5 Fouriertransformation auf L^2

5.1 Definition:
Ein beschränkter linearer Operator T ist eine Abbildung von einem normierten Raum $(V_1, \|\cdot\|_1)$ in einen normierten Raum $(V_2, \|\cdot\|_2)$ für die gilt

$$\exists C < \infty \text{ so dass } \|Tv\|_2 \leq C\,\|v\|_1 \quad \forall v \in V_1\,.$$

5.2 Satz:
Sei T eine lineare Abbildung zwischen normierten Räumen V_1, V_2. Dann sind äquivalent

(i) T ist stetig bei Null

(ii) T ist überall stetig

(iii) T ist beschränkt

Beweis: $(i) \Rightarrow (ii)$. Sei $v_n \to v \in V_1$, dann ist

$$\lim_{n\to\infty} \|Tv_n - Tv\|_2 = \lim_{n\to\infty} \|T(v_n - v)\|_2 = 0,$$

also $Tv_n \to Tv$ in V_2.

$(ii) \Rightarrow (iii)$ Wenn T nicht bechränkt wäre, dann gäbe es eine Folge $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}$ mit $\|v_n\| = 1$ für all n, aber $\|Tv_n\|_2 \to \infty$. Dann ist $w_n = \frac{v_n}{\|Tv_n\|_2}$ eine Nullfolge in V_1, aber $\|Tw_n\|_2 = \left\|\frac{Tv_n}{\|Tv_n\|_2}\right\|_2 = 1 \not\to 0$ Widerspruch.

$(iii) \Rightarrow (i)$ Sei $\|v_n\|_1 \to 0$, dann gilt $\|Tv_n\|_2 \leq C\,\|v_n\|_1 \to 0$ □

Bemerkung: Auf unendlich dimensionalen Vektorräumen sind lineare Operatoren *nicht* notwendigerweise beschränkt, also stetig.

5.3 Beispiel:

$$\ell_0 = \{(x_1, x_2, \ldots) \mid x_n \in \mathbb{C} \text{ und } \exists m \in \mathbb{N}\colon x_n = 0\ \forall n > m\}$$

mit der Norm $\|x\|_{\ell_0} = \sum_{n=1}^{\infty} |x_n|$. Dann ist

$$T\colon \ell_0 \to \ell_0,\ x \to Tx = (x_1, 2x_2, 3x_3, \ldots)$$

linear, aber nicht beschränkt, da

$$\|e_n\|_{\ell_0} = 1, \text{ aber } \|Te_n\| = n \to \infty$$

5.4 Proposition:
Die Menge $\mathcal{L}(V_1, V_2)$ der beschränkten linearen Operatoren von einem normierten Raum $(V_1, \|\cdot\|_1)$ in einen normierten Raum $(V_2, \|\cdot\|_2)$ ist mit der Norm (Operatornorm)

$$\|T\|_{\mathcal{L}(V_1,V_2)} := \sup_{v\in V_1, \|v\|=1} \|Tv\|_2$$

selbst ein normierter Raum.

Falls $(V_2, \|\cdot\|_2)$ vollständig ist, dann ist auch $\mathcal{L}(V_1, V_2)$ vollständig.

Beweis: $\mathcal{L}(V_1, V_2)$ ist offensichtlich ein Vektorraum und die Normeigenschaften (Definitheit, Homogenität und Dreiecksungleichung) von $\|\cdot\|_{\mathcal{L}(V_1,V_2)}$ folgen alle aus den Normeigenschaften von $\|\cdot\|_2$ (Übungsaufgabe!).

Um die Vollständigkeit von $\mathcal{L}(V_1, V_2)$ zu zeigen, stellt man zunächst fest, dass falls $(T_n)_{n\in\mathbb{N}}$ in $\mathcal{L}(V_1, V_2)$ eine Cauchyfolge ist, dann auch $(T_n v)_{n\in\mathbb{N}}$ in V_2 für jedes $v \in V_1$. Wenn V_2 vollständig ist, konvergiert diese Cauchyfolge und wir bezeichnen den Limes mit Tf. Es bleibt zu zeigen, dass $T \in \mathcal{L}(V_1, V_2)$ und, dass $T_n \to T$ in $\mathcal{L}(V_1, V_2)$. Sei dazu $\varepsilon > 0$ und wähle $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\|T_n - T_m\| \le \varepsilon \quad \forall n, m \ge n_0 \,.$$

Sei $v \in V_1$, $\|v\|_1 \le 1$. Wähle $m_0 = m_0(\varepsilon, v) \ge m_0$ mit

$$\|T_{m_0} v - Tv\|_2 \le \varepsilon \,.$$

Es folgt für alle $n \ge n_0$, dass $\|T_n - T\| \le 2\varepsilon$, denn

$$\|T_n v - Tv\| \le \|T_n v - T_{m_0} v\| + \|T_{m_0} v - Tv\| \le \|T_n - T_{m_0}\| + \varepsilon \le 2\varepsilon \,.$$

Daher gilt $\|T\| < \infty$ (sogar $\|T\| \le \liminf \|T_n\|$) und $\|T_n - T\| \to 0$. $\square$

5.5 Satz (Fortsetzungssatz)**:**
Sei $D_1 \subset V_1$ ein dichter Teilraum eines normierten Raumes $(V_1, \|\cdot\|_1)$ und sei $(V_2, \|\cdot\|_2)$ ein vollständiger normierter Raum und $T\colon D_1 \to V_2$ linear und beschränkt.

Dann besitzt T eine eindeutige lineare beschränkte Fortsetzung $\tilde{T}\colon V_1 \to V_2$ und es gilt $\|\tilde{T}\|_{\mathcal{L}(V_1,V_2)} = \|T\|_{\mathcal{L}(D_1,V_2)}$.

Beweis: Sei $v \in V_1$, dann gibt es nach Voraussetzung eine Folge (v_n) in D_1 mit $\|v_n - v\|_1 \to 0$. Da (v_n) konvergiert, ist die Folge insbesondere Cauchy, d.h. zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es ein N so, dass $\|v_n - v_m\|_1 \leq \varepsilon$ für $n, m \geq N$. Dann ist $\|Tv_n - Tv_m\|_2 = \|T(v_n - v_m)\|_2 \leq \|T\| \, \|v_n - v_m\|_1 \leq \|T\| \, \varepsilon$, und somit ist (Tv_n) eine Cauchyfolge in V_2. Da V_2 vollständig ist, konvergiert $Tv_n \to w$ für ein $w \in V_2$. Dabei hängt g nicht von der Wahl der Folge (v_n) ab, denn sei (v_n') eine andere Folge in D_1 mit $\|v_n' - v\|_1 \to 0$, dann konvergiert auch die Folge $v_1, v_1', v_2, v_2', \ldots$ gegen v und mit obigem Argument $Tv_1, Tv_1', Tv_2, Tv_2', \ldots$ gegen $\widetilde{w} \in V_2$. Da aber jede Teilfolge einer konvergenten Folge gegen den gleichen Grenzwert konvergiert, gilt $w = \lim Tv_n = \widetilde{w} = \lim Tv_n'$. Damit können wir $\widetilde{T}v := w$ definieren. Die Linearität von $\widetilde{T}$ ist klar aus der Konstruktion. Die Beschränktheit folgt aus

$$\|\widetilde{T}v\|_2 = \lim_{n\to\infty} \|\widetilde{T}v_n\|_2 \leq \limsup_{n\to\infty} \|T\| \, \|v_n\|_1 = \|T\| \, \|v\|_1 \,.$$

Damit ist $\widetilde{T}$ beschränkt, infolgedessen stetig und somit die eindeutige Fortsetzung von T (die Eindeutigkeit ist klar, da zwei stetige Abbildungen die auf einer dichten Teilmenge übereinstimmen, überall übereinstimmen). $\square$

5.6 Satz:
Die Fouriertransformation $\mathcal{F} \colon \mathcal{S} \to L^2$ (und analog für $\mathcal{F}^{-1}$) läßt sich eindeutig zu einem linearen beschränkten Operator $\mathcal{F} \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ mit $\|\mathcal{F}\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = 1$ fortsetzen.

Außerdem gilt für $f \in L^2$, dass

$$\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2} \;\; \textit{und} \; \mathcal{F}^{-1}\mathcal{F} = \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = id_{L^2}$$

Beweis: Wir haben in Satz 3.10 gezeigt, dass für $f \in \mathcal{S}$ gilt $\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2}$. Also ist $\mathcal{F} \colon L^2 \supset \mathcal{S} \to L^2$ beschränkt mit Norm 1 und läßt sich gemäß Satz 5.5 fortsetzten.

Da $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}$, $\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}$ und id_{L^2} stetige Abbildungen auf L^2 sind, welche gemäß Satz 3.8 auf der dichten Teilmenge $\mathcal{S}$ übereinstimmen, müssen sie auf ganz L^2 übereinstimmen.

Da $\|\mathcal{F}\| = 1$ gilt $\|\mathcal{F}f\| \leq \|f\|$ (Allgemein gilt: $\|Av\|_{V_2} \leq \|A\|_{\mathcal{L}(V_1,V_2)} \|v\|_{V_1}$). Andererseits ist $\|f\| = \|\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f\| \leq \underbrace{\|\mathcal{F}^{-1}\|}_{=1} \|\mathcal{F}f\|$, also ist $\|f\| = \|\mathcal{F}f\|$ $\square$

5.7 Definition:
Ein linear beschränkter Operator $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ zwischen Hilberträumen $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ heißt *unitär*, falls U surjektiv ist und $\langle U\phi, U\psi \rangle_{\mathcal{H}_2} = \langle \phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_1}$ für alle $\psi, \phi \in \mathcal{H}_1$ gilt.

Bemerkung: Wegen der Polarisationsidentität ist U genau dann unitär, wenn U surjektiv ist und $\|U\psi\|_{\mathcal{H}_2} = \|\psi\|_{\mathcal{H}_1}$ für alle $\psi \in \mathcal{H}_1$ gilt.

5.8 Korollar:
Die Fouriertransformation ist eine unitäre Operation auf $L^2(\mathbb{R}^d)$.

5.9 Lemma (Lemma von Riemann-Lebesgue, vgl. Satz 3.3)**:**
Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, dann ist $\mathcal{F}f \in C_\infty(\mathbb{R}^d)$.

Beweis: Satz 5.5 liefert sogar, dass $\mathcal{F}\colon (L^1(\mathbb{R}^d), \|\cdot\|_{L^1}) \to (C_\infty(\mathbb{R}^d), \|\cdot\|_\infty)$ eine beschränkte Abbildung ist:

$(L^\infty, \|\cdot\|_\infty)$ ist vollständig, $\mathcal{S}$ liegt dicht in L^1 und $\mathcal{F}\colon L^1 \supset \mathcal{S} \to C_\infty$ ist beschränkt, denn

$$\|\mathcal{F}f\|_\infty = \sup_{k \in \mathbb{R}^d} |(\mathcal{F}f)(k)| \leq \sup_{k \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int \underbrace{|\mathrm{e}^{ikx}|}_{=1} |f(x)| \,\mathrm{d}x = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \|f\|_{L^1}$$

$\square$

5.1 Exkurs: „Heisenbergsche Unschärferelation"

Für $f \in L^2(\mathbb{R})$ mit $\|f\|_{L^2} = 1$ ist $|f(x)|^2$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Der Erwartungswert der Verteilung ist

$$E[f] = \int_{\mathbb{R}} x|f(x)|^2 \,\mathrm{d}x =: a$$

Wegen $\|\hat{f}\|_{L^2} = 1$ definiert auch $|\hat{f}(k)|^2$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte („Impulsverteilung") und wie zuvor setzen wir

$$E[\hat{f}] = \int_{\mathbb{R}} k|\hat{f}(k)|^2 \,\mathrm{d}k =: b\,.$$

Für beide Verteilungen kann man auch die Varianzen betrachten,

$$\Delta_a f = \int (x-a)^2 |f(x)|^2 \, \mathrm{d}x$$
$$\Delta_b f = \int (k-b)^2 |\widehat{f}(k)|^2 \, \mathrm{d}k \,,$$

welche jeweils ein Maß für die Breite der Verteilung liefern.

5.10 Satz:
Für jedes $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ *mit* $\|f\|_{L^2} = 1$ *und beliebige* $a, b \in \mathbb{R}$ *gilt*

$$(\Delta_a f)(\Delta_b \widehat{f}) \geq \frac{1}{4} \,.$$

Beweis: Mit partieller Integration gilt für $f \in \mathcal{S}$

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}x |f(x)|^2 &= \int \mathrm{d}x \bar{f}(x) f(x) = \int \mathrm{d}x \bar{f}(x) f(x) (\frac{d}{dx} x) \\ &= -\int \mathrm{d}x \bar{f}'(x) x f(x) - \int \mathrm{d}x \bar{f}(x) x f'(x) \\ &= -2\mathrm{Re} \int \mathrm{d}x \overline{f(x) x} f'(x) \leq 2 \int \mathrm{d}x |x f(x)| |f'(x)| \end{aligned}$$

Also gilt mit Cauchy-Schwarz

$$\|f\|_{L^2}^2 \leq 2 \, \|xf\|_{L^2} \, \|f'\|_{L^2}$$

Nun ist aber $\|f\|^2 = \|\widehat{f}\|^2 = 1$ und $\|f'\| = \|\widehat{f'}\| = \|k\widehat{f}\|$ und somit

$$1 = \|f\|^2 \, \|\widehat{f}\|^2 \leq 4 \, \|xf\|^2 \, \|k\widehat{f}\|^2 = 4 \Delta_0 f \Delta_0 \widehat{f} \,.$$

Für $a, b \neq 0$ wende man das Argument auf die Funktion

$$F(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}bx} f(x-a) \in \mathcal{S}$$

an, da $\Delta_a f = \Delta_0 F$ und $\Delta_b \widehat{f} = \Delta_0 \widehat{F}$. □

Man kann den Zusammenhang zwischen der Breite einer Funktion und ihrer Fouriertransformierten noch direkter sehen:

Für $\sigma > 0$ ist die Skalentransformation $s_\sigma : L^2(\mathbb{R}^d) \to L^2(\mathbb{R}^d)$ durch

$$(s_\sigma f)(x) := \sigma^{-d/2} f(\tfrac{x}{\sigma})$$

definiert. Die Abbildung s_σ verbreitert ($\sigma > 1$) bzw. staucht ($\sigma < 1$) Funktionen um den Faktor σ.

Es gilt

$$\|s_\sigma\|^2 = \int \mathrm{d}x \sigma^{-d} |f(\tfrac{x}{\sigma})|^2 = \int \mathrm{d}y |f(y)|^2 = \|f\|^2 \,,$$

also ist $s_\sigma : L^2 \to L^2$ eine Isometrie. Da offensichtlich $s_\sigma^{-1} = s_{1/\sigma}$ gilt, ist s_σ sogar unitär.

Für die Fouriertransformierte gilt

$$\begin{aligned} \widehat{s_\sigma f}(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x} \sigma^{-d/2} f(\tfrac{x}{\sigma}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int \mathrm{d}y \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma k\cdot y} \sigma^{d/2} f(y) = s_{1/\sigma} \widehat{f}(k). \end{aligned}$$

Also: Skaliert man f mit dem Faktor σ, so wird $\hat{f}$ um den Faktor $1/\sigma$ skaliert.

5.2 Unitäre Gruppen und ihre Erzeuger

Die Fouriertransformation ist also eine unitäre Operation auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^d)$. Da offensichtlich auch die Multiplikation mit der Funktion $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2 t/2}$ eine unitäre Operation auf $L^2(\mathbb{R}^d_k)$ ist, ist auch der freie Propagator, vgl. Beispiel Beispiel 3.17,

$$P_{\mathrm{f}}(t) : L^2(\mathbb{R}^d) \to L^2(\mathbb{R}^d) \,, \;\; \psi_0 \mapsto P_{\mathrm{f}}(t)\psi_0 = \mathcal{F}^{-1} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2 t/2} \, \mathcal{F} \, \psi_0$$

für jedes $t \in \mathbb{R}$ ein unitärer Operator. Weiterhin gilt

$$P_{\mathrm{f}}(t) \, P_{\mathrm{f}}(s) = \mathcal{F}^{-1} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2 t/2} \, \mathcal{F} \, \mathcal{F}^{-1} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2 s/2} \, \mathcal{F} = \mathcal{F}^{-1} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2 (t+s)/2} \, \mathcal{F} = P_{\mathrm{f}}(t+s)$$

für alle $t, s \in \mathbb{R}$. Deshalb nennt man $P_{\mathrm{f}}(\cdot) : \mathbb{R} \to \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ auch eine unitäre Gruppe.

Wir wissen bereits, dass $P_{\mathrm{f}}(t)\psi_0$ für $\psi_0 \in \mathcal{S}'$ und somit insbesondere auch für $\psi_0 \in L^2$ die freie Schrödingergleichung im Distributionssinne löst. Allerdings können und müssen wir einen stärkeren Lösungsbegriff in L^2 formulieren. Stärkerer Lösungsbegriff meint hier, dass die Lösungen als Funktion der Zeit

Regularität bezüglich einer stärkeren Topologie als der schwach* Topologie aufweisen.

Dazu überlegt man sich zunächst, dass für jedes $\psi_0 \in L^2$ die Abbildung

$$\mathbb{R} \to L^2 : \; t \mapsto P_{\mathrm{f}}(t)\psi_0$$

stetig ist. Man sagt auch, dass die Funktion $P_{\mathrm{f}} : \mathbb{R} \to \mathcal{L}(L^2)$ *stark stetig* ist. Man sieht das wie folgt. Sei $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$, dann ist

$$\begin{aligned} \|(P_{\mathrm{f}}(t) - P_{\mathrm{f}}(t_*))\,\psi_0\,\|_{L^2} &= \left\|\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2t/2} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2t_*/2}\right)\widehat{\psi}_0\,\right\|_{L^2} \\ &= \left\|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2t/2}\left(1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2(t_*-t)/2}\right)\widehat{\psi}_0\,\right\|_{L^2} \\ &= \left\|\left(1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2(t_*-t)/2}\right)\widehat{\psi}_0\,\right\|_{L^2} . \end{aligned}$$

Also gilt mit dominierter Konvergenz, dass

$$\lim_{t\to t_*} \|(P_{\mathrm{f}}(t) - P_{\mathrm{f}}(t_*))\,\psi_0\,\|_{L^2}^2 = \lim_{\tau\to 0} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\,|\widehat{\psi}_0(k)|^2\,\left(2 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k^2\tau/2} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}k^2\tau/2}\right) = 0\,,$$

da der Integrand punktweise gegen Null geht und durch $4|\widehat{\psi}_0(k)|^2 \in L^1(\mathbb{R}^d_k)$ beschränkt ist.

Wir nützen die Gelegenheit und führen die wichtigsten Konvergenzbegriffe (=Topologien) auf dem Raum der beschränkten Operatoren auf einem Hilbertraum ein.

5.11 Definition:
Sei $(T_n)_{n\in\mathbb{N}} \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$ eine Folge beschränkter Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ und $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

- T_n konvergiert *in der Norm* (oder *uniform*) gegen T, falls

  $$\lim_{n\to\infty} \|T_n - T\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} = 0\,.$$

  Man schreibt dann $\lim\limits_{n\to\infty} T_n = T$.

- T_n konvergiert *stark* gegen T, falls

  $$\lim_{n\to\infty} \|(T_n - T)\psi\|_{\mathcal{H}} = 0$$

  für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Man schreibt dann $\text{s-}\lim\limits_{n\to\infty} T_n = T$.

- T_n konvergiert *schwach* gegen T, falls

$$\lim_{n\to\infty} \langle \varphi, (T_n - T)\psi \rangle_{\mathcal{H}} = 0$$

für alle $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$. Man schreibt dann $\text{w-}\lim\limits_{n\to\infty} T_n = T$.

Bemerkung: Man vergewissere sich (Übungsaufgabe!), dass offensichtlich

$$\lim_{n\to\infty} T_n = T \quad \Rightarrow \quad \text{s-}\lim_{n\to\infty} T_n = T \quad \Rightarrow \quad \text{w-}\lim_{n\to\infty} T_n = T$$

gilt. Dass die Umkehrschlüsse falsch sind, sieht man am besten an geeigneten Gegenbeispielen. Man überlegt sich leicht (Übungsaufgabe: man schreibt das Skalarprodukt für die Fouriertransformierten hin und verwendet Riemann-Lebesgue), dass die Folge der Translationen $T(n)$, $n \in \mathbb{N}$ auf $L^2(\mathbb{R})$, also $(T(n)\psi)(x) = \psi(x - n)$, schwach gegen den Operator $T(\infty) = 0$ konvergiert. Andererseits ist

$$\lim_{n\to\infty} \|(T(n) - T(\infty))\psi\| = \lim_{n\to\infty} \|T(n)\psi\| = \|\psi\| \neq 0$$

und damit konvergiert $T(n)$ nicht stark gegen $T(\infty)$. Da aber die Grenzwerte von schwach, stark und uniform konvergenten Folgen eindeutig sind (warum?) kann $T(n)$ auch nicht gegen einen anderen Operator stark konvergieren, da ja sonst $T(n)$ auch schwach gegen diesen anderen Operator konvergieren müßte, im Widerspruch zur Eindeutigkeit des Limes. Also haben wir mit den Translationen ein Beispiel einer schwach aber nicht stark konvergenten Folge.

Ein Beispiel einer stark aber nicht uniform konvergenten Folge kennen wir bereits, nämlich den freien Propagator. Wir haben oben gezeigt, dass $P_{\mathrm{f}}(t)$ stark stetig ist, also beispielsweise $\text{s-}\lim_{n\to\infty} P_{\mathrm{f}}(1/n) = P_{\mathrm{f}}(0) = \mathbf{1}$. Nun überlegt man sich wieder als Übungsaufgabe (am besten in Fourierdarstellung), dass $P_{\mathrm{f}}(1/n)$ nicht uniform gegen die Identität konvergieren kann.

In dieser Terminologie ist der freie Propagator $P_{\mathrm{f}}(t)$ also eine stark stetige unitäre Gruppe.

5.12 Definition:
Eine Familie $U(t)$, $t \in \mathbb{R}$, von unitären Operatoren $U(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt stark stetige, unitäre einparametrige Gruppe, falls gilt:

1. $U(\cdot) : \mathbb{R} \to \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ist stark stetig.
2. $U(t + s) = U(t)U(s)$ für alle $t, s \in \mathbb{R}$ und $U(0) = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$.

Wir werden im folgenden oft einfach nur unitäre Gruppe sagen.

Bemerkung: Eine unitäre Gruppe ist genau dann stark stetig, wenn sie schwach stetig ist, denn

$$\lim_{t\to 0} \|(U(t) - \mathbf{1}_{\mathcal{H}})\psi\|^2 = 2\|\psi\|^2 - 2\lim_{t\to 0} \mathrm{Re}\langle \psi, U(t)\psi\rangle \,.$$

Das Konzept der unitären Gruppe als Lösungsoperator der freien Schrödingergleichung wollen wir im folgenden verallgemeinern, da die Unitarität ja genau die Konsistenz der physikalischen Interpretation von $|\psi(t,x)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte sicherstellt. Dazu müssen wir uns aber nochmal genau überlegen, in welchem Sinne $\psi(t) = P_{\mathrm{f}}(t)\psi_0$ die Schrödingergleichung löst. Die Frage ist, für welche $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$ kann man die Schrödingergleichung als Differenzialgleichung in dem vollständigen normierten Raum L^2 verstehen, genauer, für welche $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$ ist die Abbildung

$$\psi(\cdot) : \mathbb{R} \to L^2\,, \quad t \mapsto \psi(t) = P_{\mathrm{f}}(t)\psi_0$$

differenzierbar. Da $P_{\mathrm{f}}(t)$ nicht mal uniform stetig ist, macht es natürlich keinen Sinn, auf uniforme Differenzierbarkeit von $P_{\mathrm{f}} : \mathbb{R} \to \mathcal{L}(L^2)$ zu hoffen.

Nun, offensichtlich können wir die freie Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\psi(t) = -\frac{1}{2}\Delta_x\,\psi(t)$$

genau dann als Gleichung für Funktionen in $L^2(\mathbb{R}^d)$ verstehen, wenn $-\frac{1}{2}\Delta_x\,\psi(t) \in L^2(\mathbb{R}^d)$ gilt.

5.13 Definition:
Der $m$te Sobolevraum $H^m(\mathbb{R}^d) \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, $m \in \mathbb{Z}$, ist die Menge derjenigen $f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$, für die $\widehat{f}$ eine messbare Funktion ist und

$$(1 + k^2)^{m/2}\,\widehat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^d)\,.$$

Es ist klar, dass $H^m(\mathbb{R}^d) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ falls $m \geq 0$.

Für uns wird der zweite Sobolevraum H^2 von entscheidender Bedeutung sein, da er genau diejenigen Funktionen in L^2 enthält, deren schwache Ableitungen zweiter Ordnung wieder in L^2 liegen.

5.14 Definition:
Für $\psi \in H^2(\mathbb{R}^d)$ sei

$$H_0 \psi := -\frac{1}{2}\Delta_x \psi := \mathcal{F}^{-1} \frac{k^2}{2} \mathcal{F} \psi \,.$$

$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta_x$ heißt der freie Hamiltonoperator und $\mathcal{D}(H_0) := H^2(\mathbb{R}^d) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ heißt der *Definitionsbereich* (oder die *Domäne*) von H_0. Da $\mathcal{D}(H_0)$ dicht in $L^2(\mathbb{R}^d)$ liegt, aber H_0 nicht beschränkt ist (Übungsaufgabe!) und somit auch nicht zu einem beschränkten Operator auf ganz $L^2(\mathbb{R}^d)$ fortgesetzt werden kann, nennt man H_0 einen dicht definierten unbeschränkten linearen Operator.

Man beachte, dass $\mathcal{D}(H_0)$ tatsächlich der sogenannte maximale Definitionsbereich ist, also der größte Teilraum $\mathcal{D} \subset L^2$ für den gilt $H_0\mathcal{D} \subset L^2(\mathbb{R}^d)$.

Weiterhin sieht man leicht, dass $\mathcal{D}(H_0)$ unter der freien Zeitentwicklung invariant ist: Sei $\psi_0 \in \mathcal{D}(H_0)$, also $k^2\widehat{\psi}_0(k) \in L^2(\mathbb{R}^d_k)$, dann gilt

$$k^2\widehat{\psi}(t,k) = k^2 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{k^2}{2}t} \, \widehat{\psi}_0(k) \in L^2(\mathbb{R}^d_k) \quad \Rightarrow \quad \psi(t) \in \mathcal{D}(H_0) \,.$$

Fassen wir also zusammen: Für $\psi_0 \in L^2$ ist $\psi(t) = P_{\mathrm{f}}(t)\psi_0$ eine schwache Lösung der Schrödingergleichung und stetig als Funktion von t. Falls $\psi_0 \in \mathcal{D}(H_0)$, dann ist $\psi(\cdot) : \mathbb{R} \to L^2(\mathbb{R}^d)$ stetig differenzierbar (Übungsaufgabe!), d.h. für jedes $t \in \mathbb{R}$ gibt es ein Element $\psi'(t) \in L^2(\mathbb{R}^d)$ so, dass

$$\lim_{h\to 0} \left\| \frac{\psi(t+h) - \psi(t)}{h} - \psi'(t) \right\|_{L^2} = 0 \,.$$

Weiterhin erfüllt $\psi(t)$ die Schrödingergleichung im L^2-Sinne, also

$$(\mathrm{i}\psi'(t) =) \quad \mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\psi(t) = H_0\,\psi(t) \,. \tag{10}$$

Im folgenden schreiben wir deshalb $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t} := P_{\mathrm{f}}(t)$ für den freien Propagator und nennen H_0 den Erzeuger der unitären Gruppe $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t}$.

Das Beispiel H_0 veranlasst uns zu folgender Definition.

5.15 Definition:
Ein dicht definierter linearer Operator H mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(H) \subset \mathcal{H}$ heißt *Erzeuger* einer stark stetigen, unitären, einparametrigen Gruppe $U(t)$, falls

1. $\mathcal{D}(H) = \{\psi \in \mathcal{H} : \; t \mapsto U(t)\psi \; \text{ ist differenzierbar}\}$
2. $\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U(t)\,\psi = H\,U(t)\,\psi$, für alle $\psi \in \mathcal{D}(H)$.

Man schreibt dann auch $U(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$.

Es wird also im allgemeinen darum gehen, solche Operatoren zu identifizieren, die Erzeuger unitärer Gruppen sind. Im Falle der Schrödingergleichung mit Potential haben wir

$$H = H_0 + V\,,$$

wobei das Potential V ein Multiplikationsoperator

$$V : L^2(\mathbb{R}^d) \supset \mathcal{D}(V) \to L^2(\mathbb{R}^d)\,, \quad \psi(x) \mapsto V(x)\psi(x)$$

auf $\mathcal{D}(V) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ auffassen. Für die allgemeine Lösungstheorie der Schrödingergleichung wird also die Frage im Mittelpunkt stehen, H mit einem geeigneten Definitionsbereich $\mathcal{D}(H)$ auszustatten, so dass H auf $\mathcal{D}(H)$ definiert ein Erzeuger ist.

Bevor wir uns dieser Frage zumindest für ein paar sehr einfache Beispiele zuwenden, noch einige simple aber wichtige Schlußfolgerungen aus der Definition 5.15.

5.16 Proposition:
Sei H Erzeuger von $U(t)$, dann gelten

1. *$\mathcal{D}(H)$ ist invariant unter $U(t)$, d.h. $U(t)\,\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(H)$ für alle $t \in \mathbb{R}$.*
2. *H kommutiert (=vertauscht) mit $U(t)$: sei $\psi \in \mathcal{D}(H)$, dann gilt*

$$[\,U(t),\, H\,]\,\psi := U(t)\,H\,\psi - H\,U(t)\,\psi = 0\,.$$

3. *H ist* symmetrisch*, d.h. für alle $\psi, \varphi \in \mathcal{D}(H)$ gilt*

$$\langle \psi,\, H\,\varphi \rangle_{\mathcal{H}} = \langle H\,\psi,\, \varphi \rangle_{\mathcal{H}}\,.$$

4. *$U(t)$ ist eindeutig bestimmt.*
5. *H ist eindeutig bestimmt.*

Beweis: (i) folgt sofort ausDefinition 5.15 (i) und der Gruppeneigenschaft von $U(t)$. Zu (ii) findet man für $\psi \in \mathcal{D}(H)$

$$U(t)H\psi = U(t)\,\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\,U(s)\psi\big|_{s=0} = \mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\,U(s)\,U(t)\,\psi\big|_{s=0} = H\,U(t)\,\psi\,.$$

Die Symmetrie folgt aus der Unitarität von $U(t)$: für $\psi, \varphi \in \mathcal{D}(H)$ gilt

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\langle\psi,\,\varphi\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\langle U(t)\psi,\,U(t)\varphi\rangle \\
&= \langle -\mathrm{i}HU(t)\psi,\,U(t)\varphi\rangle + \langle U(t)\psi,\,-\mathrm{i}HU(t)\varphi\rangle \\
&= \mathrm{i}\langle U(t)H\psi,\,U(t)\varphi\rangle - \mathrm{i}\langle U(t)\psi,\,U(t)H\varphi\rangle \\
&= \mathrm{i}\big(\langle H\psi,\,\varphi\rangle - \langle\psi,\,H\varphi\rangle\big)\,.
\end{aligned}$$

Um die Eindeutigkeit von $U(t)$ zu zeigen, nehmen wir an, dass $\widetilde{U}(t)$ ebenfalls von H erzeugt wird. Für $\psi \in \mathcal{D}(H)$ gilt $\|\big(U(0) - \widetilde{U}(0)\big)\psi\| = 0$ und

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\big\|\big(U(t) - \widetilde{U}(t)\big)\psi\big\|^2 &= 2\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\big(\|\psi\|^2 - \mathrm{Re}\langle U(t)\psi,\,\widetilde{U}(t)\psi\rangle\big) \\
&= -2\mathrm{Re}\big(\langle -\mathrm{i}HU(t)\psi,\,\widetilde{U}(t)\psi\rangle + \langle U(t)\psi,\,-\mathrm{i}H\widetilde{U}(t)\psi\rangle\big) \\
&= -2\mathrm{Re}\big(\mathrm{i}\,\langle HU(t)\psi,\,\widetilde{U}(t)\psi\rangle - \mathrm{i}\langle U(t)\psi,\,H\widetilde{U}(t)\psi\rangle\big) \\
&= 0\,,
\end{aligned}$$

wobei wir für die letzte Gleichung die Symmetrie von H ausgenützt haben. Damit stimmen $U(t)$ und $\widetilde{U}(t)$ auf $\mathcal{D}(H)$ überein. Da $\mathcal{D}(H)$ nach Voraussetzung dicht in $\mathcal{H}$ liegt und da $U(t)$ und $\widetilde{U}(t)$ als unitäre Operatoren insbesondere beschränkt sind, gilt $U(t) = \widetilde{U}(t)$.

Die Eindeutigkeit von H ist wiederum offensichtlich: $\mathcal{D}(H)$ ist durch Definition 5.15 (i) eindeutig bestimmt und die Wirkung von H auf Vektoren in $\mathcal{D}(H)$ ist durch Definition 5.15 (ii) eindeutig bestimmt. □

Wir haben bereits gesehen, dass $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta_x$ mit $\mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d)$ Erzeuger einer unitären Gruppe ist, welche uns die Lösungen der freien Schrödingergleichung in $L^2(\mathbb{R}^d)$ mittels $\psi(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t}\psi(0)$ verschafft. Ein weiteres, sehr simples aber besonders instruktives Beispiel ist folgendes.

5.17 Beispiel:
Wir betrachten den Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$ und auf diesem die unitäre Gruppe der Translationen. Für $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ sei

$$\big(T(t)\psi\big)(x) = \psi(x-t)\,.$$

Es handelt sich bei $T(t)$ tatsächlich um eine unitäre (offensichtlich), einparametrige (auch offensichtlich), stark stetige (leicht zu sehen, Übungsaufgabe!) Gruppe (ebenfalls offensichtlich). Aus Beispiel 3.16 wissen wir bereits, dass für $f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$

$$T(t)f = \mathrm{e}^{-t\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} f = \mathcal{F}^{-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tk}\,\mathcal{F}\,f$$

gilt. Der Erzeuger der unitären Gruppe $T(t)$ auf L^2 muss also $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ sein, wobei wir allerdings noch den (eindeutigen!) Definitionsbereich bestimmen müssen. Zeigen Sie als Übungsaufgabe, dass $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ mit dem naheliegenden Definitionsbereich $\mathcal{D}(-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}) = H^1(\mathbb{R})$ tatsächlich Erzeuger von $T(t)$ ist.

Soweit ist alles ganz einfach. Die Festlegung des Definitionsbereichs scheint nicht mehr als eine mathematische Spitzfindigkeit zu sein. Dass dem nicht so ist, sehen wir, wenn wir die Translationen auf $L^2([0,1])$ betrachten. Wir können die Frage auf zweierlei Weise präzisieren. Wie kann man auf $L^2([0,1])$ Translationen als unitäre Gruppe definieren und wie sieht dann der Erzeuger aus ? Oder, was sind geeignete Definitionsbereiche auf welchen $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ ein Erzeuger ist und wie sehen die erzeugten Gruppen aus ?

Es ist einfacher zunächst mit den Gruppen zu beginnen. Es ist klar, dass Translationen auf $L^2([0,1])$ nur unitär sein können wenn die "Masse" die an einem der Ränder bei 0 oder 1 rausgeschoben wird, an anderer Stelle, nämlich am anderen Rand, wieder in das Intervall zurückläuft. Dabei muss die Amplitude des auslaufenden Teils der Wellenfunktion gleich der Amplitude des einlaufenden Teils sein, um die $L^2([0,1])$-Norm insgesamt zu erhalten. Die Phase beim Übergang von 0 zu 1 bzw. von 1 zu 0 kann sich aber ändern. Sagen wir z.B., dass alles was nach rechts bei der 1 rausläuft bei 0 wieder reinkommt, aber mit dem Phasenfaktor $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ multipliziert. Man erhält also eine einparametrige Familie von Translationsgruppen $T_\theta(t)$, $\theta \in [0, 2\pi)$, auf $L^2([0,1])$, welche für $0 \le t < 1$ durch

$$(T_\theta(t)\psi)(x) = \begin{cases} \psi(x-t) & \text{falls } x - t \in [0,1] \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\,\psi(x-t+1) & \text{falls } x - t < 0 \end{cases}$$

gegeben sind, und für alle anderen $t \in \mathbb{R}$ eindeutig durch die Gruppeneigenschaft festgelegt werden.

Für $\theta \neq \theta'$ gilt offenbar $T_\theta(t) \neq T_{\theta'}(t)$, trotzdem würde man erwarten, dass alle Gruppen $T_\theta(t)$, $\theta \in [0, 2\pi)$ wieder durch $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ erzeugt werden. Wie kann das sein, wenn doch der Erzeuger gemäß Proposition 5.16 die Gruppe eindeutig festlegt ? Ganz einfach, die Definitionsbereiche unterscheiden sich. Der Ableitungsoperator $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ mit Definitionsbereich

$$\mathcal{D}_\theta = \left\{\psi \in H^1([0,1]) : \ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\,\psi(0) = \psi(1)\right\}$$

erzeugt die Gruppe $T_\theta(t)$. Hierin ist $H^1([0,1])$ ein lokaler Sobolevraum, welcher durch

$$H^1([0,1]) = \left\{\psi \in L^2([0,1]) : \ \varphi\psi \in H^1(\mathbb{R}) \text{ für alle } \varphi \in C_0^\infty([0,1])\right\}$$

definiert ist. Die punktweise Randbedingung in der Definition von $\mathcal{D}_\theta$ macht Sinn, da die Funktionen in $H^1(\mathbb{R})$ stetig sind, siehe Satz 5.19 unten.

Wir sehen also, dass der Definitionsbereich des Operators die Eigenschaften der erzeugten Gruppe maßgeblich beeinflusst. Außerdem wird aus dem Beispiel klar, dass der Definitionsbereich weder zu groß noch zu klein gewählt werden darf. Der Operator $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ mit dem zu großen Definitionsbereich $H^1([0,1])$ erzeugt keine unitäre Gruppe, da keine der Gruppen $T_\theta(t)$ den Raum $H^1([0,1])$ invariant läßt. Denn Funktionen in $H^1([0,1])$, welche die zu θ passenden Randbedingungen nicht erfüllen, werden unter der "Translation" T_θ unstetig, können also nicht mehr in $H^1([0,1])$ liegen.

Wählt man hingegen den Definitionsbereich zu klein, beispielsweise

$$\mathcal{D}_0 = \left\{\psi \in H^1([0,1]) : \ \psi(0) = \psi(1) = 0\right\} ,$$

dann ist der zu kleine Definitionsbereich wieder unter keiner der Gruppen invariant. Insbesondere ist $\mathcal{D}_0 \subset \mathcal{D}_\theta$ für alle θ, und $\mathcal{D}_0$ legt auch nicht eindeutig eine Domäne fest, auf welcher $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ Erzeuger ist.

Abschließend untersuchen wir noch die Symmetrie von $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$. Man stellt fest, dass für alle $\psi, \varphi \in H^1([0,1])$ mit partieller Integration gilt:

$$\begin{aligned}
\left\langle\psi, \, -\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi\right\rangle_{L^2([0,1])} &= \int_0^1 \mathrm{d}x\, \psi(x)^* \Big(- \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\varphi(x)\Big) \\
&= \mathrm{i}\Big(\psi(0)^*\varphi(0) - \psi(1)^*\varphi(1)\Big) + \int_0^1 \mathrm{d}x\, \Big(- \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\psi(x)\Big)^* \varphi(x) \\
&= \mathrm{i}\Big(\psi(0)^*\varphi(0) - \psi(1)^*\varphi(1)\Big) + \Big\langle - \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi, \, \varphi\Big\rangle_{L^2([0,1])} .
\end{aligned} \tag{11}$$

Also ist $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ auf $H^1([0,1])$ nicht symmetrisch, was wiederum zeigt, dass $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ auf $H^1([0,1])$ kein Erzeuger sein kann. Andererseits sieht man sofort, dass $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ auf $\mathcal{D}_\theta$ symmetrisch ist, da für $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_\theta$ die Randterme von der partiellen Integration wegfallen. Allerdings ist $-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ auch auf $\mathcal{D}_0$ symmetrisch, aber trotzdem kein Erzeuger. Insbesondere ist also Symmetrie eines Operators zwar nach Proposition 5.16 eine notwendige, aber eben keine hinreichende Bedingung dafür, dass er Erzeuger einer unitären Gruppe ist.

5.18 Beispiel:
ir haben ja bereits gezeigt, dass $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta_x$ auf $L^2(\mathbb{R})$ mit $\mathcal{D}(H_0) = H^2(\mathbb{R})$ Erzeuger ist und die freie Schrödingerdynamik erzeugt. Man kann sich nun fragen, ob und welche unitären Gruppen H_0 auf $L^2([0,\infty))$ erzeugt. Es ist klar, dass Unitarität also Erhaltung der L^2-Norm es notwendig macht, dass die Wellenfunktion bei Null reflektiert wird, dass also bei Null keine Masse verloren geht. Dabei gibt es allerdings verschiedene Möglichkeiten: geht man zur bekannten Situation $L^2(\mathbb{R})$ zurück, stellt man fest, dass Anfangswellenfunktionen $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ welche symmetrisch zur Null sind, also entweder $\psi(x) = \psi(-x)$ oder $\psi(x) = -\psi(-x)$ erfüllen, diese Symmetrie unter der Zeitentwicklung beibehalten Das überlegt man sich wie folgt als Übungsaufgabe: Es gilt $\psi(x) = \psi(-x)$ (bzw. $\psi(x) = -\psi(-x)$), genau dann wenn die Fouriertransformierte $\widehat{\psi}$ die gleiche Symmetrie hat, also $\widehat{\psi}(k) = \widehat{\psi}(-k)$ (bzw. $\widehat{\psi}(k) = -\widehat{\psi}(-k)$) gilt. Multiplikation mit der spiegelsymmetrischen Funktion $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tk^2/2}$ erhält die Symmetrie. Damit bleibt aber auch die $L^2([0,\infty))$-Norm solcher symmetrischen Wellenfunktionen unter der Zeitentwicklung erhalten und wir haben Kandidaten für Definitionsbereiche gefunden, welche H_0 auf $L^2([0,\infty))$ zum Erzeuger machen. Punktsymmetrie in $L^2(\mathbb{R})$ liefert

$$\mathcal{D}_{\mathrm{D}}(H_0) = \left\{\psi \in H^2([0,\infty)) : \psi(0) = 0\right\}, \tag{12}$$

sogenannte Dirichlet-Randbedingungen. Die zugehörige Gruppe $U_{\mathrm{D}}(t)$ bekommt man durch Anwendung des freien Propagators $P_{\mathrm{f}}(t)$ auf die punktsymmetrische Fortsetzung einer Funktion in $L^2([0,\infty))$ und anschließendes Abschneiden. Dabei ist $\mathcal{D}_{\mathrm{D}}$ wegen der Erhaltung der Punktsymmetrie ebenfalls unter $U_{\mathrm{D}}(t)$ erhalten und tatsächlich der grösste Teilraum von $H^2([0,\infty))$ welcher diese Eigenschaft hat.

Analog liefert Spiegelsymmetrie in $L^2(\mathbb{R})$

$$\mathcal{D}_{\mathrm{N}}(H_0) = \left\{\psi \in H^2([0,\infty)) : \psi'(0) = 0\right\}, \tag{13}$$

sogenannte Neumann-Randbedingungen. (Beachte, dass $\psi \in H^2(\mathbb{R})$ gemäß Satz **??** differenzierbar ist, genauer einen differenzierbaren Vertreter besitzt, und somit die Randbedingung $\psi'(0) = 0$ Sinn macht.) Die zugehörige Gruppe $U_{\mathrm{N}}(t)$ bekommt man durch Anwendung des freien Propagators $P_{\mathrm{f}}(t)$ auf die spiegelsymmetrische Fortsetzung einer Funktion in $L^2([0,\infty))$ und anschließendes Abschneiden. Dabei ist $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ wegen der Erhaltung der Spiegelsymmetrie ebenfalls unter $U_{\mathrm{N}}(t)$ erhalten und tatsächlich der grösste Teilraum von $H^2([0,\infty))$ welcher diese Eigenschaft hat.

$\mathcal{D}_{\mathrm{D}}(H_0)$ bzw. $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}(H_0)$ sind also unter $U_{\mathrm{D}}(t)$ bzw. $U_{\mathrm{N}}(t)$ invariant und es folgt aus der Konstruktion, dass die Bedingung (ii) aus Definition 5.15 erfüllt ist. Man überlegt sich auch leicht, dass $U_{\mathrm{D}}(t)\psi$ bzw. $U_{\mathrm{N}}(t)\psi$ genau dann differenzierbar sind, wenn $\psi \in \mathcal{D}_{\mathrm{D}}(H_0)$ bzw. $\psi \in \mathcal{D}_{\mathrm{N}}(H_0)$ gilt, also auch Bedingung (i) aus Definition 5.15 erfüllt ist. Damit haben wir zwei Definitionsbereiche gefunden, nämlich $\mathcal{D}_{\mathrm{D}}(H_0)$ und $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}(H_0)$, auf welchen H_0 jeweils Erzeuger ist und zwei verschiedene unitäre Gruppen erzeugt.

Man kann zwischen den beiden Grenzfällen interpolieren: Überlegen Sie sich als Übungsaufgabe, dass H_0 auf $L^2([0,\infty))$ für $a \in \mathbb{R}$ mit

$$\mathcal{D}_a := \Big\{\psi \in H^2([0,\infty)) : \psi'(0) + a\psi(0) = 0\Big\},$$

Erzeuger ist und geben Sie die erzeugten Gruppen an.

An dieser Stelle wollen wir noch das Lemma von Sobolev vorstellen, welches Aussagen über die Glattheit von Funktionen in Sobolevräumen erlaubt.

5.19 Satz:
Sei $f \in H^m(\mathbb{R}^d)$ und $\ell < m - \frac{d}{2}$, dann gilt $f \in C^\ell(\mathbb{R}^d)$.

Beweis: Nach Voraussetzung ist $(1+k^2)^{m/2}\widehat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^d_k)$ und somit für $\alpha \in \mathbb{N}^d$ mit $|\alpha| \le \ell$

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, |k^\alpha \widehat{f}(k)| \quad &\le \quad \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, (1+k^2)^{\ell/2}\, |\widehat{f}(k)| \\
&= \quad \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}k\, \underbrace{|\widehat{f}(k)|\,(1+k^2)^{m/2}}_{\in L^2}\, \underbrace{(1+k^2)^{(\ell-m)/2}}_{\in L^2} \\
&\overset{\text{Schwarz Ungl.}}{\le} \quad \||\widehat{f}(k)|\,(1+k^2)^{m/2}\|_{L^2}\, \|(1+k^2)^{(\ell-m)/2}\|_{L^2} < \infty\,.
\end{aligned}$$

Man beachte, dass $(1+k^2)^{(\ell-m)/2} \in L^2(\mathbb{R}^d_k)$ genau dann wenn $(1+k^2)^{(\ell-m)} \in L^1(\mathbb{R}^d_k)$ was wiederum der Fall ist, wenn $2(\ell-m) < -d$ also $\ell < m - \frac{d}{2}$. Damit ist $k^\alpha \widehat{f}(k) \in L^1(\mathbb{R}^d)$ und somit nach dem Lemma von Riemann-Lebesgue $(\mathcal{F}^{-1}\, k^\alpha \widehat{f})(x) = (-\mathrm{i})^{|\alpha|}\partial_x^\alpha f(x)$ stetig.

Wir haben also, dass schwache Ableitungen von f bis zur Ordnung ℓ stetige Funktionen sind. Daraus folgt aber durch Integration, dass f fast überall gleich einer Funktion in $C^\ell(\mathbb{R}^d)$ sein muss. □