CHAPTER 1

Streutheorie für Schrödingeroperatoren räumlich 1-dimensional

1. Der Schrödingeroperator

Der freie Schrödingeroperator H_0 in $L^2(\mathbb{R})$ ist definiert durch:

$$H_0 := p^2 \tag{1}$$

$$m := \tfrac{1}{2}, \quad \hbar := 1, \quad p := -i\tfrac{d}{dx}, \quad \mathrm{D}(p) = H^{2,1}(\mathbb{R}), \quad \mathrm{D}(H_0) = H^{2,2}(\mathbb{R})$$

Es sei nun $v = v(x)$ reell, und

$$v(\cdot) \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}) \tag{2}$$

Anmerkung: Es gilt $L^1(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R}) \subseteq L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$.

V sei der durch die Funktion $v(x)$ maximal definierte Multiplikationsoperator in $L^2(\mathbb{R})$.

Der Schrödingeroperator H in $L^2(\mathbb{R})$ ist nun definiert als:

$$H := H_0 + V \tag{3}$$

$$\mathrm{D}(H) = \mathrm{D}(H_0)$$

H ist selbstadjungiert und es gilt:

$$\sigma_{ess}(H) = [0, \infty) \tag{4}$$

Für $f \in \mathrm{D}(H)$ gilt: $f \in L^2(\mathbb{R})$, $f, f' \in AC(\mathbb{R})$ und $f'' \in L^2(\mathbb{R})$ und daher folgt $f \in L^\infty(\mathbb{R})$. (vgl. [**Thi**] Bemerkung 3.3,4;2)

Daraus folgt:

$$||vf||_2 \le ||v||_2 \; ||f||_\infty < \infty \tag{5}$$

d.h.: $\mathrm{D}(H) \subset \mathrm{D}(V)$.

Der Kern K von $V(H_0 - E)^{-1}$ ist: (vgl. [**AGHH**])

$$K(x,y) = v(x)\frac{i}{k}e^{ik|x-y|} \tag{6}$$

$$E \in \mathbb{C} \setminus [0, \infty), \quad k = E^{\frac{1}{2}}, \quad \mathrm{Im}\, k(E) > 0$$

Der Kern ist $\in L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ (Prop. 2.7 [**B**]) und daher ist das Potential relativ kompakt. Mit dem Satz von Weyl (Satz 9.9 [**W**]) folgt dann obige Behauptung.

2. Jostlösungen und ihre Eigenschaften

Zur Untersuchung der Streumatrix und der Bindungszustände wird hier der direkte, elementare Weg über die Jostlösungen[1] gewählt.

Dazu betrachtet man die folgenden Bedingungen für das Potential V:

$$(7) \quad H(m): \qquad \int (1+|x|^m)|v(x)|dx < \infty, \qquad m = 0,1,2.$$

Die Jostlösungen $f_\pm$ von $Hf_\pm = Ef_\pm$ (im Distributionensinne) mit

$$(8) \qquad f_\pm(x \to \pm\infty) = e^{\pm ikx}, \quad k = E^{1/2}$$

sind nun definiert als die eindeutigen Lösungen von:

$$(9) \qquad f_\pm(x,E) = e^{\pm ikx} - \int_x^{\pm\infty} k^{-1} \sin k(x-y) v(y) f_\pm(y,E)dy,$$

Anmerkung: (a) Die Differentialgleichung mit Randbedingungen entspricht dieser Integralgleichung (Beweis durch Einsetzen).
(b) Gilt für $v(x) : v(x) \overset{x\to\pm\infty}{\longrightarrow} v_\pm$ und

(10)
$$\int_{-\infty}^{0} |v(x)-v_-|(1+|x|^m)dx + \int_0^\infty |v(x)-v_+|(1+|x|^m)dx < \infty, \quad m = 0,1,2$$

so sind die Jostlösungen $f_\pm$ von $Hf_\pm = Ef_\pm$ (im Distributionensinne) mit

$$(11) \qquad f_\pm(x \to \pm\infty) = e^{\pm ik_\pm x}, \quad k_\pm := (E - v_\pm)^{1/2}$$

die eindeutigen Lösungen von:

$$(12) \quad f_\pm(x,E) = e^{\pm ik_\pm x} - \int_x^{\pm\infty} k^{-1} \sin k(x-y)(v(y) - v_\pm) f_\pm(y,E)dy$$

Es gilt der folgende Satz:

---

[1]Gesztesy, F. : Scattering theory for one-dimensional systems with nontrivial spatial asymptotics. Lecture notes in mathematics 1218, 93-122 (1985)

Satz 1: Die Jostlösungen $f_\pm(x,E)$ sind unter der Bedingung $H(1)$ die eindeutigen Lösungen der Integralgleichung (9).

Beweis:

Die Lösung der Volterra-Integralgleichung für die Jostlösung f_+:

$$f_+(x,E) = e^{ikx} - \int_x^\infty k^{-1} \sin k(x-y) v(y) f_+(y,E) dy \tag{13}$$

erfolgt durch Iteration.

Beweisstruktur:

$$f = f_0 + Af, \quad \Rightarrow f = (1-A)^{-1} f_0 = \sum A^n f_0.$$

Nach diesem Muster definiert man:

$$\text{Es sei} \qquad f_0(x,E) := e^{ikx} \tag{14}$$

$$\text{und} \qquad f_n(x,E) := -\int_x^\infty k^{-1} \sin k(x-y) v(y) f_{n-1}(y,E) dy, \tag{15}$$

$$\text{dann gilt:} \qquad f_+(x,E) = \textstyle\sum_{n=0}^\infty f_n(x,E), \tag{16}$$

wenn die Reihe konvergiert. Für den Nachweis der Konvergenz ist daher die Abschätzung der f_n notwendig. Es gilt:

$$|k^{-1} \sin k(x-y)| \le b_1 e^{(y-x)\mathrm{Im}k}, \qquad x \le y, k > 0 \tag{17}$$

Definiert man:

$$Q(x) := b_1 \int_x^\infty dy |v(y)| \tag{18}$$

so gilt:

$$Q(x) \le: const < \infty \text{ für alle } x \in \mathbb{R}. \tag{19}$$

Für f_n gilt:

$$|f_n| \le \frac{1}{n!} [Q(x)]^n e^{-x\mathrm{Im}k}. \tag{20}$$

Bew.:

Für $n = 1$ gilt:

$$\begin{aligned} |f_1| &\leq \int_x^\infty b_1 e^{(y-x)\mathrm{Im}k} |v(y)| e^{-y\mathrm{Im}k} dy \\ &\leq b_1 e^{-x\mathrm{Im}k} \int_x^\infty |v(y)| \\ &= e^{-x\mathrm{Im}k} Q(x). \end{aligned} \tag{21}$$

Für $n + 1$ gilt:

$$\begin{aligned} |f_{n+1}| &\leq \int_x^\infty b_1 e^{(y-x)\mathrm{Im}k} |v(y)| |f_n(y)| dy \\ &\leq \int_x^\infty b_1 e^{(y-x)\mathrm{Im}k} |v(y)| \frac{1}{n!} [Q(y)]^n e^{-y\mathrm{Im}k} dy \\ &\leq e^{-x\mathrm{Im}k} \frac{1}{n!} \int_x^\infty \underbrace{b_1 |v(y)|}_{-\frac{dQ}{dy}} Q^n(y) dy \\ &= e^{-x\mathrm{Im}k} \frac{1}{(n+1)!} Q^{n+1}(x). \end{aligned} \tag{22}$$

Man erhält insgesamt folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned} |f_+(x,E)| &\leq \sum_{n=0}^\infty |f_n| \leq \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!} [Q(x)]^n e^{-x\mathrm{Im}k} \\ &= e^{-x\mathrm{Im}k} e^{Q(x)} \leq b e^{-x\mathrm{Im}k}, \quad k > 0. \end{aligned} \tag{23}$$

Die Reihe $f_+ = \sum_{n=0}^\infty f_n$ konvergiert gleichmäßig für alle $x \in N \subset \mathbb{R}$ und $k \in M, \mathrm{Im}k > 0$, wobei N, M kompakt sind. Da die f_n holomorph in k sind, ist auch die Summe holomorph in $k, \mathrm{Im}k > 0$.

f_- und $g_\pm$ (siehe Gleichung (26)) werden völlig analog behandelt. □

Anmerkungen: (1) Fuer den Fall, der $k = 0$ inkludiert verwendet man folgende Abschätzung:

$$|k^{-1} \sin k(x-y)| \leq c \frac{y-x}{1+|k|(y-x)} e^{(y-x)\mathrm{Im}k}, \qquad x \leq y \tag{24}$$

Dann wird Q zu

$$Q_\pm(x) := c \int_x^{\pm\infty} dy \frac{|y|}{1+|k||y|} |v(y)|, \quad x \gtrless 0. \tag{25}$$

(2) Man sieht, daß fuer die Existenz von $f_\pm$ für $k \neq 0$ die Bedingung $m = 0$ genügt.

Es werden nun zwei weitere als $g_\pm$ bezeichnete Lösungen der Schrödingergleichung $Hg_\pm = Eg_\pm$ (im Distributionensinne) mit

$$g_\pm(x \to \pm\infty) = e^{\mp ikx}$$

definiert:

$$g_\pm(x,E) = e^{\mp ikx} - \int_x^{\pm\infty} k^{-1} \sin k(x-y) v(y) g_\pm(y,E) dy \tag{26}$$

Anmerkung: (a) Für $E \in \mathbb{R}^+$ gewinnt man $g_\pm$ durch komplexe Konjugation.
(b) Diese Konjugation entspricht einem Zeitumkehroperator und ist antiunitär.

Die Wronskideterminante ist definiert durch: $W(x,y) := xy' - x'y$.

Für die Wronskideterminante $W(f_\pm, g_\pm)$ ergibt sich damit:

$$W(f_\pm, g_\pm) = \mp 2ik \neq 0, \quad E \in \mathbb{R}^+. \tag{27}$$

d.h. $f_\pm$ und $g_\pm$ sind zwei linear unabhängige Lösungen der Differentialgleichung zum Wert E. Die Wronskideterminante ist als Funktion von x konstant.

Daher können $f_\pm(x,E)$ wie folgt als Linearkombinationen geschrieben werden:

$$f_\pm(x,E) = c_\mp(E) f_\mp(x,E) + d_\mp(E) g_\mp(x,E), \quad E > 0. \tag{28}$$

Man berechnet:

$$W(f_-, f_+) = W(f_-, c_- f_- + d_- g_-) = d_- W(f_-, g_-) = d_- 2ik, \quad E > 0. \tag{29}$$

Analog erhält man für die Koeffizienten $c_\mp(E), d_+(E)$:

$$\begin{aligned} d_+(E) = d_-(E) &= \frac{1}{2ik} W(f_-, f_+), \quad E > 0, \\ c_-(E) &= -\frac{1}{2ik} W(g_-, f_+), \quad E > 0, \\ c_+(E) &= -\frac{1}{2ik} W(f_-, g_+), \quad E > 0. \end{aligned} \tag{30}$$

Es gilt nun das folgende Lemma.

Lemma 2:

(31) Definiere $W(E) := W(f_-(E), f_+(E)), \quad E \in \mathbb{C}$,

dann gilt für m=1:

(i) $W(E)$ ist analytisch in $\mathbb{C} \setminus [0, \infty)$, stetig auf $\mathbb{R}$ und $W(E) \neq 0$ für $E \in \mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$.

(ii) Entweder ist $W(0) \neq 0$ oder $W(0) = 0$ und $\lim_{E \to 0} E^{-1/2} W(E) = i\gamma \in i\mathbb{R} \setminus \{0\}$,
$\mathrm{Im} E^{1/2} \geq 0$.
Daraus folgt, daß $d(E)$ nur eine endliche Anzahl von Nullstellen hat.

(iii) Sei $d(E_0) = 0$ für $E_0 \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, dann ist $E_0 < 0$ und

$$(32) \quad \frac{d(d(E))}{dE}\Big|_{E=E_0} = (2\pi i E_0^{1/2})^{-1} \int_{\mathbb{R}} dx f_-(E_0, x) f_+(E_0, x) \neq 0.$$

Das heißt: alle Nullstellen von $d(E)$ sind einfach.

Beweis:

(i): Mit der Identität:

$$(33) \qquad W(a, b)W(c, d) = W(a, d)W(c, b) - W(a, c)W(d, b)$$

folgt für $E > 0$:

$$\begin{aligned} & W(f_-, f_+)W(f_-, f_+)^* = W(f_-, f_+)W(g_-, g_+) \\ & = W(f_-, g_+)W(g_-, f_+) - W(f_-, g_-)W(g_+, f_+) \\ & = W(f_-, g_+)W(f_-, g_+)^* - W(f_-, g_-)W(f_+, g_+) \\ (34) \qquad & = |W(f_-, g_+)|^2 + 4k^2 > 0 \qquad \square \end{aligned}$$

3. Streutheorie

Die physikalischen Lösungen $\psi_\pm(x, E)$ von $H\psi_\pm = E\psi_\pm$ (im Distributionensinne) sind durch folgendes asymptotisches Verhalten gekennzeichnet:

$$(35) \qquad \psi_+(x, E) = \begin{cases} e^{ikx} + R^l(E)e^{-ikx} & x \to -\infty \\ \\ T^l(E)e^{ikx} & x \to \infty \end{cases},$$

und

$$(36) \qquad \psi_-(x, E) = \begin{cases} T^r(E)e^{-ikx} & x \to -\infty \\ \\ e^{-ikx} + R^r(E)e^{ikx} & x \to \infty \end{cases}.$$

Anmerkung:
(1) Denkt man sich zum Beispiel bei ψ_+ die Zeitabhängigkeit $e^{-i\omega t}$ dazu, so, sieht man, daß ψ_+ asymptotisch einer nach rechtslaufenden ebenen Welle mit einem nach links reflektierten Anteil R^l und einem

nach rechts durchgelassenen Anteil T^l, entspricht, woraus sich die Bezeichnungen Transmissions- und Refflexionskoeffizienten für die Größen T und R erklären.

Die "on shell"-Streumatrix lautet daher:

$$S(E) = \begin{pmatrix} T^l(E) & R^r(E) \\ R^l(E) & T^r(E) \end{pmatrix}, \quad E > 0. \tag{37}$$

(2) Der Streuoperator bildet asymtotisch freie Wellenpakete ($t \to -\infty$) in wieder solche ab ($t \to \infty$). Die freie Energiedarstellung wird durch die unitäre Transformation

$$\begin{aligned} & f_x \to f_E \\ & (Uf)(E) = \frac{1}{\sqrt{2}} E^{-1/4} \begin{pmatrix} \hat{f}(\sqrt{E}) \\ \hat{f}(-\sqrt{E}) \end{pmatrix} \in L^2([0,\infty), dE;\ \mathbb{C}^2) \end{aligned} \tag{38}$$

Anschaulich: Die Energie kann nur positiv sein, zu jeder Energie gibt es zwei Impulswerte. In der Energiedarstellung ist der Streuoperator diagonal, der Streuoperator zu fester Energie E heißt Streumatrix $S(E)$. Sie wirkt daher im Raum $\mathbb{C}^2$ und ist daher eine unitäre 2×2-Matrix ($S(E) \in U(2,\ \mathbb{C})$).

(3) Der Streuoperator S vertauscht mit dem Erzeugenden der freien Zeitentwicklung H_0 (vgl. AJS[2] Prop. 4.7) und kann daher in der Energiedarstellung als $S = \int_{\sigma(H_0)} S(E) dE$ dargestellt werden. Die Faser $S(E)$ heißt die "on shell"-Streumatrix. Diese kann mit Hilfe der allgemeinen Formel von Kuroda[3] Theorem 6.3) direkt berechnet werden. Einfache Rechnung ergibt völlige Übereinstimmung, mit den hier angeführten Formeln.

Stellt man ψ_+ und ψ_- als Linearkombinationen von $f_\pm$ und $g_\pm$ dar und errechnet die Koeffizienten durch Vergleich der Asymptotik, so erhält man:

$$\begin{aligned} R^l f_- + g_- &= T^l f_+, \\ T^r f_- &= R^r f_+ + g_+. \end{aligned} \tag{39}$$

[2]Amrein, W.O., Jauch, J.M., Sinha, K.B. : Scattering theory in quantum mechanics. W.A. Benjamin, Inc. (1977)

[3]Kuroda, S.T. : Scattering theory for differential operators I, J. Math. Soc. Japan **25**, 75-104 (1973)

Damit ergibt sich für die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten:

$$T^l(E) = T^r(E) = \frac{1}{d_-(E)} = \frac{1}{d_+(E)} = \frac{2ik}{W(f_-, f_+)},$$

$$R^l(E) = \frac{c_-(E)}{d_-(E)} = -\frac{W(g_-, f_+)}{W(f_-, f_+)}, \tag{40}$$

$$R^r(E) = \frac{c_+(E)}{d_+(E)} = -\frac{W(f_-, g_+)}{W(f_-, f_+)}, \quad E > 0.$$

Anmerkung: (a) Diese Koeffizienten sind wegen Lemma 2 wohldefiniert.

Für die Streumatrix $S(E)$ gilt nun:

Satz 3: Die Streumatrix $S(E), E > 0$ ist:

(i) unitär
(ii) Die Phasenverschiebung $\delta(E)$ ist gegeben durch:

$$e^{2i\delta(E)} := \det S(E) = \frac{T(E)}{T(E)^*}. \tag{41}$$

Beweis:

$$U = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \text{ unitär, heißt } \Leftrightarrow U^*U = UU^* = 1 \Leftrightarrow \begin{cases} |A|^2 + |C|^2 = 1 \\ |B|^2 + |D|^2 = 1 \\ A^*B + C^*D = 0 \end{cases}$$

$$(a) \quad |T|^2 + |R^l|^2 = \frac{4k^2}{|W(f_-, f_+)|^2} + \frac{|W(g_-, f_+)|^2}{|W(f_-, f_+)|^2} = 1$$

$$(b) \quad |T|^2 + |R^r|^2 = \frac{4k^2}{|W(f_-, f_+)|^2} + \frac{|W(f_-, g_+)|^2}{|W(f_-, f_+)|^2} = 1$$

$$(c) \quad T^*R^r + R^{*l}T = \frac{2ik}{W(f_-, f_+)^*}\frac{-W(f_-, g_+)}{W(f_-, f_+)} + \frac{2ik}{W(f_-, f_+)}\frac{-W(g_-, f_+)^*}{W(f_-, f_+)^*} = 0$$

wobei Gleichung (34) und (27) verwendet wurden.

(ii) ergibt sich unmittelbar aus den Eigenschaften von $f_\pm$, $g_\pm$ und

(42)

$$\det S = T^2 - R^r R^l = T^2 + \frac{T}{T^*} R^l R^{l*} = \frac{T}{T^*}(T^*T + R^l R^{l*}) = \frac{T}{T^*}. \square$$

Die Berechnung der entsprechenden Wronskideterminanten, wobei man z.B. f_+ aus (13) an der Stelle $x = \pm\infty$ nimmt, liefert:

$$(i)\ W(f_-, f_+) = 2ik - \int_{\mathbb{R}} dy v(y) e^{\mp iky} f_\pm, \tag{43}$$

$$(ii)\ W(f_-, g_+) = -\int_{\mathbb{R}} dy v(y) e^{-iky} g_-, \tag{44}$$

$$(iii) W(g_-, f_+) = -\int_{\mathbb{R}} dy v(y) e^{iky} g_+. \tag{45}$$

Bibliography

[AGHH] Albeverio, S., Gesztesy, F., Høegh-Krohn, R., Holden, H.: Solvable models in quantum mechanics. Springer (1988)

[AJS] Amrein, W.O., Jauch, J.M., Sinha, K.B. : Scattering theory in quantum mechanics. W.A. Benjamin, Inc. (1977)

[B] Berthier, A.M. : Spectral theory and wave operators for the schrödinger equation. Pitman (1982)

[G] Gesztesy, F. : Scattering theory for one-dimensional systems with nontrivial spatial asymptotics. Lecture notes in mathematics 1218, 93-122 (1985)

[Ku] Kuroda, S.T. : Scattering theory for differential operators I, J. Math. Soc. Japan **25**, 75-104 (1973)

[RS I] Reed, M., Simon, B. : Methods of modern mathematical physics
Vol.I Functional analysis (1972), Academic Press

[RS II] Vol. II Fourier analysis, self-adjointness (1975)

[RS III] Vol. III Scattering theory (1979)

[RS IV] Vol.IV Analysis of operators (1978)

[T] Thaller, B. : The Dirac equation, Lecture note, University of Graz (1988)

[Thi] Thirring, W. : Lehrbuch der mathematischen Physik 3, Quantenmechnik von Atomen und Molekülen. Springer (1979)

[W] Weidmann, J. : Lineare Operatoren in Hilberträumen. Springer (1976)