1} \\
&= \mathrm{R}_k - \mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon (\mathrm{T} + \mathrm{V}_\varepsilon - k^2)^{-1} \mathrm{R}_k^{-1} \mathrm{R}_k \\
&= \mathrm{R}_k - \mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon [\mathrm{R}_k (\mathrm{T} + \mathrm{V}_\varepsilon - k^2)]^{-1} \mathrm{R}_k \\
&= \mathrm{R}_k - \mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon (1 + \mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon)^{-1} \mathrm{R}_k
\end{aligned} \tag{2.58}$$

Der zweiten Summand soll nun schrittweise vereinfacht werden:

$$\begin{aligned}
(\mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon f)(y) &= \int_0^\infty \mathrm{R}_k(y, y')(\mathrm{S}_\varepsilon u)(y')(\mathrm{S}_\varepsilon v)(y') f(y')\,dy' \\
&= \frac{1}{\varepsilon}\int_0^\infty (\mathrm{S}_\varepsilon^* \mathrm{R}_k(y, y')) u(y') v(y') (\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y')\,dy' \\
&= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\int_0^\infty \mathrm{R}_k(y, \varepsilon y' + d) u(y') v(y') (\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y')\,dy' \\
&= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\int_0^\infty \mathrm{A}_\varepsilon(y, y') v(y') (\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y')\,dy' \\
&= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}(\mathrm{A}_\varepsilon v \mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y)
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Weiter berechnen wir:

$$(1 + \mathrm{R}_k \mathrm{V}_\varepsilon)^{-1} g = f \tag{2.60}$$

$$\begin{aligned}
g(y) &= f(y) + \int_0^\infty \mathrm{R}_k(y, y')(\mathrm{S}_\varepsilon u)(y')(\mathrm{S}_\varepsilon v)(y') f(y')\,dy' \\
&= f(y) + \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \mathrm{R}_k(y, \varepsilon y' + d) u(y') v(y') (\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y')\,dy'
\end{aligned} \tag{2.61}$$

$$
\begin{aligned}
(v\mathrm{S}_\varepsilon^* g)(y) &= (v\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y) + \int_0^\infty v(y)\mathrm{R}_k(\varepsilon y + d, \varepsilon y' + d)u(y')v(y')(\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y')\,dy' \\
&= (v\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y) + \int_0^\infty \mathrm{B}_\varepsilon(y,y')v(y')(\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y')\,dy' \\
&= (1 + \mathrm{B}_\varepsilon v\mathrm{S}_\varepsilon^* f)(y) \qquad (2.62)
\end{aligned}
$$

$$
v\mathrm{S}_\varepsilon^* f = (1+\mathrm{B}_\varepsilon)^{-1} v\mathrm{S}_\varepsilon^* g \qquad (2.63)
$$

Zuletzt berechnen wir:

$$
\mathrm{R}_k h = g
$$

$$
\begin{aligned}
(v\mathrm{S}_\varepsilon^* g)(y) &= \sqrt{\varepsilon}\int_0^\infty v(y)\mathrm{R}_k(\varepsilon y + d, y')h(y')\,dy' \\
&= \sqrt{\varepsilon}\int_0^\infty \mathrm{C}_\varepsilon(y,y')h(y')\,dy' \\
&= \sqrt{\varepsilon}(\mathrm{C}_\varepsilon h)(y) \qquad (2.64)
\end{aligned}
$$

Und damit insgesamt:

$$
(\mathrm{T}(\varepsilon) - k^2)^{-1} = \mathrm{R}_k + \mathrm{A}_\varepsilon(1+\mathrm{B}_\varepsilon)^{-1}\mathrm{C}_\varepsilon \qquad (2.65)
$$

Lemma 2.2 *Es gilt:*

$$
\mathrm{A}(y,y') = \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \mathrm{A}_\varepsilon(y,y') = \mathrm{R}_k(y,d)u(y') \qquad (2.66)
$$

$$
\mathrm{B}(y,y') = \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \mathrm{B}_\varepsilon(y,y') = v(y)\mathrm{R}_k(d,d)u(y') \qquad (2.67)
$$

$$
\mathrm{C}(y,y') = \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \mathrm{C}_\varepsilon(y,y') = v(y)\mathrm{R}_k(d,y') \qquad (2.68)
$$

Die Konvergenz ist im Sinne der Hilbert–Schmidt–Norm gemeint.

Beweis: Aus Lemma 1.3 folgt, daß $\mathrm{A}_\varepsilon, \mathrm{B}_\varepsilon, \mathrm{C}_\varepsilon$ Hilbert–Schmidt–Operatoren sind, da $u, v \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$ gilt. Daß auch A, B und C Hilbert–Schmidt–Operatoren sind, ist offensichtlich. Da schwache Konvergenz

$$
\mathrm{w-}\lim_{\varepsilon\downarrow 0} \mathrm{A}_\varepsilon = \mathrm{A} \quad \mathrm{w-}\lim_{\varepsilon\downarrow 0} \mathrm{B}_\varepsilon = \mathrm{B} \quad \mathrm{w-}\lim_{\varepsilon\downarrow 0} \mathrm{C}_\varepsilon = \mathrm{C}
$$

aus dem Satz über die majorisierte Konvergenz ([HE]) folgt (geeignete Majoranten lassen sich leicht mit den Abschätzungen aus Lemma 1.3 konstruieren), genügt es ([SI] Satz 2.21)

$$
\lim_{\varepsilon\downarrow 0} \|\mathrm{A}_\varepsilon\|_{HS} = \|\mathrm{A}\|_{HS} \quad \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \|\mathrm{B}_\varepsilon\|_{HS} = \|\mathrm{B}\|_{HS} \quad \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \|\mathrm{C}_\varepsilon\|_{HS} = \|\mathrm{C}\|_{HS}
$$

zu zeigen. Das folgt aber wieder aus dem Satz über die majorisierte Konvergenz. **s.e.c.**

Wir können nach dieser Vorarbeit nun den zentralen Satz dieses Abschnitts beweisen:

Satz 2.5 *Sei* $V \in \mathrm{L}^1(0,\infty) \cap \mathrm{L}^2(0,\infty)$, *reellwertig und* $d > 0$. *Dann strebt* $\mathrm{T}(\varepsilon)$ *gegen* T_α *im Normresolventen–Sinn:*

$$\mathrm{n-}\lim_{\varepsilon \downarrow 0} (\mathrm{T}(\varepsilon) - k^2)^{-1} = \mathrm{R}_k^\alpha \qquad k^2 \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R} \tag{2.69}$$

mit

$$\alpha = \int_0^\infty V(y)\, dy \tag{2.70}$$

Beweis: Wir wissen bereits:

$$\mathrm{n-}\lim_{\varepsilon \downarrow 0} (\mathrm{T}(\varepsilon) - k^2)^{-1} = \mathrm{R}_k - \mathrm{A}(1+\mathrm{B})^{-1}\mathrm{C}$$

und müssen nur noch $(1+\mathrm{B})^{-1}$ berechnen:

$$(1+\mathrm{B})^{-1} f = g \qquad f, g \in \mathrm{L}^2(0,\infty)$$

$$\begin{aligned} f &= g + \mathrm{B}g = g + \mathrm{R}_k(d,d) v \langle u, g\rangle \\ &= g + \mathrm{R}_k(d,d) v \langle u, f\rangle - \mathrm{R}_k(d,d)^2 v \langle u, v\rangle \langle u, g\rangle \\ &= g + \mathrm{R}_k(d,d) v \langle u, f\rangle - \mathrm{R}_k(d,d) \langle u, v\rangle (f - g) \end{aligned}$$

Auflösen nach g ergibt:

$$g = f - \frac{\mathrm{R}_k(d,d) v \langle u, f\rangle}{1 + \mathrm{R}_k(d,d)\langle u, v\rangle}$$

Damit folgt schließ lich:

$$(\mathrm{A}(1+\mathrm{B})^{-1}\mathrm{C})(y,y') = \frac{\alpha}{1 + \alpha \mathrm{R}_k(d,d)} \mathrm{R}_k(y,d)\mathrm{R}_k(d,y')$$

Ein Vergleich mit (2.41) beendet den Beweis. **s.e.c.**

Der Satz besagt anschaulich, daß die auf einem Rotationsellipsoid konzentrierte Wechselwirkung eine Näherung für ein hohes, nur in einer kleinen Umgebung des Rotationsellipsoides wesentlich von Null verschiedenen Potentials ist. Das Ergebnis ist nicht verwunderlich, denn es gilt:

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \int_0^\infty V_\varepsilon(y)\phi(y) dy = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \int_0^\infty V(y)\phi(\varepsilon y + d) dy = \int_0^\infty V(y)\phi(d) dy = \alpha\phi(d) \tag{2.71}$$

für alle auf $(0,\infty)$ stetigen und beschränkten ϕ. (Im zweiten Schritt wurde die Beschränktheit von ϕ und der Satz über die majorisierte Konvergenz verwendet.). Es gilt also

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} V_\varepsilon(y) \overset{D}{=} \alpha\delta(y - d) \tag{2.72}$$

im Distributionen–Sinn. Vergleiche [ST] für eine einfache Einführung in die Distributionentheorie und [ST] Übungsaufgabe 2.4, wo ein schwächeres Ergebnis bewiesen wird.

Abschnitt 3

H_2^+–Ion in sphäroidalen Koordinaten

3.1 Einführung der Wechselwirkung

Im Anschluß an Abschnitt 1 Gleichung (1.6) wollen wir nun ein quantenmechanisches Teilchen, das sich im Potential zweier Punktladungen befindet untersuchen. Das Modell wird durch die Schrödingergleichung (1.1) mit folgendem Potential beschrieben:

$$V = \frac{C_1}{r_1} + \frac{C_2}{r_2} \tag{3.1}$$

$C_{1,2}$ sind ein Maß für die Stärke der Ladung und $r_{1,2}$ bezeichnet den Abstand des Teilchens von der Ladung. Die Lage der Punktladungen ist dabei als fest angenommen. Ihre Wechselwirkungsenergie ist deshalb konstant und wird auf 0 normiert. Wählt man $C_1 = C_2$, so erhält man ein Modell für das H_2^+–Ion (vgl. [SW]). Wählen wir unser (sphäroidales) Koordinatensystem so, daß die Punktladungen in den Brennpunkten liegen, so ist das Potential wegen (1.5) und (1.6) durch

$$V = \frac{a^2 \left(W_1(\frac{r_1+r_2}{2a}) + W_2(\frac{r_1-r_2}{2a}) \right)}{r_1 r_2} \tag{3.2}$$

mit

$$W_1(\xi) = \frac{C_2 + C_1}{a}\xi \qquad W_2(\eta) = \frac{C_2 - C_1}{a}\eta \tag{3.3}$$

gegeben. Einsetzen des Produktansatzes (1.8) in die Schrödingergleichung (1.1) liefert die neuen Separationsgleichungen:

$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2 - 1)\frac{d}{d\xi}J - [\lambda - \gamma^2(\xi^2 - 1) + \frac{m^2}{\xi^2 - 1} + a^2 W_1(\xi)]J = 0 \tag{3.4}$$

$$\frac{d}{d\eta}(1 - \eta^2)\frac{d}{d\eta}S + [\lambda + \gamma^2(1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} - a^2 W_2(\eta)]S = 0 \tag{3.5}$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\Theta + m^2\Theta = 0 \tag{3.6}$$

Der $\Theta(\varphi)$–Anteil bleibt also unverändert. Der $S(\eta)$ bleibt ebenfalls unverändert, falls $C_1 = C_2$ ist. Umschreiben zeigt, daß noch immer drei (verkoppelte) Sturm–Liouville–Probleme vorliegen:

$$\frac{1}{a^2(\xi^2-1)}\left[-\frac{d}{d\xi}(\xi^2-1)\frac{d}{d\xi}+\lambda+\frac{m^2}{\xi^2-1}+a^2W_1(\xi)\right]J \;=\; k^2J \quad \xi\in(1,\infty) \tag{3.7}$$

$$\left[-\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta}-\gamma^2(1-\eta^2)+\frac{m^2}{1-\eta^2}-a^2W_2(\eta)\right]S \;=\; \lambda S \quad \eta\in(-1,1) \tag{3.8}$$

$$-\frac{d^2}{d\varphi^2}\Theta \;=\; m^2\Theta \quad \varphi\in(0,2\pi) \tag{3.9}$$

Wir wollen nun die beiden ersten Gleichungen etwas genauer untersuchen.

3.2 Untersuchung des $S(\eta)$–Anteils

Der zu untersuchende Operator lautet:

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{T}:\mathfrak{D}(\mathrm{T}) & \to & \mathrm{L}^2(-1,1) \\ u & \mapsto & \mathrm{T}u=\tau u \end{array} \tag{3.10}$$

$$\tau u=-((1-x^2)u'\,)'-\gamma^2(1-x^2)\,u+\frac{m^2}{1-x^2}u+\hat{C}_2x\,u \qquad \gamma^2=(ak)^2\in\mathbb{R}, m^2\in\mathbb{N}_0 \tag{3.11}$$

mit $\hat{C}_2=a(C_1-C_2)\in\mathbb{R}$ und

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T})=\{u\in\mathrm{L}^2(-1,1)|\;\; \begin{array}{l} u\in\mathrm{AC}^1_{loc}(-1,1),\;\tau u\in\mathrm{L}^2(-1,1), \\ \lim_{x\to\pm1}(1\mp x)u'(x)=0 \text{ für } m=0\} \end{array} \tag{3.12}$$

Satz 3.1 *Der Operator* T *ist auf* $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert. Sein Spektrum ist rein diskret und einfach:*

$$\sigma(\mathrm{T})=\sigma_{disc}(\mathrm{T}) \tag{3.13}$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen bilden daher ein vollständiges Orthogonalsystem.

Beweis: Die Behauptungen folgen aus den Sätzen in Abschnitt 1.3, wenn man beachtet, daß $\hat{C}_2x$ eine beschränkte (also relativkompakte) Störung darstellt. **s.e.c.**

Die charakteristischen Exponenten bleiben ebenfalls unverändert.

3.3 Untersuchung des $J(\xi)$–Anteils

Wir geben gleich die Liouvillesche Normalform an:

$$\begin{array}{rcl} \mathrm{T}:\mathfrak{D}(\mathrm{T}) & \to & \mathrm{L}^2(0,\infty) \\ f & \mapsto & \mathrm{T}f=\tau f \end{array} \tag{3.14}$$

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T})=\{f\in\mathrm{L}^2(0,\infty)|\;\; \begin{array}{l} f\in\mathrm{AC}^1_{loc}(0,\infty),\;\tau f\in\mathrm{L}^2(0,\infty); \\ \lim_{y\to0}(f-2yf')/\sqrt{y}=0 \text{ für } m=0; \\ \lim_{y\to0} f(y)=0 \text{ für } m=1\} \end{array} \tag{3.15}$$

$$\tau = -\frac{d^2}{dy^2} + \frac{\lambda + \hat{C}_1(y+a)}{y(y+2a)} + a^2\frac{m^2-1}{y^2(y+2a)^2} \tag{3.16}$$

mit $\hat{C}_1 = (C_1 + C_2) \in \mathbb{R}$
Für $a = 0$ erhält man den Radialteil des Coulombproblems mit einer Punktladung proportional zu $C_1 + C_2$.

Satz 3.2 *Der Operator* T *ist auf* $\mathfrak{D}(\mathrm{T})$ *selbstadjungiert. Für das wesentliche Spektrum gilt:*

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \qquad \sigma_{ac}(\mathrm{T}) = [0,\infty) \qquad \sigma_{sc}(\mathrm{T}) = \emptyset \tag{3.17}$$

$$\sigma_p(\mathrm{T}) \subset (-\infty, 0] \tag{3.18}$$

Das Spektrum ist in $\mathbb{R}\backslash\{0\}$ *einfach (insgesamt höchstens zweifach).*

Beweis: Es können die Beweise von Abschnitt 1.3 übernommen werden. q liegt zwar nicht in $\mathrm{L}^1(1,\infty)$ ist in diesem Bereich aber von beschränkter Variation, und es treffen weiterhin die Voraussetzungen von [wd] Satz 5.1 zu. **s.e.c.**

Die charakteristischen Exponenten bleiben ebenfalls unverändert, jedoch das Verhalten für $y \to \infty$ ändert sich, da q (wie bereits erwähnt) nicht in $\mathrm{L}^1(1,\infty)$ liegt.

Anhang A

Weyl–Titchmarsh–Theorie

A.1 Grundlagen

Die hier zusammengestellten Eigenschaften von Differentialgleichungen und deren Lösungen findet man z.B. in [CL], [IN], [KM], [WA]. Speziell Randwertprobleme im Hilbertraum, so wie sei hier dargestellt werden, finden sich in [CL], [DS], [JR], [LS], [NE], [WD].

Unser Ziel ist es, das Eigenwertproblem, das mit dem Differentialausdruck

$$\tau f(x) = -\frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx}f(x) + q(x)f(x) \qquad f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I) \tag{A.1}$$

verknüpft ist, im Hilbertraum $\mathrm{L}^2(I)$ zu untersuchen. I sei dabei das offene Intervall $I = (a,b) \subset \mathbb{R}$. Wir verlangen:

1. $p \in \mathrm{AC}_{loc}(I)$, $p' \in \mathrm{L}^2_{loc}(I)$, $p^{-1} \in \mathrm{L}^\infty_{loc}(I)$, reellwertig
2. $q \in \mathrm{L}^2_{loc}(I)$, reellwertig

Ist a endlich und kann der Index „*loc*“ bei Einschränkung auf das Intervall (a,c) (mit $a < c < b$) fortgelassen werden, so bezeichnet man den Randpunkt als regulär, ansonsten als singulär. Analoges gilt für b. Sind beide Randpunkte regulär, so bezeichnen wir den ganzen Differentialausdruck (A.1) als regulär. Der maximale Definitionsbereich für τ in $\mathrm{L}^2(I)$ ist durch

$$\mathfrak{D}(\tau) = \{f \in \mathrm{L}^2(I) | f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I),\ \tau f \in \mathrm{L}^2(I)\} \tag{A.2}$$

gegeben. Wegen $\mathrm{C}^\infty_0(I) \subset \mathfrak{D}(\tau)$ ist $\mathfrak{D}(\tau)$ dicht.
Anmerkung: Wenn man $f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I)$ durch $f, pf' \in \mathrm{AC}_{loc}(I)$ ersetzt, genügt es 1. $p^{-1} \in \mathrm{L}^1_{loc}(I)$, reellwertig und 2. $q \in \mathrm{L}^1_{loc}(I)$, reellwertig zu fordern. Die Dichtheit von $\mathfrak{D}(\tau)$ ist dann aber nicht mehr offensichtlich.
Da wir an selbstadjungierten Operatoren T

$$\langle g, \mathrm{T}f\rangle = \langle \mathrm{T}g, f\rangle \qquad \forall g, f \in \mathfrak{D}(\mathrm{T}) = \mathfrak{D}(\mathrm{T}^*) \tag{A.3}$$

$\langle g, f\rangle = \int_a^b \overline{g(t)} f(t)\, dt \ldots$ Skalarprodukt
interessiert sind, machen wir eine kleine Rechnung. Durch partielle Integration erhält man

$(a < c < d < b)$:

$$\int_c^d \overline{g}(\tau f)\,dt = W(\overline{g},f)_d - W(\overline{g},f)_c + \int_c^d (\overline{\tau g}) f\,dt \qquad f,g \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I) \tag{A.4}$$

$W(f_1,f_2)_x = \Big(p(f_1 f_2' - f_1' f_2)\Big)(x)\ldots$ modifizierte Wronskideterminante
Wählen wir für $\overline{g}, f$ speziell zwei Lösungen $u_{1,2}$ von

$$\tau\,u = z\,u \qquad u \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I) \quad z \in \mathbb{C} \tag{A.5}$$

so sehen wir, daß ihre modifizierte Wronskideterminante konstant ist:

$$W(u_1,u_2)_x = W(u_1,u_2) = const \qquad \tau u_{1,2} = z u_{1,2} \tag{A.6}$$

Sind $u_{1,2}$ linear unabhängig, so ist die Konstante ungleich Null. Wählen wir in (A.4) $f,g \in \mathfrak{D}(\tau)$, so können wir nacheinander die Grenzübergänge $c \to a$ und $d \to b$ durchführen:

$$\langle g, \tau f\rangle = W(\overline{g},f)_b - W(\overline{g},f)_a + \langle \tau g, f\rangle \qquad \forall f,g \in \mathfrak{D}(\tau) \tag{A.7}$$

$W(\overline{g},f)_{a,b}$ ist dabei als Grenzwert aufzufassen, dessen Existenz aus der Existenz der Skalarprodukte folgt. Wir geben nun noch zwei Ergebnisse aus der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen an:

Satz A.1 *Sei τ ein auf I definierter Differentialausdruck und $g \in \mathrm{L}^1_{loc}(I)$. Dann existiert eine eindeutige Funktion $f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I)$ mit:*

$$\tau f - z\,f = g \qquad z \in \mathbb{C} \tag{A.8}$$

$$f(c) = \alpha \quad (pf')(c) = \beta \qquad \alpha,\beta \in \mathbb{C} \quad c \in I \tag{A.9}$$

Beweis: (Skizze) Wir schränken uns zunächst auf das (reguläre) Intervall $\hat{I} = (\hat{a},\hat{b})$ mit $a < \hat{a} < c < \hat{b} < b$ ein. Die Differentialgleichung (A.1) wird zuerst in ein System erster Ordnung verwandelt $(f_1 = f, f_2 = pf')$:

$$\mathbf{f}'(x) - \mathbf{A}(x)\mathbf{f}(x) = \mathbf{g}(x) \qquad \mathbf{f}(c) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \qquad x \in \hat{I}$$

mit

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & p^{-1} \\ q-z & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} 0 \\ g \end{pmatrix}$$

Dieses System wird nun als (Volterra–) Integralgleichung geschrieben:

$$\mathbf{f} - \mathcal{A}\mathbf{f} = \mathbf{h} \qquad (\mathcal{A}\mathbf{f})(x) = \int_c^x \mathbf{A}(t)\mathbf{f}(t)\,dt \quad \mathbf{h}(x) = \mathbf{f}(c) + \int_c^x \mathbf{g}(t)\,dt$$

Fassen wir $\mathcal{A}$ als Integraloperator im Banachraum $\mathrm{C}(\hat{I}) \times \mathrm{C}(\hat{I})$ (Maximumsnorm) auf, so können wir sie durch die Neumannsche Reihe eindeutig lösen:

$$\mathbf{f} = \sum_{i=0}^{\infty} \mathcal{A}^i\,\mathbf{h}$$

Damit ist eine eindeutige Lösung $f \in \mathrm{AC}^1(\hat{I})$ gefunden, und da $\hat{I}$ beliebig war, ist der Satz bewiesen. **s.e.c.**

Bemerkung: f, f' können stetig auf einen regulären Randpunkt fortgesetzt werden.

Satz A.2 *Sind $u_{1,2}$ zwei Lösungen von (A.5) mit $W(u_1, u_2) = 1$, so läß t sich jede Lösung von (A.8) in der folgenden Form schreiben ($\alpha, \beta \in \mathbb{C}$):*

$$f(x) = u_1(x)\Big(\alpha + \int_c^x u_2(t)g(t)\,dt\Big) + u_2(x)\Big(\beta - \int_c^x u_1(t)g(t)\,dt\Big) \qquad \text{(A.10)}$$

$$f'(x) = u_1'(x)\Big(\alpha + \int_c^x u_2(t)g(t)\,dt\Big) + u_2'(x)\Big(\beta - \int_c^x u_1(t)g(t)\,dt\Big) \qquad \text{(A.11)}$$

Bemerkung: α, β stimmen mit Satz A.1 überein, falls $u_1(c) = p(c)u_2'(c) = 1$ und $u_1'(c) = u_2(c) = 0$ gilt.
Beweis: Es ist $\tau f - z\,f = g$ zu zeigen (der Rest folgt dann aus Satz A.1). (A.10) differenziert ergibt (A.11). Nun berechnen wir:

$$\begin{aligned}
(pf')' &= (pu_1')'\Big(\alpha + \int u_2 g\,dt\Big) + (pu_2')'\Big(\beta - \int u_1 g\,dt\Big) - p(u_1u_2' - u_1'u_2)g \\
&= (q - z)u_1\Big(\alpha + \int u_2 g\,dt\Big) + (q - z)u_2\Big(\beta - \int u_1 g\,dt\Big) - g \\
&= (q - z)f - g
\end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung bewiesen. **s.e.c.**

A.2 Grenzpunktfall — Grenzkreisfall

Wir kommen gleich zur Sache:

Definition A.1 *(***Weylsche–Alternative***) Sei τ ein auf $I = (a, b)$ definierter Differentialausdruck. Wir sagen, bei a liegt der* Grenzkreisfall *(GKF) vor, wenn für ein $z_0 \in \mathbb{C}$ alle Lösungen von $\tau u = z_0\,u$ in $\mathrm{L}^2(a, c)$ (mit $a < c < b$) liegen. Andernfalls sagen wir, es liegt der* Grenzpunktfall *(GPF) vor. Analog für b.*

Der GKF liegt insbesondere dann bei b vor, wenn b regulär ist. Es liegen dann nämlich für alle $z \in \mathbb{C}$ alle Lösungen von (A.5) in $\mathrm{L}^2(c, b)$. Das gilt sogar allgemein im GKF:

Satz A.3 *Wenn für ein $z_0 \in \mathbb{C}$ alle Lösungen u von (A.5) in $\mathrm{L}^2(c, b)$ liegen, so gilt das für alle $z \in \mathbb{C}$. Analog für a.*

Beweis: u erfülle (A.5). Wir wählen zwei linear unabhängige Lösungen u_1, u_2 von $\tau u_{1,2} = z_0\,u_{1,2}$ mit $W(u_1, u_2) = 1$. Dann können wir wegen $\tau u - z_0\,u = (z - z_0)u$ und Gleichung (A.10) schreiben ($a < c < x < b$):

$$u(x) = \alpha u_1(x) + \beta u_2(x) + (z - z_0)\int_c^x (u_1(x)u_2(t) - u_1(t)u_2(x))u(t)\,dt \qquad \text{(A.12)}$$

Wegen $u_{1,2} \in \mathrm{L}^2(c, b)$ existiert ein $M \geq 0$ mit

$$\int_c^b |u_{1,2}(t)|^2\,dt \leq M$$

Wir wählen c zunächst so nahe bei b, daß $|z - z_0| M^2 \leq 1/4$ gilt. Als nächstes schätzen wir das Integral mit der Cauchy–Schwarz–Ungleichung ab:

$$\begin{aligned}
&\Big| \int_c^x (u_1(x)u_2(t) - u_1(t)u_2(x))u(t)\, dt \Big|^2 \\
&\qquad \leq \int_c^x |u_1(x)u_2(t) - u_1(t)u_2(x)|^2\, dt \int_c^x |u(t)|^2\, dt \\
&\qquad \leq M\Big(|u_1(x)|^2 + |u_2(x)|^2\Big) \int_c^x |u(t)|^2\, dt
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\int_c^x |u(t)|^2\, dt &\leq (|\alpha|^2 + |\beta|^2)M + 2|z - z_0| M^2 \int_c^x |u(t)|^2\, dt \\
&\leq (|\alpha|^2 + |\beta|^2)M + \frac{1}{2} \int_c^x |u(t)|^2\, dt
\end{aligned}$$

$$\int_c^x |u(t)|^2\, dt \leq 2(|\alpha|^2 + |\beta|^2)M$$

Da $u \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I)$ folgt $u \in \mathrm{L}^2(c, b)$ für jedes $c \in (a, b)$. **s.e.c.**

Wir interessieren uns nun für spezielle Lösungen von (A.5), die uns zunächst die Existenz einer Lösung von (A.5) für $\mathrm{Im}(z) \neq 0$ in $\mathrm{L}^2(c, b)$ sichern. Dazu führen wir folgende Abkürzung ein ($a < c < x < b$):

$$[u]_x = \frac{W(u, \overline{u})_x}{z - \overline{z}} \in \mathbb{R} \qquad u \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I),\ x \in [c, b) \tag{A.13}$$

Für eine Lösung u von (A.5) folgt aus (A.4) mit $f = g \equiv u$ ($\tau \overline{u} = \overline{z}\, \overline{u}$):

$$[u]_x = [u]_c + \int_c^x |u(t)|^2\, dt \qquad \tau u = z\, u \tag{A.14}$$

$[u]_x$ ist daher streng monoton steigend und existiert genau dann, wenn $u \in \mathrm{L}^2(c, b)$ gilt.

Definition A.2 *Wir bezeichnen eine Lösung $u_b \neq 0$ von (A.5) für $\mathrm{Im}(z) \neq 0$ mit $[u]_b = 0$ als* Weyl–Lösung *bei b.*

Alle Weyl–Lösungen lassen sich mit zwei Lösungen $u_{1,2}$ von (A.5), die $[u_1]_c = [u_2]_c = 0$ und $W(u_1, u_2)_c = 1$ erfüllen, bis auf ein komplexes Vielfaches in der Form

$$u = w u_1 + u_2 \qquad w \in \mathbb{C} \tag{A.15}$$

schreiben ($[u_1]_x > 0$ für $c < x$ wegen (A.14)). Wir definieren weiter die Menge:

$$K(x) = \{w \in \mathbb{C} | [w u_1 + u_2]_x \leq 0\} \qquad x \in (c, b) \tag{A.16}$$

Wegen (A.14) gilt $K(x) \subset K(\hat{x})$ für $c < \hat{x} < x < b$. Die gesuchten Koeffizienten w liegen daher im Durchschnitt dieser Mengen:

$$K(b) = \bigcap_{x \in (c,b)} K(x) \tag{A.17}$$

Wir berechnen nun:

$$[wu_1 + u_2]_x = [u_1]_x\Big(|w - m(x)|^2 - r(x)^2\Big) \tag{A.18}$$

mit

$$m(x) = -\frac{W(u_2, \overline{u_1})_x}{W(u_1, \overline{u_1})_x}$$

$$\begin{aligned} r(x)^2 &= \Big(|W(u_2, \overline{u_1})_x|^2 + W(u_2, \overline{u_2})_x W(u_1, \overline{u_1})_x\Big)\Big(|z - \overline{z}|[u_1]_x\Big)^{-2} \\ &= \Big(|z - \overline{z}|[u_1]_x\Big)^{-2} \end{aligned}$$

$K(x)$ ist also eine kompakte Kreisscheibe (und wegen [KE] Satz 5.1 ist $K(b)$ sicher nichtleer) mit Mittelpunkt $m(x)$ und Radius $r(x)$. Da $r(x)$ streng monoton fallend und beschränkt ist, existiert $r(b) = \lim_{x\to b} r(x)$. Für $c < x < \hat{x} < b$ gilt $K(\hat{x}) \subset K(x)$ und daraus folgt wegen $|m(x) - m(\hat{x})| \le r(x) - r(b)$ die Existenz von $m(b) = \lim_{x\to b} m(x)$. Ist $w \in K(b)$, so folgt aus $|m(x) - w| \le r(x)$ durch Grenzübergang:

$$K(b) = \{w \in \mathbb{C} |\, |w - m(b)| \le r(b)\} \tag{A.19}$$

$K(b)$ ist daher eine kompakte Kreisscheibe (GKF) oder ein Punkt (GPF). Im GKF erhält man durch Grenzübergang ($[u_1]_b < \infty$):

$$[wu_1 + u_2]_b = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |w - m(b)| = r(b) \tag{A.20}$$

Im GPF erhält man aus (A.18) für $w = m(b)$ und $c < x < b$: $-[u_1]_x r(x)^2 \le [wu_1 + u_2]_x \le 0$ und aus $\lim\limits_{x\to b}[u_1]_x r(x)^2 = 0$ endgültig:

$$[wu_1 + u_2]_b = 0 \quad \Leftrightarrow \quad w = m(b) \tag{A.21}$$

Wir halten auch noch fest, daß wegen (A.14)

$$[u]_c = 0 \quad \Leftrightarrow \quad [u]_d \ne 0 \qquad \forall c, d \in [a, b]\ c \ne d \tag{A.22}$$

für alle $u \ne 0$ in $\mathrm{AC}^1_{loc}(I)$ mit $\tau u = z\, u$ gilt. Wir haben somit den folgenden Satz bewiesen:

Satz A.4 *Es existiert zumindest eine Weyl–Lösung. Alle Weyl–Lösungen lassen sich mit $u_{1,2}$ aus (A.15) bis auf ein komplexes Vielfaches in der Form*

$$u_b = wu_1 + u_2 \qquad \text{mit } |w - m(b)| = r(b) \tag{A.23}$$

schreiben. Es gilt

$$\int_c^b |u_b|^2\, dt = -[u_b]_c = -\frac{\mathrm{Im}(w)}{\mathrm{Im}(z)} \tag{A.24}$$

und daher $u_b \in \mathrm{L}^2(c, b)$. u_b kann nie $[u_b]_a = 0$ erfüllen. Analog für a.

Folgerungen: Aus (A.22) folgt insbesondere, daß $u_b(x) \ne 0$ und $u_b'(x) \ne 0$ für alle $x \in (a, b)$ gilt. Analog für a. Schreiben wir zwei Weyl–Lösungen u_a bzw. u_b bei a bzw. b in der Form

$$\begin{aligned} u_a &= wu_1 + u_2 \qquad && \text{mit } |w - m(a)| = r(a) \\ u_b &= \hat{w}u_1 + u_2 \qquad && \text{mit } |\hat{w} - m(b)| = r(b) \end{aligned}$$

so folgt: $W(u_a, u_b) = w - \hat{w} \ne 0$ (sonst wäre $[u_a]_b = [u_b]_a = 0$).

A.3 Selbstadjungierte Operatoren

Wir legen $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ fest und wählen zwei Weyl–Lösungen $u_{a,b}$ bei a, b mit $W(u_b, u_a)$=1. Aus Satz A.2 folgt, daß bei festem $g \in \mathrm{L}^2(I) \subset \mathrm{L}^1_{loc}(I)$ alle Lösungen f von

$$\tau f - z\, f = g \qquad f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I) \tag{A.25}$$

in folgender Form geschrieben werden können ($\alpha, \beta \in \mathbb{C}$):

$$f(x) \;=\; u_b(x)\Big(\alpha + \int_a^x u_a(t)g(t)\,dt\Big) + u_a(x)\Big(\beta + \int_x^b u_b(t)g(t)\,dt\Big) \tag{A.26}$$

$$f'(x) \;=\; u_b'(x)\Big(\alpha + \int_a^x u_a(t)g(t)\,dt\Big) + u_a'(x)\Big(\beta + \int_x^b u_b(t)g(t)\,dt\Big) \tag{A.27}$$

Um f eindeutig zu machen, legen wir einfach $\alpha = \beta = 0$ fest, und erklären den Operator:

$$(\mathrm{R}_z g)(x) = u_b(x)\int_a^x u_a(t)g(t)\,dt + u_a(x)\int_x^b u_b(t)g(t)\,dt \tag{A.28}$$

mit Definitionsbereich:

$$\mathfrak{D}(\mathrm{R}_z) = \mathrm{L}^2_0(I) \tag{A.29}$$

Wir fassen ihn als Resolvente eines durch τ erzeugten Operators auf und untersuchen daher $\mathfrak{R}(\mathrm{R}_z)$. Es gilt zumindest $\mathrm{R}_z g \in \mathfrak{D}(\tau)$ und $(\tau - z)\mathrm{R}_z g = g$ für alle $g \in \mathrm{L}^2_0(I)$. Wir können daher einen Operator T_z definieren:

$$\begin{array}{rccc} \mathrm{T}_z : & \mathfrak{R}(\mathrm{R}_z) & \rightarrow & \mathrm{L}^2(I) \\ & f & \mapsto & \tau f \end{array} \tag{A.30}$$

Für $g_{1,2} \in \mathrm{L}^2_0(I)$ gibt es ein kompaktes Intervall $[c, d] \subset I$ mit $g_{1,2}(x) = 0$ für $x \notin [c, d]$. Deshalb gilt für alle $x < c$:

$$(\mathrm{R}_z g_{1,2})(x) = u_a(x)\int_c^b u_b(t)g_{1,2}(t)\,dt \tag{A.31}$$

Und wegen $W(\overline{u_a}, u_a)_a = 0$ folgt daraus (mit (A.26) und (A.27)):

$$W(\overline{\mathrm{R}_z g_1}, \mathrm{R}_z g_2)_a = 0 \quad \forall g_{1,2} \in \mathrm{L}^2_0(I) \tag{A.32}$$

Analog zeigt man das Verschwinden von $W(\overline{\mathrm{R}_z g_1}, \mathrm{R}_z g_2)_b$. Ein Blick auf (A.7) zeigt nun, daß T symmetrisch ist. Und da $\mathfrak{R}(\mathrm{T}_z - z) = \mathfrak{D}(\mathrm{R}_z) = \mathrm{L}^2_0(I)$ dicht ist, ist zumindest ein Defekindex von T_z null. Wir werden als nächstes $\mathfrak{R}(\overline{\mathrm{R}_z}) \equiv \mathfrak{D}(\overline{\mathrm{T}_z})$ berechnen ([WD] Kapitel 5, Folgerung 6). Da R_z ein beschränkter Carlemanoperator ist, gilt $\mathfrak{D}(\overline{\mathrm{R}_z}) = \mathrm{L}^2(I)$ und $\overline{\mathrm{R}_z}$ ist durch die gleiche Bildungsvorschrift gegeben ([WD] Satz 6.13). Es gilt also für alle $g \in \mathrm{L}^2(I)$:

$$(\overline{\mathrm{R}_z} g)(x) = u_b(x)\int_a^x u_a(t)g(t)\,dt + u_a(x)\int_x^b u_b(t)g(t)\,dt \tag{A.33}$$

Wir zeigen nun:

$$\begin{array}{rl} \mathfrak{D}(\overline{\mathrm{T}_z}) = \{f \in \mathrm{L}^2(I)| & f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I); \tau f \in \mathrm{L}^2(I) \\ & W(u_a, f)_a = 0 \text{ falls GKF bei } a \\ & W(u_b, f)_b = 0 \text{ falls GKF bei } b\} \end{array} \tag{A.34}$$

Wir bezeichnen den obigen Raum zunächst mit $\mathfrak{D}$. Es ist nun $\mathfrak{D} = \mathfrak{R}(\overline{\mathrm{R}_z})$ zu zeigen. $\mathfrak{R}(\overline{\mathrm{R}_z}) \subset \mathfrak{D}$ ist einfach, denn es gilt $\mathfrak{R}(\overline{\mathrm{R}_z}) \subset \mathfrak{D}(\tau)$ und für den GKF folgt nach elementarer Rechnung (beachte (A.26) und (A.27)): $W(u_a, \overline{\mathrm{R}_z} g)_a = W(u_b, \overline{\mathrm{R}_z} g)_b = 0$. Es fehlt noch die Umkehrung $\mathfrak{D} \subset \mathfrak{R}(\overline{\mathrm{R}_z})$. Aus $f \in \mathfrak{D}$ folgt $g = (\tau - z) f \in \mathrm{L}^2(I) \subset \mathrm{L}^1_{loc}(I)$. Das heiß t aber, f ist in der Form

$$f = \alpha u_b + \beta u_a + \overline{\mathrm{R}_z} g \tag{A.35}$$

darstellbar (Satz A.2). Liegt bei a der GPF vor, so ist $u_b \notin \mathrm{L}^2(a, c)$ (sonst wäre $[u_b]_a = 0$). Also muß $\alpha = 0$ gelten, da $f, u_a, \overline{\mathrm{R}_z} g \in \mathrm{L}^2(a, c)$ gilt. Liegt bei a der GKF vor, so ist $W(u_a, f)_a = \alpha$. Es muß also in beiden Fällen $\alpha = 0$ gelten. Analog folgt $\beta = 0$ und damit die Behauptung.

Es sind also nur im GKF zusätzliche Randbedingungen notwendig. Bevor wir unsere Ergebnisse in einem Satz zusammenfassen, wollen wir noch eine allgemeinere Form der Randbedingung herleiten:

Lemma A.1 *Sei $v \in \mathfrak{D}(\tau)$ mit $W(\overline{v}, v)_a = 0$ und es gibt ein $\hat{f} \in \mathfrak{D}(\tau)$ mit $W(\overline{v}, \hat{f})_a \neq 0$.*[1] *Dann gilt*

$$W(v, f)_a = 0 \quad \Leftrightarrow \quad W(v, \overline{f})_a = 0 \qquad \forall f \in \mathfrak{D}(\tau) \tag{A.36}$$

und

$$W(v, f)_a = W(v, g)_a = 0 \quad \Rightarrow \quad W(\overline{g}, f)_a = 0 \qquad \forall f, g \in \mathfrak{D}(\tau) \tag{A.37}$$

Beweis: Für alle $f_1, \ldots, f_4 \in \mathfrak{D}(\tau)$ gilt die Plückersche Identität:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{2} p^2(x) \det \begin{vmatrix} f_1 & f_2 & f_3 & f_4 \\ f_1' & f_2' & f_3' & f_4' \\ f_1 & f_2 & f_3 & f_4 \\ f_1' & f_2' & f_3' & f_4' \end{vmatrix} (x) \\ &= W(f_1, f_2)_x W(f_3, f_4)_x + W(f_1, f_3)_x W(f_4, f_2)_x + W(f_1, f_4)_x W(f_2, f_3)_x \end{aligned}$$

Ihre Gültigkeit bleibt beim Grenzübergang $x \to a$ erhalten, da alle Grenzwerte existieren. Wählen wir $f_1 = v$, $f_2 = f$, $f_3 = \overline{v}$, $f_4 = \hat{f}$ so folgt (A.36). Wählen wir $f_1 = f$, $f_2 = \overline{g}$, $f_3 = v$, $f_4 = \hat{f}$ so folgt (A.37). **s.e.c.**

Gleichung (A.36) besagt, daß$\mathfrak{D}(\overline{\mathrm{T}_z})$ (und damit $\overline{\mathrm{T}_z}$) invariant unter komplexer Konjugation ist. Somit müssen beide Defektindizes gleich null sein und $\overline{\mathrm{T}_z}$ ist selbstadjungiert. Wir haben also den folgenden Satz bewiesen:

Satz A.5 *Liegt bei a der GKF vor, so sei eine Funktion $v \in \mathfrak{D}(\tau)$ mit $W(\overline{v}, v)_a = 0$ und $W(v, f)_a \neq 0$ für zumindest ein $f \in \mathfrak{D}(\tau)$ gegeben. Liegt bei b der GKF vor, so sei eine analoge Funktion w gegeben. Dann ist der Operator*

$$\begin{aligned} \mathrm{T}: \ \mathfrak{D}(\mathrm{T}) &\to \mathrm{L}^2(I) \\ f &\mapsto \tau f \end{aligned} \tag{A.38}$$

mit

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}) = \{ f \in \mathrm{L}^2(I) | \quad \begin{aligned} & f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(I); \tau f \in \mathrm{L}^2(I) \\ & W(v, f)_a = 0 \textit{ falls GKF bei } a \\ & W(w, f)_b = 0 \textit{ falls GKF bei } b \} \end{aligned} \tag{A.39}$$

[1] Bei a liegt dann der GKF vor.

selbstadjungiert. Seine Resolvente $\mathrm{R}_z(\mathrm{T})$ *ist für* $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ *durch*

$$(\mathrm{R}_z g)(x) = u_b(x)\int_a^x u_a(t)g(t)\,dt + u_a(x)\int_x^b u_b(t)g(t)\,dt \tag{A.40}$$

gegeben, und zwar mit Weyl–Lösungen $u_{a,b}$*, die* $W(u_b, u_a) = 1$ *und, falls der GKF bei* a, b *vorliegt,* $W(v, u_a)_a = W(w, u_b)_b = 0$ *erfüllen.*

Anmerkungen: Ist $z \in \rho(\mathrm{T})$ (und $\mathrm{Im}(z) = 0$), so bleibt die Formel für die Resolvente gültig, wenn Lösungen von (A.5) mit $u_a \in \mathrm{L}^2(a,c)$ bzw. $u_b \in \mathrm{L}^2(c,b)$ gefunden werden können. Dies ist insbesondere im GKF möglich.
Das Punktspektrum ist aufgrund der (getrennten) Randbedingungen einfach. Das Spektrum ist insgesamt höchstens zweifach ([NE] Paragraph 21.2 Folgerung 1).

Satz A.6 *Liegt an beiden Endpunkten der GKF vor, so ist die Resolvente* $\mathrm{R}_z(\mathrm{T})$ *ein Hilbert–Schmidt–Operator.*

Beweis: Dies folgt aus der Abschätzung:

$$\int_a^b \Big[\int_a^x |u_b(x)u_a(t)|^2 dt + \int_x^b |u_b(t)u_a(x)|^2 dt\Big] dx \leq 2\int_a^b |u_a(t)|^2 dt \int_a^b |u_b(s)|^2 ds$$

s.e.c.

Korollar A.6 *Daraus folgt, daß in diesem Fall das Spektrum rein diskret und einfach ist.*

$$\sigma(\mathrm{T}) = \sigma_{disc}(\mathrm{T}) \tag{A.41}$$

A.4 Zerlegungsmethode nach Neumark

Wir wollen noch kurz die sogenannte Zerlegungsmethode beschreiben, da es einen Zusammenhang mit den δ–Wechselwirkungen gibt:

Satz A.7 *Sei* T *der selbstadjungierte Differentialoperator aus Satz A.5. Seien* $\mathrm{T}_{+,-}$ *die folgenden Einschränkungen von* T*:*

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}_-) = \{f \in \mathrm{L}^2(a,c)|\quad \begin{array}{l} f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(a,c); \tau f \in \mathrm{L}^2(a,c); f(c) = 0; \\ W(v,f)_a = 0 \textit{ falls GKF bei } a\} \end{array} \tag{A.42}$$

$$\mathfrak{D}(\mathrm{T}_+) = \{f \in \mathrm{L}^2(c,b)|\quad \begin{array}{l} f \in \mathrm{AC}^1_{loc}(c,b); \tau f \in \mathrm{L}^2(c,b); f(c) = 0; \\ W(w,f)_b = 0 \textit{ falls GKF bei } b\} \end{array} \tag{A.43}$$

Dann gilt:

$$\sigma_{ess}(\mathrm{T}) = \sigma_{ess}(\mathrm{T}_-) \cup \sigma_{ess}(\mathrm{T}_+) \tag{A.44}$$

Anmerkungen: Da das wesentliche Spektrum von den Randbedingungen unabhängig ist ([WD] Satz 8.18), kann der Satz entsprechend verallgemeinert werden. Vergleiche auch [DS] Teil 2,XIII.7 Satz 3 und 4.
Beweis: Wir betrachten den Operator

$$\mathrm{T}_\infty \simeq \mathrm{T}_- \oplus \mathrm{T}_+ \qquad \mathrm{L}^2(a,b) \simeq \mathrm{L}^2(a,c) \oplus \mathrm{L}^2(c,b)$$

mit

$$(\hat{\tau} f)(x) = (\tau f)(x) \qquad x \neq c$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathrm{T}_\infty) = \{f \in \mathrm{L}^2(a,b) |\ & f \in \mathrm{AC}_{loc}(a,b)\ ; f' \in \mathrm{AC}_{loc}((a,b)\backslash\{c\});\\ & \hat{\tau} f \in \mathrm{L}^2(a,b); f(c) = 0;\\ & W(v,f)_a = 0 \text{ falls GKF bei } a\\ & W(w,f)_b = 0 \text{ falls GKF bei } b\}\end{aligned}$$

Das wesentliche Spektrum $\sigma_{ess}(\mathrm{T}_\infty)$ von T_∞ ist offensichtlich durch die Vereinigung von $\sigma_{ess}(\mathrm{T}_-)$ und $\sigma_{ess}(\mathrm{T}_+)$ gegeben, denn es gilt:

$$(\mathrm{T}_\infty - z)^{-1} \simeq (\mathrm{T}_- - z)^{-1} \oplus (\mathrm{T}_+ - z)^{-1}$$

(vgl. Gleichung 2.44) Aus einer zu Abschnitt 2.2 analogen Rechnung folgt weiter, daß T und T_∞ eindimensionale Fortsetzungen von $\hat{\mathrm{T}}$ sind.

$$\mathfrak{D}(\hat{\mathrm{T}}) = \{f \in \mathfrak{D}(\mathrm{T}) | f(c) = 0\}$$

Damit haben sie aber beide das gleiche wesentliche Spektrum ([WD] Satz 8.18) und die Behauptung ist bewiesen. **s.e.c.**

Literaturverzeichnis

[AG] Albeverio–Gesztesy–Høegh Krohn–Holden *Solvable Models in Quantum Mechanics* Springer (1988)

[CH] Courant–Hilbert *Methoden der mathematischen Physik* I Springer (1968)

[CL] Coddington–Levinson *Theory of Ordinary Differential Equations* McGraw–Hill (1955)

[DS] Dunford–Schwartz *Linear Operators* Wiley (2. Teil 1963)

[EE] Edmunds–Evans *Spectral Theory and Differential Operators* Oxford University Press (1987)

[EK] Eastham–Kalf *Schrödinger-type operators with continuous spectra* Pitman (1982)

[FL] Flammer *Spheroidal Wave Functions* Stanford University Press (1957)

[GK] Gohberg–Krein *Introduction to the Theory of Nonselfadjoint Operators* AMS-Translation Providence (1967)

[HE] Henze *Einführung in die Maßtheorie* B.I.– Wissenschaftsverlag (1985)

[IN] Ince *Ordinary Differential Equations* Dover (1965)

[JR] Jörgens–Rellich *Eigenwerttheorie gewöhnlicher Differentialgleichungen* Springer (1976)

[KE] Kelley *General Topology* Springer (1955)

[KM] Kamke *Differentialgleichungen* I Teubner (10. Aufl. 1983)

[LS] Levitan–Sargsjan *Sturm-Liouville and Dirac Operators* Kluwer Academic Publishers (1991)

[MF] Morse–Feshbach *Methods of Theoretical Physics* Mc Graw–Hill (1952)

[MS] Moon–Spencer *Field Theory Handbook* Springer (1988)

[MX] Meixner–Schäfke *Mathieusche Funktionen und Sphäroidfunktionen* Springer (1988)

[NE] Neumark *Lineare Differentialoperatoren* Akademie–Verlag (1967)

[PR] Prugovečki *Quantum Mechanics in Hilbert Space* Academic Press (2. Aufl. 1981)

[RS] Reed–Simon *Methods of Modern Mathematical Physics* Academic Press (1.Teil 1980, 4.Teil 1978)

[SC] Schechter *Operator Methods in Quantum Mechanics* North Holland (1981)

[SI] Simon *Trace Ideals and their Applications* Cambridge University Press (1979)

[ST] Stakgold *Greens Functions and Boundary Value Problems* Wiley (1979)

[SW] Schwabl *Quantenmechanik* Springer (1988)

[TM] Titchmarsh *Eigenfunction Expansions* Oxford University Press (1. Teil 1962 (2.Aufl.), 2.Teil 1958)

[WA] Walter *Gewöhnliche Differentialgleichungen* Springer (4.Aufl 1990)

[WD] Weidmann *Lineare Operatoren in Hilberträumen* Teubner (1976)

[WD2] Weidmann *Spectral Theory of Ordinary Differential Operators* Springer (1987)

[ag] Antoine–Gesztesy–Shabani *Exactly solvable models of sphere interactions in quantum mechanics* J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 3687-3712 (1987)

[de1] Dittrich–Exner–Šeba *Dirac operators with a spherically symmetric delta-shell interaction* J. Math. Phys. **30**, 2875 (1989)

[de2] Dittrich–Exner–Šeba *Dirac Hamiltonian with Coulomb potential and spherically symmetric shell contact interaction* J. Math. Phys. **33**, 2207 (1992)

[gm] Green–Moszkowski *Nuclear Coupling Schemes with a Surface Delta Interaction* Physical Review **139**, B 790-793 (1965)

[sh] Shabani *Finitly many δ interactions with supports on concentric spheres* J. Math. Phys. **29**, 660-664 (1988)

[wd] Weidmann *Zur Spektraltheorie von Sturm-Liouville-Operatoren* Math. Zeitschr. **98**, 268-302 (1967)