

Existenz des Grundzustands in der nicht-relativistischen QED

Seminar: Mathematische Grundlagen der QED

Jakob Wachsmuth

04.12.2008

Ziele

Ziele des heutigen Vortrags:

- ▶ Einführung des Pauli-Fierz-Modells der nicht-relativistischen QED
- ▶ Erläuterung der mathematischen und physikalischen Voraussetzungen für die Existenz eines Grundzustands
- ▶ Verständnis der auftretenden mathematischen Schwierigkeiten und der Strategie, um diese zu überwinden
- ▶ Kurzer Einblick in die benötigten Abschätzungen und der physikalischen Intuition dahinter

Gliederung

Einleitung

- Ziele und Gliederung des Vortrags
- Das Pauli-Fierz-Modell
- Untere Schranke an die Energie

Die Existenz eines Grundzustands

- Die Bindungsbedingung
- Die direkte Methode der Variationsrechnung
- Konstruktion einer speziellen Minimalfolge
- A-priori-Abschätzungen

Das Pauli-Fierz-Modell

Wir betrachten die Kopplung von N nicht-relativistischen Elektronen an das quantisierte Maxwellfeld einer variablen Anzahl von Photonen. Der zugrunde liegende Hilbertraum ist dann

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{\text{as}}^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2) \otimes \mathcal{F},$$

wobei $\bigotimes_{\text{as}}^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$ der total antisymmetrische Unterraum des N -Teilchen-Hilbertraums und \mathcal{F} der bosonische Fockraum ist.

Der Hamilton-Operator des Pauli-Fierz-Modells ist gegeben durch:

$$H_N := H_f + \sum_{j=1}^N \left((-i\nabla_{x_j} + \sqrt{\alpha}A(x_j))^2 + \sqrt{\alpha}B(x_j) \cdot \sigma_j \right) + \alpha(I + V).$$

Hierbei ist die Kopplung durch die dimensionslose Feinstrukturkonstante α parametrisiert.

Der Feldoperator ist (für Photonen Dispersionsrelation $\omega(k) = |k|$)

$$H_f := \sum_{\lambda=1}^2 \int_{\mathbb{R}^3} \omega(k) a_{\lambda}^*(k) a_{\lambda}(k) d^3k$$

Die Kopplung innerhalb des Paulioperators wird realisiert durch

$$A(x) := \sum_{\lambda=1}^2 \int_{|k| \leq \Lambda} \frac{1}{\sqrt{|k|}} \left(e^{-ik \cdot x} \varepsilon_{\lambda}(k) a_{\lambda}(k) + e^{ik \cdot x} \varepsilon_{\lambda}(k) a_{\lambda}^*(k) \right) d^3k,$$

$$B(x) := (\nabla \times A)(x).$$

Die potentielle Energie der Elektronen enthält ihre Wechselwirkung I und ein von K Kernen verursachtes äußeres Potential V ,

$$I(X) := \sum_{i \neq j=1}^N |x_i - x_j|^{-1}, \quad V(X) := - \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^K Z_i |x_j - y_i|^{-1}.$$

Dabei ist Z_i die Kernladungszahl des i -ten Nucleons.

Untere Schranke an die Energie

Die Energie

$$H_N := H_f + \sum_{j=1}^N \left((-i\nabla_{x_j} + \sqrt{\alpha}A(x_j))^2 + \sqrt{\alpha}B(x_j) \cdot \sigma_j \right) + I + V$$

ist als Form für alle Werte von α und Λ nach unten beschränkt,

$$\langle \psi | H \psi \rangle \geq \varepsilon(\alpha, \Lambda) \langle \psi | -\Delta_X \psi \rangle - C(\alpha, \Lambda) \langle \psi | \psi \rangle.$$

Denn

- ▶ H_f ist ein nicht-negativer Operator.
- ▶ $(p - A)^2 \geq \varepsilon(\delta)p^2 - \delta A^2$.
- ▶ $I + V$ ist infinitesimal beschränkt durch $-\Delta_X$.
- ▶ A^2 und B^2 sind beschränkt durch H_f .

Insbesondere existiert also $E_N^V := \inf_{\|\psi\|=1} \langle \psi | H_N \psi \rangle$ und bei beschränkter Energie gilt $\langle \psi | -\Delta_X \psi \rangle < \infty!$

Die Bindungsbedingung

Unter welchen Voraussetzungen gibt es ein $\psi_0 \neq 0$ mit $H_N \psi_0 = E_N^V \psi_0$?

Sei $E_N^0 = \inf_{\|\psi\|=1} \langle \psi | (H_N - V) \psi \rangle$ & $\Sigma_N^V = \inf_{0 \leq M < N} (E_M^V + E_{N-M}^0)$.

Die sogenannte Bindungsbedingung,

$$E_N^V < \Sigma_N^V,$$

stellt sicher, dass es am günstigsten ist, wenn alle Elektronen lokalisieren.

Theorem (Griesemer, Lieb, Loss [1])

Falls die Bindungsbedingung erfüllt ist, so existiert für alle Werte von α und Λ ein Grundzustand $\psi_0 \in \mathcal{H}$, d.h. $\|\psi_0\| = 1$ und

$$H_N \psi_0 = E_N^V \psi_0.$$

Es sei $Z := \sum_{i=1}^K Z_i$ die Summe der Kernladungszahlen. In [3] zeigen Lieb & Loss (mit viel Aufwand), dass für $N \leq \sum_{i=1}^K Z_i$ die Bindungsbedingung erfüllt ist!

Die direkte Methode der Variationsrechnung

Um das Theorem zu beweisen, müssen wir einen nicht-trivialen Minimierer des Energiefunktionals $E(\psi) = \langle \psi | H_N \psi \rangle$ finden. Übliches Vorgehen (direkte Methode der Variationsrechnung):

- ▶ Wähle normalisierte Minimalfolge $(\psi_m) \Rightarrow \exists \psi_0 : \psi_m \rightharpoonup \psi_0$.
- ▶ Zeige Konvergenz von (ψ_m) gegen ψ_0 in \mathcal{H} (starke Konvergenz).
- ▶ Zeige Unterhalbstetigkeit von $E \Rightarrow E(\psi_0) = E_N^V$.

Das Problem hier ist, dass die "meisten" Minimalfolgen (ψ_m) nicht stark konvergieren, da das kontinuierliche Spektrum bis an E_N^V heranreicht:

Lemma

Es gilt $\sigma(H_N) = [E_N^V, \infty)$.

BEWEISIDEE: Zu gegebenem $\lambda > E_N^V$ wähle k_0 mit $|k_0| = \lambda - E_N^V$. Zu nicht-negativem $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ definiere man

$$f_m(k) := e^{ik \cdot R_m} m^{3/2} f(m(k - k_0)), \quad |R_m| \rightarrow \infty.$$

Dann betrachte man $a^*(f_m)\psi_m$ mit einer Minimalfolge (ψ_m) . □

Die direkte Methode der Variationsrechnung

Wo liegt nun die Schwierigkeit genau dabei? Um aus schwacher starke Konvergenz zu folgern, muss man Folgendes uniform in m zeigen:

- ▶ Lokalisierung der Elektronen im Impuls – folgt aus Abschätzung von $-\Delta_X$ gegen die Energie
- ▶ Lokalisierung der Elektronen im Ort – wird aus Bindungsbedingung abgeleitet werden
- ▶ Lokalisierung der Photonen im Impuls – Klar wegen UV-Cutoff
- ▶ Lokalisierung in der Photonenanzahl, d.h. Schranke an den Anzahloperator $\int_{\mathbb{R}^3} a^*(k)a(k)d^3k$
- ▶ Lokalisierung der Photonen im Ort, d.h. Schranke an $-\Delta_k$

Die letzten beiden Abschätzungen sind im Allgemeinen nicht richtig, weil man durch das Hinzufügen von immer mehr, immer weicheren Photonen die Energie verringert.

Konstruktion einer speziellen Minimalfolge

Ausweg: Man gibt den Photonen zunächst eine Masse $\mu > 0$.

$$\omega(k) \rightarrow \omega_\mu(k) := \sqrt{|k|^2 + \mu^2}.$$

In diesem Fall erhöht das Hinzufügen von Photonen die Energie und es lässt sich einfacher zeigen, dass es einen Grundzustand gibt.

Theorem (Derezinski, Gerard (1999))

Sei $E_N^V(\mu)\psi_\mu = \inf_{\|\psi\|=1} \langle \psi | H_N^\mu \psi \rangle$. Gilt die Bindungsbedingung für H_N , so existiert für μ klein genug ein ψ_μ mit

$$H_N^\mu \psi_\mu = E_N^V(\mu) \psi_\mu.$$

Um dies zu beweisen, splittet man H_N^μ sowohl im Ortsraum der Elektronen als auch in dem der Photonen auf und zeigt dann, dass für eine normalisierte Folge (ϕ_m) , die schwach gegen 0 konvergiert, gilt

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \langle \phi_m | H_N^\mu \phi_m \rangle \geq E_N^V(\mu) + \min\{\Sigma_N^V(\mu) - E_N^V(\mu), \mu\}.$$

Da gilt, dass $E_N^V(\mu) \rightarrow E_N^V$, ist (ψ_μ) eine spezielle Minimalfolge für E .

A-priori-Abschätzungen

Entscheidend ist nun in μ uniforme A-priori-Abschätzungen herzuleiten:

Lemma

Sei $\beta > 0$ mit $\beta^2 < \Sigma_N^V - E_N^V$. Dann gibt es ein $C < \infty$, so dass für alle μ klein genug

$$\|\exp(\beta\langle X \rangle)\psi_\mu\|^2 \leq C\left(1 + \frac{1}{\Sigma_N^V - E_N^V - \beta^2}\right)\|\psi_\mu\|^2.$$

Lemma (Bach, Fröhlich, Sigal (1999))

Es existiert ein $C < \infty$, so dass für fast alle k

$$\|a_\lambda(k)\psi_\mu\| \leq C\sqrt{\alpha}\frac{\chi_\Lambda(k)}{\sqrt{|k|}}\| |X| \psi_\mu \|.$$

Lemma (G.,L.,L. [1])

Es existiert ein $C < \infty$, so dass für fast alle k

$$\|\nabla_k a_\lambda(k)\psi_\mu\| \leq C\sqrt{\alpha}\frac{\chi_\Lambda(k)}{|k|^{3/2}}\|(1 + |X|)\psi_\mu\|.$$

Lokalisierung der Elektronen im Ort

$$\|\exp(\beta\langle X \rangle)\psi_\mu\|^2 \leq C\left(1 + \frac{1}{\Sigma_N^V - E_N^V - \beta^2}\right)\|\psi_\mu\|^2$$

BEWEISSKIZZE: Definiere $\Sigma(R) := \inf_{\|\psi\|=1, \text{supp}_X \psi \subset \mathbb{R}^N \setminus B_R} \langle \psi | H_N \psi \rangle$ und $\Sigma := \lim_{R \rightarrow \infty} \Sigma(R)$. In [2] zeigt Griesemer (mit etwas Aufwand), dass

$$\Sigma_N^V = \Sigma.$$

Sei χ glatt mit $\text{supp } \chi \subset \mathbb{R}^N \setminus B_1$ und $\chi \equiv 1$ außerhalb von B_2 .
Definiere $f = \chi(X/R) \exp(\beta\langle X \rangle)$. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle f\psi_\mu | (H_N^\mu - E_N^V(\mu))f\psi_\mu \rangle &= -\langle \psi_\mu | [[H_N^\mu - E_N^V(\mu), f], f] \psi_\mu \rangle / 2 \\ &= \langle \psi_\mu | |\nabla_X f|^2 \psi_\mu \rangle. \end{aligned}$$

Da $\nabla_X \chi$ kompakten Träger hat, erhält man

$$\begin{aligned} C\langle \psi_\mu | \psi_\mu \rangle &\geq \langle f\psi_\mu | (H_N^\mu - E_N^V(\mu) - \beta^2)f\psi_\mu \rangle \\ &\geq \langle f\psi_\mu | (\Sigma - E_N^V - \beta^2)f\psi_\mu \rangle / 2 \end{aligned}$$

für μ klein genug und R groß genug. □

Lokalisierung der Photonenzahl

$$\|a_\lambda(k)\psi_\mu\| \leq C\sqrt{\alpha}\frac{\chi_\Lambda(k)}{\sqrt{|k|}}\| |X|\psi_\mu\|$$

BEWEISIDEE: $\tilde{A}(x) = A(x) - A(0)$ enthält Faktor $e^{ik \cdot x} - 1$, der sich für kleine k gut (wie $|k|$) verhält.

Durch die Boguljubov-Transformation $U := \exp\left(i\sum_{j=1}^N \sqrt{\alpha}x_j \cdot A(0)\right)$ wird A durch \tilde{A} ersetzt. Außerdem ergibt sich

$$Ua_\lambda(k)U^* = a_\lambda(k) - ib_\lambda(k, X)$$

mit $b_\lambda(k, X) = \chi_\Lambda(k)\frac{1}{\sqrt{|k|}}\varepsilon_\lambda(k) \cdot \sum_{j=1}^N \sqrt{\alpha}x_j$.

Der Zusatzterm erfüllt offensichtlich die Abschätzung. Beim Rest hilft das gewonnene $|k|$. □

Für die Abschätzung an $\nabla_k a_\lambda(k)$ geht man ebenso vor. Zusätzliches Problem ist, dass die $\varepsilon_\lambda(k)$ nicht global glatt gewählt werden können. Dennoch kostet Ableiten nur den zu erwartenden Faktor $|k|$.

Literatur I

-  M. Griesemer, E. Lieb, M. Loss :
Ground States in Non-Relativistic Quantum Electrodynamics.
Invent. math., 145 (2001).
-  M. Griesemer:
Exponential Decay and Ionization Thresholds in Non-Relativistic Quantum Electrodynamics.
J. Func. Anal., 210 (2004).
-  E. Lieb, M. Loss:
Existence of Atoms and Molecules in Non-Relativistic Quantum Electrodynamics.
Adv. Theor. Math. Phys., 7 (2003).