

Mathematische Physik II

Quantenmechanik*

Wintersemester 2013/14

Stefan Teufel
Mathematisches Institut
Uni Tübingen

28. Januar 2014

* Das Skriptum ist nur zum Gebrauch parallel zum Besuch der Vorlesung gedacht. Das Studium des Skripts kann den Besuch der Vorlesung **nicht** ersetzen! Falls Sie Fehler finden, teilen Sie mir diese (auch die offensichtlichen) bitte mit! Weiterhin sind auch die Übungsaufgaben auf den separaten Übungsblättern wesentlicher Bestandteil des Kurses.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die freie Schrödingergleichung	5
2.1	Die Fouriertransformation auf \mathcal{S}	5
2.2	Temperierte Distributionen	14
2.3	Asymptotik für große Zeiten und der Impulsoperator	17
3	Die Schrödingergleichung mit Potential	19
3.1	Vorbemerkungen zu Hilbert- und Banachräumen	19
3.2	Unitäre Gruppen und ihre Erzeuger	25
3.3	Selbstadjungierte Operatoren	29
4	Der Spektralsatz	51
4.1	Der Funktionalkalkül und die Helffer-Sjöstrand-Formel	51
4.2	Spektralsatz: Multiplikationsoperatorversion	59
4.3	Ergänzungen: Stone, Ergodensatz, Trotter und Pfadintegrale	64
5	Spektralmaße und selbstadjungierte Operatoren in der Quantentheorie	69
5.1	Tensorprodukt und Spin	69
5.2	Projektorwertige Maße und positive-Operatorenwertige Maße	71
5.3	Spektralmaße und das Langzeitverhalten unitärer Gruppen	78
6	Streutheorie	87
6.1	Wellenoperatoren und Streumatrix	87
6.2	Asymptotische Vollständigkeit für kurzreichweitige Potentiale	92
7	Kompakte Operatoren	95
7.1	Hilbert-Schmidt- und Spurklasse-Operatoren	98
8	Stabilität der Materie	111

1 Einleitung

Physikalische Fragestellung:

Wir betrachten zunächst die Dynamik eines einzelnen quantenmechanischen Teilchens im Ortsraum \mathbb{R}^d (für $d = 1, 2, 3$ ist dies physikalisch relevant) unter dem Einfluss eines Potentials $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Beispielsweise wäre für ein Elektron im Feld eines Kerns am Ort $x = 0$ die Raumdimension $d = 3$ und das sog. Coulombpotential $V(x) = -\frac{Z}{|x|}$, wobei Z die Ladungszahl des Kerns ist.

1.1 Definition. Quantenmechanische Beschreibung: ein einzelnes Teilchen

- (1) Der *Zustand* des Systems wird durch die Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^d \rightarrow \mathbb{C}$ beschrieben, wobei

$$\|\psi(t, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 := \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(t, x)|^2 dx = 1$$

angenommen wird. Physikalisch interpretieren wir $\rho(t, x) := |\psi(t, x)|^2$ als die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort $X(t)$ des Teilchens zum Zeitpunkt t .

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem Gebiet $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ befindet, ist also

$$P(X(t) \in \Lambda) = \mathbb{P}^{\psi_t}(\Lambda) = \int_{\Lambda} |\psi(t, x)|^2 dx.$$

Die Wellenfunktion $\psi_t(\cdot) := \psi(t, \cdot)$ definiert somit ein Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P}^{ψ_t} auf dem Konfigurationsraum für den Aufenthaltsort eines Punktteilchens. Also ist ρ keine Massen- oder Ladungsdichte.

- (2) Die *Dynamik* des Zustands, d.h. dessen zeitliche Veränderung, wird durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x) =: H \psi(t, x)$$

beschrieben, wobei die Naturkonstante \hbar das Planck'sche Wirkungsquantum heißt, m die Masse des Teilchens und V das Potential ist. Der Laplaceoperator ist

$$\Delta_x := \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}.$$

Der Differentialoperator H , der sog. Hamiltonoperator, ist damit gegeben durch

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(x).$$

Die Schrödingergleichung ist eine lineare partielle Differentialgleichung (der Hamiltonoperator selbst ist für typische Potentiale elliptisch), deren Lösungstheorie ein zentrales Thema dieser Vorlesung sein wird.

1.2 Kommentar. Vergleich zur klassischen Mechanik

Die Newtonschen Bewegungsgleichungen für ein Teilchen im Potential V sind

$$m \ddot{q}(t) = F(q(t)) = -\nabla V(q(t))$$

1 Einleitung

wobei q der Ort des Teilchens ist. Wir können dies in ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung umwandeln, indem wir $p(t) := m \dot{q}(t)$ einführen und

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m} p(t) \\ -\nabla V(q(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla_p H(q, p) \\ -\nabla_q H(q, p) \end{pmatrix}$$

schreiben, wobei $H(q, p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(q)$ die klassische Hamiltonfunktion ist. Vergleichen wir dies mit dem Hamiltonoperator der Quantenmechanik, so sehen wir, dass dieser aus der klassischen Hamiltonfunktion durch sog. „kanonische Quantisierung“ entsteht: man fasst H als Operator auf, der auf Funktionen von x operiert, indem man q durch x und p durch $-i\hbar \nabla_x$ ersetzt.

1.3 Bemerkung. Da die Quantenmechanik die fundamentalere Theorie ist, ist physikalisch natürlich die umgekehrte Frage relevant: Wie läßt sich aus der Quantenmechanik die klassische Beschreibung in geeigneten Grenzfällen herleiten?

1.4 Definition. Quantenmechanische Beschreibung: $n > 1$ Teilchen

Für n Teilchen lebt die Wellenfunktion auf dem Konfigurationsraum $(\mathbb{R}^d)^n = \mathbb{R}^{dn}$, d.h. die Konfiguration $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^{dn}$ ist durch die Orte $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ aller Teilchen gegeben. Die Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^{dn} \rightarrow \mathbb{C}$ ist wieder eine komplexwertige Funktion auf dem Konfigurationsraum, deren physikalische Interpretation unverändert bleibt: $|\psi(t, x)|^2 = |\psi(t, x_1, \dots, x_n)|^2$ ist die Dichte der gemeinsamen Verteilung der Orte aller n Teilchen zum Zeitpunkt t . Die Schrödingergleichung ist jetzt

$$i\hbar \partial_t \psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \Delta_{x_j} + V(x) \right) \psi(t, x).$$

1.5 Bemerkung. Versucht man die Schrödingergleichung numerisch zu lösen, so stößt man wegen der hohen Dimension des Konfigurationsraums schon bei relativ kleinen Teilchenzahlen n an Grenzen. Selbst für „kleinere“ Systeme wie Atome und Moleküle ist eine direkte numerische Lösung fast unmöglich und es sind ausgeklügelte Näherungsverfahren notwendig, um überhaupt approximative Aussagen zu bekommen.

1.6 Beispiel. Das Coulomb-Potential

Das in der Quantenmechanik wohl wichtigste Potential ist das Coulomb-Wechselwirkungspotential von n Punktteilchen mit den Ladungen e_j gegeben durch

$$V_{\text{Coul}}(x) = \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=j+1}^n \frac{e_j e_i}{|x_i - x_j|}.$$

1.7 Definition. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Wir nennen $i\partial_t \psi = H\psi$ die zeitabhängige Schrödingergleichung und das Eigenwertproblem

$$H\phi = E\phi$$

des zugehörigen Hamiltonoperators die zeitunabhängige Schrödingergleichung.

Ein Eigenvektor ϕ von H zum Eigenwert E , also eine Lösung der stationären Schrödingergleichung, liefert natürlich auch sofort eine Lösung $\psi(t) = e^{-iEt} \phi$ der zeitabhängigen Gleichung.

Wir werden uns in dieser Vorlesung von der Frage leiten lassen, für welche Anfangsdaten $\psi(0, x) = \psi_0(x)$ und für welche Potentiale V die Schrödingergleichung in welchem genauen Sinne eindeutige globale Lösungen hat. Dabei werden wir zunächst die freie Schrödingergleichung, d.h. den Fall $V \equiv 0$ betrachten. Dann kann man die Gleichung durch Fouriertransformation lösen. Um die

Lösungstheorie im allgemeinen Fall zu entwickeln, faßt man die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H \psi(t)$$

als “gewöhnliche” Differentialgleichung für die Vektorwertige Funktion $\psi : \mathbb{R}_t \rightarrow \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^{nd})$ auf. Da allerdings H auf dem Hilbertraum \mathcal{H} kein beschränkter Operator ist, wird die Theorie deutlich komplexer als im beschränkten Fall. Diese Betrachtungen werden uns auf den Spektralsatz für selbst-adjungierte Operatoren auf Hilberträumen führen, welcher ein zentrales Resultat dieser Vorlesung sein wird.

2 Die freie Schrödingergleichung

Die freie Schrödingergleichung ist die Schrödingergleichung ohne Potential. Wir suchen somit Lösungen $\psi : \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^d \rightarrow \mathbb{C}$ der Gleichung

$$i\partial_t \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t, x).$$

Spezielle Lösungen erhält man durch einen Separationsansatz: man sucht zunächst Lösungen der stationären Gleichung

$$-\frac{1}{2} \Delta_x \phi(x) = \lambda \phi(x).$$

Diese liefern dann via $\psi(t, x) := e^{-i\lambda t} \phi(x)$ Lösungen der zeitabhängigen Gleichung. Die Eigenfunktionen des Laplaceoperators auf dem \mathbb{R}^d sind die sogenannten ebenen Wellen

$$\phi_k(x) = e^{ik \cdot x} = e^{i(k_1 x_1 + \dots + k_d x_d)} \quad \text{für } k \in \mathbb{R}^d,$$

da

$$-\frac{1}{2} \Delta_x \phi_k(x) = \frac{1}{2} (k_1^2 + \dots + k_d^2) e^{ik \cdot x} = \frac{1}{2} |k|^2 e^{ik \cdot x}.$$

Also haben wir auch eine erste Lösung für die freie Schrödingergleichung, die ebene Welle

$$\psi_k(x, t) := e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{ik \cdot x}.$$

Es ist $|\psi_k(x, t)|^2 = 1$, also

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi_k(x, t)|^2 dx = \infty.$$

Deshalb lassen sich diese Lösungen nicht im Sinne der Quantenmechanik als Wahrscheinlichkeitsdichten interpretieren.

Um quadratintegrierbare Lösungen zu erhalten stellen wir zunächst fest, dass aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung auch Linearkombinationen von Lösungen wieder Lösungen sind, also zumindest formal auch

$$\psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}^d} \varrho(k) \psi_k(x, t) dk = \int_{\mathbb{R}^d} \varrho(k) e^{-i(\frac{k^2}{2} t - k \cdot x)} dk$$

für jedes $\varrho : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ wieder eine Lösung ist. Die Anfangsdaten $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ legen ϱ fest, da bei $t = 0$

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \varrho(k) e^{ik \cdot x} dk$$

gelten muss.

2.1 Die Fouriertransformation auf \mathcal{S}

2.1 Definition. Fouriertransformation

Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, dann heißt

$$\hat{f}(k) = (\mathcal{F}f)(k) := \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ik \cdot x} dx$$

2 Die freie Schrödinger-Gleichung

die **Fouriertransformierte** von f und

$$\check{f}(k) = (\mathcal{F}^{-1}f) := \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{ik \cdot x} dx$$

die **Fourierrücktransformierte** von f .

Um Aussagen über die Regularität der Fouriertransformierten zu bekommen, erinnern wir uns an das folgende Lemma aus der Integrationstheorie.

2.2 Lemma. Integrale mit Parameter

Sei $\Gamma \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall und $f: \mathbb{R}^d \times \Gamma \rightarrow \mathbb{C}$ so, dass $f(x, \gamma) \in L^1(\mathbb{R}_x^d)$ für jedes feste $\gamma \in \Gamma$. Setze $I(\gamma) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x, \gamma) dx$.

- (a) Falls die Abbildung $\gamma \mapsto f(x, \gamma)$ für fast alle $x \in \mathbb{R}^d$ stetig ist und es eine Funktion $g \in L^1(\mathbb{R}^d)$ gibt mit $\sup_{\gamma \in \Gamma} |f(x, \gamma)| \leq g(x)$ für fast alle $x \in \mathbb{R}^d$, dann ist auch $I(\gamma)$ stetig.
- (b) Falls die Abbildung $\gamma \mapsto f(x, \gamma)$ für alle $x \in \mathbb{R}^d$ stetig differenzierbar ist und es eine Funktion $g \in L^1(\mathbb{R}^d)$ gibt mit $\sup_{\gamma \in \Gamma} |\partial_\gamma f(x, \gamma)| \leq g(x)$ für fast alle $x \in \mathbb{R}^d$, dann ist auch $I(\gamma)$ stetig differenzierbar und es gilt

$$\frac{dI}{d\gamma}(\gamma) = \frac{d}{d\gamma} \int_{\mathbb{R}^d} f(x, \gamma) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\partial}{\partial \gamma} f(x, \gamma) dx.$$

Beweis. Beide Aussagen sind direkte Konsequenzen des Satzes über die dominierte Konvergenz von Lebesgue. \square

2.3 Satz. Lemma von Riemann-Lebesgue

Für $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ ist

$$\hat{f} \in C_\infty(\mathbb{R}^d) := \left\{ f \in C(\mathbb{R}^d) \mid \lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{|x| > R} |f(x)| = 0 \right\}.$$

Beweis. Die Stetigkeit von \hat{f} folgt sofort aus Lemma 2.2 und der Stetigkeit von $k \mapsto e^{ik \cdot x}$. Den Abfall für $|x| \rightarrow \infty$ werden wir später leicht als Korollar eines anderen Satzes bekommen. \square

Wir untersuchen die Fouriertransformation zunächst auf möglichst schönen Funktionen. Da wir über ein unbeschränktes Gebiet integrieren, verlangen wir von "schönen Funktionen" nicht nur Glattheit sondern auch schnellen Abfall.

2.4 Definition. Ein *Multiindex* $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ ist ein d -tupel $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ mit $\alpha_j \in \mathbb{N}_0$, und $|\alpha| := \sum_{j=1}^d \alpha_j$. Für $x \in \mathbb{R}^d$ bezeichne

$$x^\alpha := x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_d^{\alpha_d} \quad \text{und} \quad \partial_x^\alpha := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}.$$

2.5 Definition. Schwartzraum

Der \mathbb{C} -Vektorraum der **Schwartz'schen Funktionen** (Schwartzraum) $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \subset C^\infty(\mathbb{R}^d)$ ist die Menge derjenigen $f \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$, für die gilt:

$$\|f\|_{\alpha, \beta} := \|x^\alpha \partial_x^\beta f(x)\|_\infty < \infty$$

für alle Multiindices $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$.

2.6 Bemerkung. Die Funktionen in \mathcal{S} fallen also schneller als jedes inverse Polynom ab und gleiches gilt für all ihre partiellen Ableitungen. Für $f \in \mathcal{S}$ ist $x^\alpha \partial_x^\beta f \in \mathcal{S}$ für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ und $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \subset L^1(\mathbb{R}^d)$. Die Abbildungen $\|\cdot\|_{\alpha,\beta} : \mathcal{S} \rightarrow [0, \infty)$ sind Normen.

2.7 Definition. Konvergenz im Schwartzraum

Wir sagen $f_n \rightarrow f$ in \mathcal{S} , wenn $\|f - f_n\|_{\alpha,\beta} \rightarrow 0$ für alle $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$.

2.8 Proposition. Eine Metrik auf \mathcal{S}

Die Konvergenz in \mathcal{S} ist äquivalent zur Konvergenz bezüglich der Metrik

$$d_{\mathcal{S}}(f, g) = \sum_{n=0}^{\infty} 2^{-n} \sup_{|\alpha|+|\beta|=n} \left(\frac{\|f - g\|_{\alpha,\beta}}{1 + \|f - g\|_{\alpha,\beta}} \right) \leq 2.$$

Beweis. Wir zeigen, dass $d_{\mathcal{S}}$ eine Metrik ist. Die Äquivalenz der Konvergenzbegriffe ist dann offensichtlich. Positivität, $d_{\mathcal{S}}(f, g) \geq 0$, und Symmetrie $d_{\mathcal{S}}(f, g) = d_{\mathcal{S}}(g, f)$ sind offensichtlich. Definitheit ebenfalls, denn $d_{\mathcal{S}}(f, g) = 0$ impliziert $\|f - g\|_{0,0} = \|f - g\|_{\infty} = 0$, also $f = g$. Die Dreiecksungleichung $d_{\mathcal{S}}(f, g) \leq d_{\mathcal{S}}(f, h) + d_{\mathcal{S}}(h, g)$ gilt, da $\|\cdot\|_{\alpha,\beta}$ jeweils die Dreiecksungleichung erfüllt und $h(x) = \frac{x}{1+x}$ für $x \geq 0$ monoton wachsend ist und $h(x+y) \leq h(x) + h(y)$ erfüllt. \square

2.9 Satz. Der Schwartzraum als vollständiger metrischer Raum

Der metrische Raum $(\mathcal{S}, d_{\mathcal{S}})$ ist vollständig.

Beweis. Sei (f_m) eine Cauchyfolge in \mathcal{S} bezüglich $d_{\mathcal{S}}$. Dann ist (f_m) auch Cauchyfolge bezüglich aller Halbnormen $\|\cdot\|_{\alpha,\beta}$. Also konvergiert $x^\alpha \partial_x^\beta f_m(x) \rightarrow g_{\alpha,\beta}(x) \in C_b(\mathbb{R}^d)$ gleichmäßig, da $C_b(\mathbb{R}^d)$ vollständig ist bezüglich der $\|\cdot\|_{\infty}$ -Norm.

Es bleibt zu zeigen, dass $g := g_{0,0} \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ ist und, dass $x^\alpha \partial_x^\beta g = g_{\alpha,\beta}$. Denn dann ist $g \in \mathcal{S}$ und $d_{\mathcal{S}}(f_m, g) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0$.

Sei nun der Einfachheit halber $d = 1$. Wir zeigen $g \in C^1(\mathbb{R})$ und $\partial_x g = g_{0,1}$. Höhere Ableitungen und höhere Dimensionen gehen analog. Da $f_m \in \mathcal{S}$, gilt

$$f_m(x) = f_m(0) + \int_0^x f'_m(y) dy. \tag{2.1}$$

Nun gilt $f_m \rightarrow g$ und $f'_m \rightarrow g_{0,1}$ gleichmäßig und deshalb ergibt der Limes $m \rightarrow \infty$ in (2.1)

$$g(x) = g(0) + \int_0^x g_{0,1}(y) dy.$$

Damit ist $g \in C^1(\mathbb{R})$ und $g' = g_{0,1}$. \square

2.10 Bemerkung. Fréchet-Raum

Die Konstruktion einer Metrik aus einer Folge von Halbnormen geht auch ganz allgemein und man nennt die so erhaltenen Räume *Fréchet-Räume*.

2.11 Lemma. Eigenschaften der Fouriertransformation auf \mathcal{S}

\mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} sind stetige lineare Abbildungen von \mathcal{S} nach \mathcal{S} und für beliebige Multiindices $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$ gilt

$$\left((ik)^\alpha \partial_k^\beta \mathcal{F} f \right) (k) = \left(\mathcal{F} \partial_x^\alpha (-ix)^\beta f \right) (k)$$

und, insbesondere,

$$\widehat{(xf)}(k) = i(\nabla_k \hat{f})(k) \quad \text{und} \quad \widehat{(\nabla_x f)}(k) = ik \hat{f}(k).$$

2 Die freie Schrödingerleichung

Beweis. Mit

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ik \cdot x} dx$$

und Lemma 2.2 gilt für $f \in \mathcal{S}$

$$\begin{aligned} (2\pi)^{\frac{d}{2}} \left((ik)^\alpha \partial_k^\beta \mathcal{F}f \right) (k) &= \int_{\mathbb{R}^d} (ik)^\alpha \partial_k^\beta e^{-ik \cdot x} f(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} (ik)^\alpha (-ix)^\beta e^{-ik \cdot x} f(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} (-1)^{|\alpha|} (\partial_x^\alpha e^{-ik \cdot x}) (-ix)^\beta f(x) dx \\ &\stackrel{\text{part. Int.}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ik \cdot x} \left(\partial_x^\alpha (-ix)^\beta f(x) \right) dx \\ &= (2\pi)^{\frac{d}{2}} \left(\mathcal{F} \partial_x^\alpha (-ix)^\beta f \right) (k). \end{aligned}$$

Daher ist $\mathcal{F}f \in C^\infty$ und die Formel gilt; es folgt weiter

$$\begin{aligned} \|\hat{f}\|_{\alpha,\beta} &= \left\| k^\alpha \partial_k^\beta \hat{f} \right\|_\infty \leq \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} |\partial_x^\alpha x^\beta f(x)| \frac{(1+|x|^2)^d}{(1+|x|^2)^d} dx \\ &\leq \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \left| (1+|x|^2)^d \partial_x^\alpha x^\beta f(x) \right| \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{(1+|x|^2)^d} dx}_{< \infty} \\ &\leq C \sum_{j=0}^m \sup_{|\tilde{\alpha}|+|\tilde{\beta}|=j} \|f\|_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \end{aligned}$$

für geeignetes $m \in \mathbb{N}$ und $C < \infty$ unabhängig von f . Damit ist einerseits $\mathcal{F}f \in \mathcal{S}$ und andererseits impliziert $f_n \rightarrow f$ in \mathcal{S} auch $\hat{f}_n \rightarrow \hat{f}$ in \mathcal{S} . Da in metrischen Räumen Folgenstetigkeit die Stetigkeit impliziert, ist $\mathcal{F} : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ stetig. Das Argument für \mathcal{F}^{-1} verläuft analog. \square

2.12 Satz. Bijektivität der Fouriertransformation auf \mathcal{S}

Die Fouriertransformation $\mathcal{F} : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ ist eine stetige Bijektion und ihre stetige Inverse ist \mathcal{F}^{-1} .

Beweis. Wir möchten $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F} = \text{id}_{\mathcal{S}}$ zeigen ($\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = \text{id}_{\mathcal{S}}$ geht analog). Da $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}$ und $\text{id}_{\mathcal{S}}$ jeweils stetige Abbildungen sind, reicht es, ihre Gleichheit auf einer dichten Teilmenge zu zeigen.

2.13 Lemma. Die glatten Funktionen mit kompaktem Träger bezeichnet mit $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ liegen dicht in $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

Beweis. Wähle dazu eine glatte Abschneidefunktion G mit kompaktem Träger und mit $G(0) = 1$, beispielsweise

$$G(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{1-|x|^2}+1} & \text{für } |x| < 1 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dann ist $f_n(x) := f(x)G(\frac{x}{n})$ eine Folge in C_0^∞ welche in allen Halbnormen $\|\cdot\|_{\alpha,\beta}$ gegen f konvergiert. \square

Sei also $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ gegeben. Es bezeichne $W_m \subseteq \mathbb{R}^d$ den am Ursprung zentrierten Würfel der Kantenlänge $2m$, wobei m so groß gewählt ist, dass $\text{supp} f \subset W_m$ gilt. Wir setzen $K_m = \frac{\pi}{m}\mathbb{Z}^d$. Dann lässt sich f auf W_m als gleichmäßig konvergente Fourierreihe schreiben,

$$f(x) = \sum_{k \in K_m} f_k e^{ik \cdot x},$$

mit den Fourierkoeffizienten

$$f_k = \frac{1}{\text{Vol}(W_m)} \int_{W_m} f(x) e^{-ik \cdot x} dx = \frac{1}{\text{Vol}(W_m)} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ik \cdot x} dx = \frac{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}{(2m)^d} (\mathcal{F}f)(k).$$

Damit haben wir

$$f(x) = \sum_{k \in K_m} \frac{(\mathcal{F}f)(k) e^{ik \cdot x}}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \left(\frac{\pi}{m}\right)^d,$$

was wir als Riemannsumme auffassen, wobei $(\frac{\pi}{m})^d$ jeweils das Volumen des Würfels der Kantenlänge $\frac{\pi}{m}$ um einen Punkt im Gitter K_m ist. Damit ergibt sich

$$f(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{k \in K_m} \frac{(\mathcal{F}f)(k) e^{ik \cdot x}}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \left(\frac{\pi}{m}\right)^d = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} (\mathcal{F}f)(k) e^{ik \cdot x} dk = (\mathcal{F}^{-1} \mathcal{F}f)(x).$$

□

2.14 Proposition. Für $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(x) g(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \hat{g}(x) dx$$

und insbesondere

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\hat{f}(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 dx$$

Beweis. Mit dem Satz von Fubini ergibt sich sofort

$$\int_{\mathbb{R}^d} \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^d} e^{-ik \cdot x} f(k) dk \right)}_{=(2\pi)^{\frac{d}{2}} \hat{f}(x)} g(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^d} e^{-ik \cdot x} g(x) dx \right)}_{=(2\pi)^{\frac{d}{2}} \hat{g}(k)} f(k) dk.$$

Für die zweite Gleichung stellen wir zunächst fest, dass

$$(\overline{\mathcal{F}f})(k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{e^{-ik \cdot x} f(x)} dx = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ik \cdot x} \overline{f(x)} dx = (\mathcal{F}^{-1} \overline{f})(k).$$

Setzt man $g(x) = (\mathcal{F}^{-1} \overline{f})(x) = \overline{(\mathcal{F}f)(x)}$ in die erste Gleichung ein, erhält man die zweite Behauptung als Spezialfall. □

2.15 Beispiel. Die Fouriertransformierte einer Gaußfunktion

Für $a > 0$ sei $f_a(x) := \exp(-\frac{ax^2}{2})$. Dann ist mit der Substitution $y := \sqrt{\frac{a}{2}}x$

$$\begin{aligned} \hat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{ax^2}{2}} e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{a\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-y^2 - iyk\sqrt{2/a}} dy \\ &= \frac{e^{-\frac{k^2}{2a}}}{\sqrt{a\pi}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} e^{-(y + \frac{ik}{\sqrt{2a}})^2} dy}_{=\sqrt{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-\frac{k^2}{2a}}. \end{aligned}$$

Allgemeiner ist für $f_a(x) = e^{-\frac{a|x|^2}{2}}$ mit $\text{Re}(a) > 0$ offensichtlich $f_a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und, nicht ganz so offensichtlich,

$$\hat{f}(k) = a^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{|k|^2}{2a}}.$$

2 Die freie Schrödingergleichung

Um dies mit obiger Rechnung zu sehen, verwendet man, dass für $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re}(\alpha^2) > 0$

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-(\alpha x + \beta)^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$$

gilt. Für $\operatorname{Re}(\alpha^2) = 0$ gilt zumindest noch

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}. \quad (2.2)$$

Wir betrachten nun wieder die freie Schrödingergleichung

$$i\partial_t \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t, x).$$

Wenden wir auf beiden Seiten die Fouriertransformation an, so erhalten wir zunächst rein formal die Gleichung

$$i\partial_t \widehat{\psi}(t, k) = \frac{1}{2} |k|^2 \widehat{\psi}(t, k). \quad (2.3)$$

Diese ist für jedes feste $k \in \mathbb{R}^d$ eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung, deren eindeutige globale Lösung durch

$$\widehat{\psi}(t, k) = e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \widehat{\psi}(0, k) \quad (2.4)$$

gegeben ist. Um die Lösung der ursprünglichen Gleichung zu bekommen, müssen wir lediglich zurücktransformieren und erhalten so einen expliziten Ausdruck für die Lösung der freien Schrödingergleichung

$$\psi(t, x) = (\mathcal{F}^{-1} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}\psi_0)(x)$$

zum Anfangswert $\psi(0, x) = \psi_0(x)$.

2.16 Satz. Eindeutige globale Lösung der freien Schrödingergleichung

Sei $\psi_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Dann ist die eindeutige globale Lösung $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$ der freien Schrödingergleichung mit $\psi(0, x) = \psi_0(x)$ für $t \neq 0$ gegeben durch

$$\psi(t, x) = \frac{1}{(2\pi i t)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) dy. \quad (2.5)$$

Weiterhin gilt $\|\psi(t, \cdot)\|_{L^2} = \|\psi_0\|_{L^2}$.

Beweis. Man überlegt sich zunächst, dass $\psi(t, x) := (\mathcal{F}^{-1} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}\psi_0)(x)$ tatsächlich $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$ erfüllt. Wir zeigen exemplarisch, dass $t \mapsto \psi(t)$ differenzierbar ist im behaupteten Sinne. Sei $\dot{\psi}(t, x) := -i(\mathcal{F}^{-1} \frac{|k|^2}{2} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}\psi_0)(x)$ dann ist $\dot{\psi}(t, \cdot) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und wir müssen zeigen, dass

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| \frac{\psi(t+h) - \psi(t)}{h} - \dot{\psi}(t) \right\|_{\alpha, \beta} = 0$$

bezüglich jeder Halbnorm $\|\cdot\|_{\alpha, \beta}$. Aufgrund der Stetigkeit und Linearität von \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} ist dies aber äquivalent zu

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| \frac{\widehat{\psi}(t+h) - \widehat{\psi}(t)}{h} - \widehat{\dot{\psi}}(t) \right\|_{\alpha, \beta} = 0$$

für alle α, β . Das folgt aber aus der Glattheit von $e^{-i\frac{|k|^2}{2}t}$ und dem Abfall von $\widehat{\psi}_0(k)$:

$$\left\| \frac{\widehat{\psi}(t+h) - \widehat{\psi}(t)}{h} - \widehat{\dot{\psi}}(t) \right\|_{\alpha, \beta} = \sup_{k \in \mathbb{R}^d} \left| k^\alpha \partial_k^\beta \left(\frac{e^{-i\frac{|k|^2}{2}(t+h)} - e^{-i\frac{|k|^2}{2}t}}{h} + i \frac{|k|^2}{2} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \right) (\mathcal{F}\psi_0)(k) \right| \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0.$$

Da (2.4) die eindeutige Lösung von (2.3) ist, ist $\psi(t, x)$ die eindeutige Lösung in \mathcal{S} . Nun kann man entweder direkt nachrechnen, dass die Formel (2.5) für $\psi(t, x)$ gilt, wobei man (2.2) verwendet. Oder man rechnet direkt nach, dass (2.5) ebenfalls eine Lösung der freien Schrödingergleichung in \mathcal{S} definiert.

Die Isometrie-eigenschaft in L^2 folgt schließlich aus der Isometrie-eigenschaft von \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} , vgl. Proposition 2.14, und der Tatsache, dass $|e^{-i|k|^2 t/2}| = 1$. \square

2.17 Bemerkung. Das Zerfließen der Lösungen der freien Schrödingergleichung

Aus (2.5) ergibt sich sofort, dass die Lösungen der freien Schrödingergleichung für große Zeiten betragsmäßig klein werden,

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\psi(t, x)| \leq \frac{\|\psi_0\|_{L^1}}{(2\pi t)^{\frac{d}{2}}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0.$$

Da die L^2 -Norm aber erhalten bleibt, bedeutet das, dass sich die Lösungen immer mehr “verbreitern”. Man spricht vom Zerfließen des Wellenpackets.

2.18 Definition. Polynomial beschränkte Funktionen

Sei $C_{\text{pol}}^\infty(\mathbb{R}^d)$ der Raum der glatten polynomial beschränkten Funktionen: $g \in C_{\text{pol}}^\infty(\mathbb{R}^d)$ falls $g \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ und es für alle $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ ein $n(\alpha) \in \mathbb{N}$ und $C_\alpha < \infty$ gibt, so dass

$$|\partial^\alpha g(x)| \leq C_\alpha \langle x \rangle^{n(\alpha)} := C_\alpha (1 + |x|^2)^{\frac{n(\alpha)}{2}}.$$

Wir haben bereits implizit verwendet, dass für jede Funktion $f \in C_{\text{pol}}^\infty(\mathbb{R}^d)$ die Abbildung

$$M_f : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}, \quad \psi(x) \mapsto f(x)\psi(x)$$

stetig ist.

2.19 Definition. Pseudodifferentialoperatoren

Motiviert durch Lemma 2.11 definieren wir für $f \in C_{\text{pol}}^\infty(\mathbb{R}^d)$ den zugehörigen Pseudodifferentialoperator $f(-i\nabla_x) : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ durch

$$(f(-i\nabla_x)\psi)(x) := (\mathcal{F}^{-1}M_f\mathcal{F}\psi)(x) = (\mathcal{F}^{-1}f(k)\mathcal{F}\psi)(x).$$

Die Stetigkeit von M_f und \mathcal{F} impliziert dann auch die Stetigkeit von $f(-i\nabla_x)$. Für $f(k) = k^\alpha$ gilt natürlich wieder $f(-i\nabla) = (-i)^{|\alpha|}\partial_x^\alpha$. Für Polynome sind die zugehörigen Pseudodifferentialoperatoren also wieder gewöhnliche Differentialoperatoren.

2.20 Beispiel. Translationen und der freie Propagator

Für $a \in \mathbb{R}^d$ sei $T_a(k) = e^{ia \cdot k}$. Es ist $T_a \in C_{\text{pol}}^\infty$ und für $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ gilt

$$(T_a(-i\nabla)\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int e^{-ik \cdot a} e^{ik \cdot x} \widehat{\psi}(k) dk = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int e^{ik \cdot (x-a)} \widehat{\psi}(k) dk = \psi(x-a).$$

Man kann also den Operator der Funktionen um einen konstanten Vektor a verschiebt als Pseudodifferentialoperator schreiben.

2 Die freie Schrödingergleichung

Ein anderes Beispiel ist $P_f(k) = e^{-\frac{|k|^2 t}{2}}$. Es ist $P_f \in C_{\text{pol}}^\infty(\mathbb{R}^d)$ und somit

$$\psi(t, x) = (P_f(t, -i\nabla_x)\psi_0)(x).$$

Diesen Operator nennt man den *freien Propagator* und schreibt auch

$$\psi(t) = e^{\frac{i}{2}\Delta_x t}\psi_0.$$

2.21 Beispiel. Wärmeleitungsgleichung bzw. Diffusion

Wir können nun direkt auch die Lösung der Wärmeleitungsgleichung oder Diffusionsgleichung

$$\partial_t f(t, x) = \frac{1}{2}\Delta_x f(t, x)$$

für $f(0, \cdot) = f_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und $t > 0$ hinschreiben:

$$f(t) = e^{\Delta_x t} f(0) = W(t, -i\nabla_x) f_0$$

mit

$$W(t, k) = e^{-\frac{k^2}{2}t}.$$

Beachte, dass $W(t) \in C_{\text{pol}}^\infty$ nur für $t \geq 0$ gilt. Wir können also nicht für alle Anfangsdaten $f_0 \in \mathcal{S}$ Existenz von Lösungen auch für negative Zeiten erwarten. Hat \hat{f}_0 aber beispielsweise kompakten Träger, so erhalten wir tatsächlich eine Lösung für alle $t \in \mathbb{R}$.

2.22 Definition. Faltung

Seien $f, g \in \mathcal{S}$. Dann heißt

$$(f * g)(x) := \int_{\mathbb{R}^d} f(x-y)g(y) \, dy$$

die *Faltung* von f und g .

2.23 Satz. Eigenschaften der Faltung

Für $f, g, h \in \mathcal{S}$ gelten die folgenden Rechenregeln:

- (i) $(f * g) * h = f * (g * h)$ und $f * g = g * f$
- (ii) Die Abbildung $g \mapsto f * g$ von \mathcal{S} nach \mathcal{S} ist stetig.
- (iii) Es gilt

$$\widehat{f * g} = (2\pi)^{\frac{d}{2}} \hat{f} \cdot \hat{g}$$

und entsprechend $\widehat{f\hat{g}} = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \hat{f} * \hat{g}$. Insbesondere ist

$$g(-i\nabla)f = \mathcal{F}^{-1}(g\hat{f}) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \check{g} * f.$$

Beweis. (i) und (iii) sind leicht nachzurechnen. Die Stetigkeit, also (ii) folgt dann aus

$$f * g = (2\pi)^{d/2} \mathcal{F}^{-1} \hat{f} \mathcal{F} g,$$

die Faltung mit f entspricht also der Hintereinanderausführung von Fouriertransformation, Multiplikation mit \hat{f} und Rücktransformation, also der Komposition stetiger Abbildungen, welche dann auch stetig ist. Damit gilt auch (ii). \square

2.24 Beispiel. Der Wärmeleitungskern

Mit dem Wärmeleitungskern

$$G(t, x) := (2\pi)^{-d/2} (\mathcal{F}^{-1} W)(t, x) = \frac{1}{(2\pi t)^{d/2}} e^{-\frac{|x|^2}{2t}}$$

ergibt sich für die Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$f(t, x) = (W(t, -i\nabla_x) f_0)(x) = (G(t) * f_0)(x) = \frac{1}{(2\pi t)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{2t}} f_0(y) \, dy.$$

2.25 Bemerkung. Um zumindest ein wenig Intuition für die Rolle des Laplaceoperators zu bekommen, betrachten wir kurz die verschiedenen physikalische Gleichungen, die den Laplaceoperator enthalten, in einer Dimension:

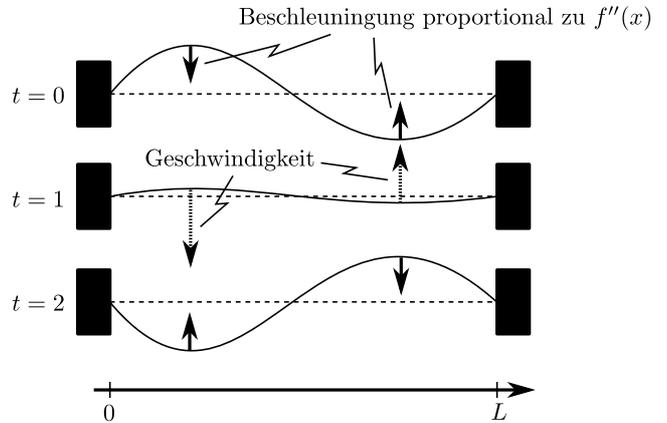
Die Wellengleichung: Die Gleichung für die Auslenkung $f(t, x) \in \mathbb{R}$ einer schwingende Saite der Länge L ist die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x)$$

mit Randbedingung

$$f(t, 0) = f(t, L) = 0.$$

Die Beschleunigung der Saite am Ort x ist also proportional zur Krümmung an dieser Stelle. Deshalb schwingt die Saite, siehe Bild.



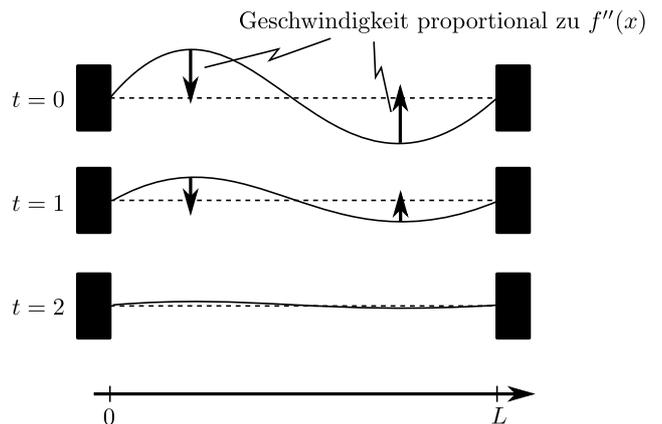
Die Wärmeleitungsgleichung: Die Gleichung für die Temperatur $f(t, x)$ in einem Draht der Länge L , dessen Temperatur an den Enden auf 0 gehalten wird, ist die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x)$$

mit Randbedingung

$$f(t, 0) = f(t, L) = 0.$$

Die „Geschwindigkeit“, also die Rate, mit der sich die Temperatur am Ort x ändert, ist jetzt proportional zur Krümmung an dieser Stelle. Deshalb strebt die Temperaturverteilung dem konstanten Wert $f(x) = 0$ entgegen.



Die Schrödingergleichung: Die Schrödingergleichung

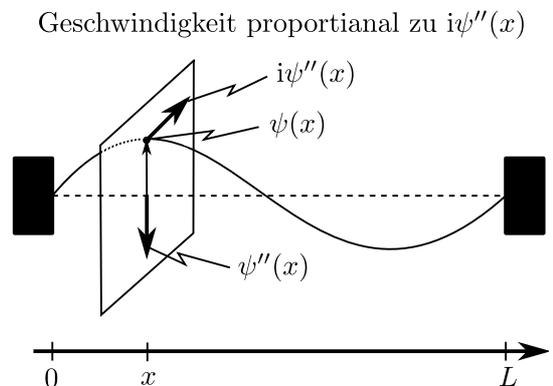
$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = i \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(t, x)$$

mit Randbedingung

$$\psi(t, 0) = \psi(t, L) = 0$$

beschreibt ein Teilchen in einer Dimension in einem Kasten. Sie enthält wie die Wärmeleitungsgleichung nur eine Zeitableitung, führt aber wegen des Faktors i dennoch zu „Wellenverhalten“ der Lösungen. Denn ψ ist nun komplexwertig,

was wir uns geometrisch auch als \mathbb{R}^2 -wertig vorstellen können. Die komplexe Ebene ist am Punkt x in der Zeichnung orthogonal zur einen Raumrichtung angedeutet. Und die Rate mit der sich $\psi(x)$ ändert ist zwar betragsmäßig proportional zur Krümmung, wegen des Faktors i aber orthogonal zu $\psi''(x)$ und im Bild auch orthogonal zu $\psi(x)$. Im Allgemeinen ändern sich deshalb sowohl das Argument als auch der Betrag von $\psi(t, x)$ zeitlich.



2.2 Temperierte Distributionen

2.26 Definition. Temperierte Distributionen

Die Elemente des Dualraumes $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ heißen *temperierte Distributionen* (manchmal auch verallgemeinerte Funktionen).

2.27 Erinnerung. Der Dualraum V' eines topologischen Vektorraums V ist der Raum der stetigen linearen Abbildungen von V in den Körper, die sog. Funktionale. Für $f \in V$ und $T \in V'$ schreibt man für die sogenannte natürliche Paarung auch oft

$$(f, T)_{V, V'} := T(f).$$

2.28 Beispiele. (a) Sei $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ messbar und polynomiell L^1 -beschränkt, d.h. $(1+|x|^2)^{-m}g(x) \in L^1(\mathbb{R}^d)$ für ein $m \in \mathbb{N}$, dann ist

$$T_g : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{C} : f \mapsto \int_{\mathbb{R}^d} g(x)f(x) dx$$

stetig und linear, also $T_g \in \mathcal{S}'$.

Beweis. Sei $f_n \rightarrow f$ in \mathcal{S} . Dann gilt

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} |T_g(f_n - f)| &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} |g(x)| |f_n(x) - f(x)| dx \\ &\leq \|(1 + |x|^2)^{-m}g\|_{L^1} \lim_{n \rightarrow \infty} \|(1 + |x|^2)^m |f_n - f|\|_{\infty} = 0. \end{aligned}$$

□

(b) Die Delta-Distribution ist

$$\delta : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{C} : f \mapsto \delta(f) := f(0).$$

Offenbar gilt $\delta \in \mathcal{S}'$. Oft schreibt man auch in Anlehnung an (a)

$$\delta(f) = \int_{\mathbb{R}^d} \delta(x)f(x) dx$$

und

$$\int_{\mathbb{R}^d} \delta(x - a)f(x) dx = f(a).$$

Offensichtlich gibt es keine "echte" Funktion $\delta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$, welche dies für alle $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ leistet. Aber man kann δ in $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ durch echte Funktionen approximieren. Sei beispielsweise $g \in L^1(\mathbb{R})$ mit $\int g(x) dx = 1$ und

$$g_n(x) := ng(nx).$$

Dann gilt mit dominierter Konvergenz für jedes stetige beschränkte f , also insbesondere für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, dass

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} T_{g_n}(f) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} g_n(x)f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\int_{\mathbb{R}} g_n(x)f(0) dx + \int_{\mathbb{R}} g_n(x)(f(x) - f(0)) dx \right) \\ &= f(0) + \lim_{n \rightarrow \infty} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} g(y)(f(\frac{y}{n}) - f(0)) dy}_{\rightarrow 0 \text{ punktweise}} = f(0) = \delta(f). \end{aligned}$$

2.29 Definition. Schwache und schwach* Konvergenz

Sei M ein topologischer Vektorraum und M' sein Dual.

- (i) Eine Folge (m_n) in M konvergiert schwach gegen $m \in M$, falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T(m_n) = T(m) \quad \text{für alle } T \in M'.$$

Man schreibt dann kurz $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} m_n = m$ oder $m_n \rightharpoonup m$.

- (ii) Eine Folge (T_n) in M' konvergiert schwach* gegen $T \in M'$, falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_n(m) = T(m) \quad \text{für alle } m \in M.$$

Man schreibt dann kurz $w^*\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = T$ oder $T_n \xrightarrow{*} T$.

2.30 Satz. Die adjungierte Abbildung

Sei $A : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ linear und stetig, dann wird durch

$$A' : \mathcal{S}' \rightarrow \mathcal{S}', \quad (A'T)(f) := T(Af) \quad \text{für alle } f \in \mathcal{S}$$

eine schwach*-stetige lineare Abbildung definiert.

Beweis. Es ist $A'T \in \mathcal{S}'$, da $A'T = T \circ A$ als Komposition stetiger Abbildungen stetig ist. Um zu sehen, dass $A' : \mathcal{S}' \rightarrow \mathcal{S}'$ schwach*-stetig ist, zeigen wir zunächst Folgenstetigkeit. Sei $T_n \xrightarrow{*} T$, dann gilt für jedes $f \in \mathcal{S}$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (A'T_n)(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} T_n(Af) = T(Af) = (A'T)(f),$$

also $A'T_n \xrightarrow{*} A'T$. Nun folgt im allgemeinen aus der Folgenstetigkeit nicht die Stetigkeit (die Topologie auf \mathcal{S}' ist nicht durch eine Metrik gegeben!). Allerdings kann man das Argument völlig analog auch auf Netze anwenden und aus der Netzstetigkeit folgt auch hier die Stetigkeit. \square

2.31 Definition. Die Fouriertransformation auf \mathcal{S}'

Für $T \in \mathcal{S}'$ ist die Fouriertransformierte $\widehat{T} \in \mathcal{S}'$ definiert durch

$$\widehat{T}(f) := T(\widehat{f}) \quad \text{für alle } f \in \mathcal{S},$$

also $\mathcal{F}_{\mathcal{S}'} := \mathcal{F}'_{\mathcal{S}}$.

2.32 Korollar. Die Fouriertransformation $\mathcal{F} : \mathcal{S}' \rightarrow \mathcal{S}'$ ist eine schwach*-stetige Bijektion, welche die Fouriertransformation auf \mathcal{S} (und auch auf L^1) fortsetzt: für $f \in \mathcal{S}$ (bzw. L^1) gilt $\widehat{\widehat{T}}_f = T_{\widehat{f}}$.

Beweis. Da $\mathcal{F} : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ stetig und linear ist, folgt aus Satz 2.30, dass $\mathcal{F} : \mathcal{S}' \rightarrow \mathcal{S}'$ schwach*-stetig ist. Da $(\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}T)(f) = T(\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}f) = T(f)$ gilt, ist die Fouriertransformation auch auf \mathcal{S}' bijektiv mit stetiger Inverser \mathcal{F}^{-1} .

Schließlich gilt für $f \in L^1$, dass

$$\widehat{T}_f(g) = T_f(\widehat{g}) = \int f(x)\widehat{g}(x) dx = \int \widehat{f}(x)g(x) dx = T_{\widehat{f}}(g).$$

\square

2.33 Beispiel. Fouriertransformierte der δ -Distribution

Mit $\delta(f) := f(0)$ ergibt sich

$$\widehat{\delta}(f) = \delta(\widehat{f}) = \widehat{f}(0) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int f(x) dx = \int \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} f(x) dx = T_g(f).$$

Also ist die Fouriertransformierte von δ die konstante Funktion $g(x) \equiv (2\pi)^{-\frac{d}{2}}$.

2 Die freie Schrödingergleichung

Auch die Ableitung $\partial_x^\alpha : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$ ist eine stetige lineare Abbildung, da

$$\|\partial_x^\alpha f\|_{\gamma,\beta} := \|x^\gamma \partial_x^\beta \partial_x^\alpha f\|_\infty = \|f\|_{\gamma,\alpha+\beta}.$$

Deshalb können wir auch die Ableitung von \mathcal{S} durch Adjungieren auf \mathcal{S}' erweitern.

2.34 Definition. Distributionelle Ableitung

Für $T \in \mathcal{S}'$ ist die distributionelle Ableitung $\partial_x^\alpha T \in \mathcal{S}'$ durch

$$(\partial_x^\alpha T)(f) := T\left((-1)^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f\right)$$

definiert.

2.35 Korollar. Die distributionelle Ableitung $\partial_x^\alpha : \mathcal{S}' \rightarrow \mathcal{S}'$ ist schwach*-stetig und setzt die Ableitung auf \mathcal{S} fort, d.h. für $g \in \mathcal{S}$ ist

$$\partial_x^\alpha T_g = T_{\partial_x^\alpha g}.$$

Beweis. Als Adjungierte Abbildung ist ∂_x^α wieder nach Satz 2.30 stetig. Die Fortsetzungseigenschaft ergibt sich aus $|\alpha|$ -facher partieller Integration:

$$(\partial_x^\alpha T_g)(f) = T_g((-1)^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f) = \int g(x) (-1)^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f(x) dx = \int f(x) \partial_x^\alpha g(x) dx = T_{\partial_x^\alpha g}(f).$$

□

2.36 Beispiel. Die Ableitung der δ -Distribution

Es ist

$$(\partial_x^\alpha \delta)(f) = \delta((-1)^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f) = (-1)^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f(0).$$

Für die Heavyside-Funktion $\Theta(x) := \mathbf{1}_{[0,\infty)}(x)$ auf \mathbb{R} ist die distributionelle Ableitung $\frac{d}{dx} \Theta = \delta$.

2.37 Korollar. Sei $g \in C_{\text{pol}}^\infty$, dann wird durch $(gT)(f) := T(gf)$ eine schwach*-stetige Abbildung $\mathcal{S}' \rightarrow \mathcal{S}'$ definiert. Man kann zwar Distributionen nicht miteinander multiplizieren, aber zumindest mit Funktionen aus C_{pol}^∞ .

2.38 Korollar. Für $g \in \mathcal{S}$ ist durch $(g*T)(f) = T(\tilde{g}*f)$ mit $\tilde{g}(x) := g(-x)$ eine schwach*-stetige Abbildung definiert, die die Faltung auf \mathcal{S} fortsetzt, d.h. $g*T_h = T_{g*h}$ für $h \in \mathcal{S}$ erfüllt.

2.39 Bemerkung. Eindeutigkeit der Fortsetzungen

Die Fortsetzungen sind alle eindeutig, da \mathcal{S} dicht liegt in \mathcal{S}' bezüglich der schwach*-Topologie.

Damit können wir jetzt die freie Schrödinger-Gleichung auch im distributionellen Sinne lösen.

2.40 Proposition. Distributionelle Lösung der freien Schrödingergleichung

Sei $\psi_0 \in \mathcal{S}'$, dann ist die eindeutige globale Lösung $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d))$ gegeben durch

$$\psi(t) = \mathcal{F}^{-1} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F} \psi_0.$$

Beweis. Zunächst stellen wir fest, dass mit den Korollaren 2.32 und 2.37 offensichtlich $\psi(t) \in \mathcal{S}'$ gilt. Um zu sehen, dass $\psi(t)$ die Schrödingergleichung im distributionellen Sinne löst, betrachte für eine beliebige Testfunktion $f \in \mathcal{S}$

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} (f, \psi(t))_{\mathcal{S}, \mathcal{S}'} &= i \frac{d}{dt} (\mathcal{F} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}^{-1} f, \psi_0)_{\mathcal{S}, \mathcal{S}'} = (\mathcal{F} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \frac{|k|^2}{2} \mathcal{F}^{-1} f, \psi_0)_{\mathcal{S}, \mathcal{S}'} \\ &= (-\mathcal{F} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}^{-1} \frac{1}{2} \Delta f, \psi_0)_{\mathcal{S}, \mathcal{S}'} = (-\frac{1}{2} \Delta f, \mathcal{F} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}^{-1} \psi_0)_{\mathcal{S}, \mathcal{S}'} \\ &= (f, -\frac{1}{2} \Delta \psi(t))_{\mathcal{S}, \mathcal{S}'}. \end{aligned}$$

Man mache sich klar, dass man die Ableitung aufgrund der Stetigkeit von $\psi(t) : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{C}$ in die Klammer ziehen kann. □

2.3 Asymptotik für große Zeiten und der Impulsoperator

Wir haben gezeigt, dass für $\psi_0 \in \mathcal{S}$ die Lösung der freien Schrödingergleichung durch

$$\psi(t, x) = \frac{1}{(2\pi it)^{\frac{d}{2}}} \int e^{i\frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) dy$$

gegeben ist. Damit kennen wir die Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konfiguration des Systems für alle Zeiten: für messbares $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ ist

$$P(X(t) \in \Lambda) = \int_{\Lambda} |\psi(t, x)|^2 dx.$$

Als nächstes möchten wir die ‘‘Geschwindigkeitsverteilung’’ bestimmen. Da die Geschwindigkeit zu einem festen Zeitpunkt in der Standard-Quantenmechanik nicht definiert ist, fragen wir nach der asymptotischen Geschwindigkeit für große Zeiten, welche wir mit Hilfe der Ortsverteilung im Sinne von

$$\text{Geschwindigkeit} = \frac{\text{zurückgelegte Strecke}}{\text{Zeit}}$$

durch

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P\left(\frac{X(t)}{t} \in \Lambda\right) := \lim_{t \rightarrow \infty} P(X(t) \in t\Lambda) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t\Lambda} |\psi(t, x)|^2 dx$$

definieren. Dass wir nicht genau im Ursprung starten spielt für die Asymptotik keine Rolle. Um einen einfachen Ausdruck für die Verteilung zu bekommen, zeigen wir zunächst folgendes Lemma.

2.41 Lemma. Asymptotik der Lösungen der freien Schrödingergleichung

Sei $\psi(t)$ die Lösung der freien Schrödinger-Gleichung mit $\psi(0) = \psi_0 \in \mathcal{S}$, dann gilt

$$\psi(t, x) = \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{d}{2}}} \widehat{\psi}_0\left(\frac{x}{t}\right) + r(t, x)$$

mit $\lim_{t \rightarrow \infty} \|r(t)\|_{L^2} = 0$.

Beweis. Es ist

$$\begin{aligned} \psi(t, x) &= \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{d}{2}}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int e^{-i\frac{x}{t}y} \left(e^{i\frac{y^2}{2t}} + 1 - 1\right) \psi_0(y) dy \\ &= \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{d}{2}}} \left(\widehat{\psi}_0\left(\frac{x}{t}\right) + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int e^{-i\frac{xy}{t}} \underbrace{\left(e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1\right)}_{=h(t,y)} \psi_0(y) dy \right) \\ &= \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{d}{2}}} \left(\widehat{\psi}_0\left(\frac{x}{t}\right) + \widehat{h}\left(t, \frac{x}{t}\right) \right) \end{aligned}$$

und somit

$$r(t, x) = \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{d}{2}}} \widehat{h}\left(t, \frac{x}{t}\right).$$

Für die L^2 -Norm des Restterms ergibt sich

$$\|r\|_{L^2}^2 = \int |r(t, x)|^2 dx = \frac{1}{t^d} \int \left| \widehat{h}\left(t, \frac{x}{t}\right) \right|^2 dx = \int \left| \widehat{h}(t, y) \right|^2 dy = \int |h(t, y)|^2 dy,$$

2 Die freie Schrödingergleichung

da die Fouriertransformation mit Proposition 2.14 eine Isometrie bezüglich der L^2 -Norm ist. Nun konvergiert aber $h(t, x)$ für $t \rightarrow \infty$ punktweise gegen Null. Da $|h(t, x)|^2 \leq 4|\psi_0(x)|^2$, liefert der Satz über die dominierte Konvergenz, dass auch

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int |h(t, x)|^2 dx = 0$$

ist. □

2.42 Satz. Verteilung der asymptotischen Geschwindigkeit

Sei $\psi(t, x)$ eine Lösung der freien Schrödingergleichung und $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ messbar. Dann ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P\left(\frac{X(t)}{t} \in \Lambda\right) := \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^{\psi_t}(t\Lambda) := \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t\Lambda} |\psi(t, x)|^2 dx = \int_{\Lambda} |\widehat{\psi}_0(p)|^2 dp.$$

Beweis. Aus Lemma 2.41 ergibt sich sofort

$$\int_{t\Lambda} |\psi(t, x)|^2 dx = \frac{1}{t^d} \int_{t\Lambda} |\widehat{\psi}_0\left(\frac{x}{t}\right)|^2 dx + R(t) = \int_{\Lambda} |\widehat{\psi}_0(p)|^2 dp + R(t),$$

wobei mit den Bezeichnungen aus dem Beweis des Lemmas

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} R(t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t\Lambda} |r(t, x)|^2 dx + \lim_{t \rightarrow \infty} 2\operatorname{Re} \left(\frac{1}{t^d} \int_{t\Lambda} \overline{\widehat{\psi}_0\left(\frac{x}{t}\right)} \widehat{h}\left(t, \frac{x}{t}\right) dx \right) \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} 2\operatorname{Re} \left(\int_{t\Lambda} \overline{\widehat{\psi}_0(p)} \widehat{h}(t, p) dp \right) \end{aligned}$$

ist. Für den ersten Summanden haben wir dort schon gezeigt, dass er im Limes $t \rightarrow \infty$ verschwindet. Mit der Cauchy-Schwarz Ungleichung bekommen wir schließlich

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left| \int_{t\Lambda} \overline{\widehat{\psi}_0(p)} \widehat{h}(t, p) dp \right| \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \|\widehat{\psi}_0\|_{L^2} \|\widehat{h}(t)\|_{L^2} = 0.$$

□

2.43 Bemerkung. (a) Beachte, dass die Verteilung der asymptotischen Geschwindigkeit weder von der Wahl des Zeitnullpunktes noch von der Wahl des Ursprungs im Konfigurationsraum abhängt, da

$$|\widehat{\psi}(t, p)|^2 = |e^{-i\frac{k^2}{2}t} \widehat{\psi}_0(p)|^2 = |e^{ia \cdot k} \widehat{\psi}_0(p)|^2 = |\widehat{\psi}_0(p)|^2.$$

- (b) Hätten wir die Masse m nicht gleich 1 gesetzt, müsste auf der linken Seite $P\left(\frac{mX(t)}{t} \in \Lambda\right)$ stehen. Deshalb haben wir tatsächlich die “asymptotische Impulsverteilung” berechnet.
- (c) Der Operator $P := -i\nabla_x$ heißt der Impulsoperator. Den “Erwartungswert eines Operators” berechnet man in der Quantenmechanik mittels

$$\mathbb{E}^{\psi_t}(P) := \langle \psi_t, P\psi_t \rangle := \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(t, x)} (P\psi)(t, x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\widehat{\psi}(t, p)} p \widehat{\psi}(t, p) dp = \int_{\mathbb{R}^d} p |\widehat{\psi}(0, p)|^2 dp.$$

Der quantenmechanische Erwartungswert des Impulsoperators ist also genau der Erwartungswert unsere asymptotischen Impulsverteilung.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

Wir betrachten nun die Schrödingergleichung mit Potential,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x).$$

Fouriertransformation liefert hier keine einfache Lösung mehr, da die Multiplikation mit $V(x)$ nun in die Faltung mit $\widehat{V}(k)$ übergeht, also zu einem Pseudodifferentialoperator $V(i\nabla_k)$ wird.

Die Grundidee wird im folgenden sein, die Gleichung als "gewöhnliche Differentialgleichung" erster Ordnung für eine vektorwertige Funktion $\psi : \mathbb{R}_t \rightarrow F$ mit einem geeigneten Funktionenraum F aufzufassen, also als

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H \psi(t) \quad \text{mit} \quad H = -\frac{1}{2} \Delta_x + V(x).$$

Zumindest formal kann man die Lösung dann in der Form

$$\psi(t) = e^{-iHt} \psi(0)$$

schreiben. Wie wir sehen werden und wie aus der physikalischen Interpretation und den Ergebnissen zur freien Schrödingergleichung zu erwarten ist, ist der geeignete Funktionenraum der Raum $L^2(\mathbb{R}^d)$ der quadratintegrablen Funktionen mit der L^2 -Norm. Dieser Raum hat die Struktur eines Hilbertraumes, weshalb wir kurz einige wesentliche Eigenschaften von Hilberträumen wiederholen.

3.1 Vorbemerkungen zu Hilbert- und Banachräumen

3.1 Definition. Hilbertraum

Ein \mathbb{C} -Vektorraum \mathcal{H} mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ der vollständig ist bezüglich der Norm $\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle}$ heißt Hilbertraum.

3.2 Beispiele. (a) \mathbb{C}^n wird durch das Skalarprodukt

$$\langle x, y \rangle_{\mathbb{C}^n} = \sum_{j=1}^n \bar{x}_j y_j$$

zu einem Hilbertraum.

(b) Der Raum ℓ^2 der quadratsummierbaren Folgen (x_j) ist mit dem Skalarprodukt

$$\langle x, y \rangle_{\ell^2} = \sum_{j=1}^{\infty} \bar{x}_j y_j$$

ein Hilbertraum.

(c) Sei (M, μ) ein Maßraum. Dann wird auf $L^2(M, \mu)$ durch

$$\langle \psi, \varphi \rangle_{L^2} = \int_M \bar{\psi}(x) \varphi(x) d\mu$$

ein Skalarprodukt definiert, welches $L^2(M, \mu)$ zu einem Hilbertraum macht.

3 Die Schrödinger-Gleichung mit Potential

3.3 Definition. Orthonormalfolge

Eine Folge (φ_n) in \mathcal{H} heißt Orthonormalfolge (ONF), falls $\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = \delta_{n,m}$ gilt.

3.4 Proposition. Orthogonalzerlegung

Sei (φ_j) eine Orthonormalfolge in \mathcal{H} . Dann läßt sich jedes $\psi \in \mathcal{H}$ gemäß

$$\psi = \underbrace{\sum_{j=1}^n \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j}_{=: \psi_n} + \underbrace{\left(\psi - \sum_{j=1}^n \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j \right)}_{=: \psi_n^\perp}$$

zerlegen, wobei $\langle \psi_n, \psi_n^\perp \rangle = 0$ und somit

$$\langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi_n, \psi_n \rangle + \langle \psi_n^\perp, \psi_n^\perp \rangle$$

gilt.

Beweis.

$$\langle \psi_n, \psi_n^\perp \rangle = \left\langle \sum_{j=1}^n \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j, \psi - \sum_{i=1}^n \langle \varphi_i, \psi \rangle \varphi_i \right\rangle = \sum_{j=1}^n |\langle \varphi_j, \psi \rangle|^2 - \sum_{j=1}^n |\langle \varphi_j, \psi \rangle|^2 = 0.$$

□

3.5 Korollar. Die Bessel und die Cauchy-Schwarz Ungleichung

(a) Sei (φ_j) eine Orthonormalfolge in \mathcal{H} . Dann gilt für alle $\psi \in \mathcal{H}$ und $n \in \mathbb{N}$ die

$$\text{Besselsche Ungleichung} \quad \|\psi\|^2 \geq \sum_{j=1}^n |\langle \varphi_j, \psi \rangle|^2.$$

(b) Für alle $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$ gilt die

$$\text{Cauchy-Schwarzsche Ungleichung} \quad |\langle \varphi, \psi \rangle| \leq \|\varphi\| \|\psi\|.$$

Beweis. Gemäß Proposition 3.4 gilt

$$\|\psi\|^2 = \|\psi_n\|^2 + \|\psi_n^\perp\|^2 \geq \|\psi_n\|^2,$$

also (a). (b) folgt sofort aus (a), indem man eine ONF (φ_j) mit $\varphi_1 = \varphi/\|\varphi\|$ wählt und den Fall $n = 1$ betrachtet. □

Man beachte, dass wir für Korollar 3.5 die Definitheit des Skalarprodukts nicht verwendet haben. Die entsprechenden Aussagen gelten also auch für jede positiv semi-definite symmetrische Sesquilinearform.

3.6 Proposition. Die Polarisationsidentität

In jedem komplexen Hilbertraum \mathcal{H} gilt die *Polarisationsidentität*

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \frac{1}{4} (\|\varphi + \psi\|^2 - \|\varphi - \psi\|^2 - i\|\varphi + i\psi\|^2 + i\|\varphi - i\psi\|^2).$$

Beweis. Für jede Sesquilinearform $B : X \times X \rightarrow \mathbb{C}$ auf einem komplexen Vektorraum X gilt die Polarisationsformel

$$B(x, y) = \frac{1}{4}(B(x + y, x + y) - B(x - y, x - y) - iB(x + iy, x + iy) + iB(x - iy, x - iy)).$$

□

3.7 Definition. Orthonormalbasis

Eine Orthonormalfolge (φ_j) aus \mathcal{H} heißt Orthonormalbasis (ONB), falls für alle $\psi \in \mathcal{H}$

$$\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j$$

gilt, wobei die Reihe in \mathcal{H} konvergiert, also

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \psi - \sum_{j=1}^N \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j \right\| = 0.$$

3.8 Definition. Separabilität

Ein topologischer Raum heißt separabel, falls er eine abzählbare dichte Teilmenge besitzt.

3.9 Proposition. Charakterisierung der Separabilität in Hilberträumen

Ein Hilbertraum ist genau dann separabel, wenn er eine Orthonormalbasis besitzt.

Beweis. Sei (φ_j) ONB, dann ist

$$\text{span}_{(\mathbb{Q}+i\mathbb{Q})} \{ \varphi_j \mid j \in \mathbb{N} \} := \left\{ \sum_{j=1}^N (a_j + ib_j) \varphi_j \mid N \in \mathbb{N}, a_j, b_j \in \mathbb{Q} \right\}$$

eine abzählbare dichte Teilmenge von \mathcal{H} . Sei umgekehrt $(\varphi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ eine abzählbare dichte Teilmenge, dann kann man (φ_j) soweit ausdünnen, dass die übrigen Vektoren $(\varphi_j)_{j \in J}$ linear unabhängig sind (d.h. je endlich viele sind l.u.), aber immer noch $\overline{\text{span}\{\varphi_j \mid j \in J\}} = \mathcal{H}$ gilt. Diese Menge kann man dann mit dem Gram-Schmidtschen Verfahren orthonormalisieren. □

3.10 Proposition. Charakterisierung von Orthonormalbasen

Eine Orthonormalfolge (φ_j) in \mathcal{H} ist genau dann eine Orthonormalbasis, wenn gilt:

$$\langle \varphi_j, \psi \rangle = 0 \quad \text{für alle } j \in \mathbb{N} \quad \Rightarrow \quad \psi = 0.$$

Beweis. Übung. □

3.11 Proposition. Parsevalsche Gleichung

Für eine Orthonormalbasis (φ_j) gilt die *Parsevalsche Gleichung*

$$\|\psi\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |\langle \varphi_j, \psi \rangle|^2.$$

Beweis. Folgt sofort aus der Definition und der Stetigkeit des Skalarprodukts:

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 &= \left\langle \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j, \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^M \langle \varphi_i, \psi \rangle \varphi_i \right\rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} \left\langle \sum_{j=1}^N \langle \varphi_j, \psi \rangle \varphi_j, \sum_{i=1}^M \langle \varphi_i, \psi \rangle \varphi_i \right\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N |\langle \varphi_j, \psi \rangle|^2. \end{aligned}$$

□

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.12 Bemerkung. ℓ^2 als Koordinatenraum für separable Hilberträume

Sei $(\varphi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ eine ONB des Hilbertraums \mathcal{H} . Dann ist die Abbildung

$$U : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2, \quad \varphi \mapsto (\langle \varphi_j, \psi \rangle)_{j \in \mathbb{N}}$$

aufgrund der Parsevalschen Gleichung eine Isometrie. Da zu jeder Folge $c \in \ell^2$ die Reihe $\sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j$ in der Norm konvergiert,

$$\left\| \sum_{j=N}^{\infty} c_j \varphi_j \right\|^2 = \left\langle \sum_{j=N}^{\infty} c_j \varphi_j, \sum_{i=N}^{\infty} c_i \varphi_i \right\rangle = \sum_{j=N}^{\infty} |c_j|^2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0,$$

ist U auch surjektiv, also ein isometrischer Isomorphismus.

Somit ist jeder separable Hilbertraum isometrisch isomorph zu ℓ^2 und jede ONB liefert einen solchen isometrischen Isomorphismus. Wir können ℓ^2 also als Koordinatenraum für separable Hilberträume unendlicher Dimension auffassen.

3.13 Beispiel. Fourierreihe als Koordinatendarstellung bzgl. einer ONB

In $L^2([0, 2\pi])$ ist $(\varphi_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ gegeben durch $\varphi_k(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ eine Orthonormalbasis. Die Darstellung

$$\psi = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \langle \varphi_k, \psi \rangle \varphi_k$$

heißt die *Fourierreihe* von ψ . Insbesondere ist $L^2([0, 2\pi])$ separabel.

3.14 Definition. Orthogonales Komplement

Für $M \subset \mathcal{H}$ heißt

$$M^\perp := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \langle \varphi, \psi \rangle = 0 \text{ für alle } \varphi \in M\}$$

das *orthogonale Komplement* von M . Es gilt $M \cap M^\perp \subset \{0\}$ und, da $\langle \varphi, \cdot \rangle$ linear und stetig ist, ist M^\perp ein abgeschlossener Unterraum von \mathcal{H} .

3.15 Satz. Orthogonalzerlegung

Sei $M \subset \mathcal{H}$ ein abgeschlossener Unterraum. Dann gilt

$$\mathcal{H} = M \oplus M^\perp,$$

d.h. jedes Element $\psi \in \mathcal{H}$ lässt sich eindeutig gemäß $\psi = \varphi + \varphi^\perp$ mit $\varphi \in M$ und $\varphi^\perp \in M^\perp$ zerlegen.

Beweis. Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass \mathcal{H} separabel ist (der einzig für uns interessante Fall). Dann sind auch M und M^\perp separable Hilberträume und es gibt Orthonormalbasen (φ_n) von M und (φ_m^\perp) von M^\perp . Wir zeigen, dass $(\varphi_n) \cup (\varphi_m^\perp)$ eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} ist und verwenden dazu das Kriterium aus Proposition 3.10.

Angenommen $\psi \in \mathcal{H}$ erfüllt $\langle \varphi_n, \psi \rangle = 0 = \langle \varphi_m^\perp, \psi \rangle$ für alle $m, n \in \mathbb{N}$. Dann gilt aufgrund der ersten Gleichung, dass $\langle \varphi, \psi \rangle = 0$ für alle $\varphi \in M$, also gilt $\psi \in M^\perp$. Da (φ_m^\perp) eine Orthonormalbasis von M^\perp ist, zeigt die zweite Gleichung, dass $\psi = 0$ ist. Also ist $\psi = \varphi + \varphi^\perp$ mit

$$\varphi := \sum_{n=1}^{\infty} \langle \varphi_n, \psi \rangle \varphi_n \quad \text{und} \quad \varphi^\perp := \sum_{m=1}^{\infty} \langle \varphi_m^\perp, \psi \rangle \varphi_m^\perp.$$

Zur Eindeutigkeit: Angenommen es gibt eine weitere Zerlegung $\psi = \tilde{\varphi} + \tilde{\varphi}^\perp$ mit $\tilde{\varphi} \in M$ und $\tilde{\varphi}^\perp \in M^\perp$. Dann folgt aus $\varphi + \varphi^\perp = \tilde{\varphi} + \tilde{\varphi}^\perp$, dass $M \ni \varphi - \tilde{\varphi} = \tilde{\varphi}^\perp - \varphi^\perp \in M^\perp$. Wegen $M \cap M^\perp = \{0\}$ folgt $\varphi - \tilde{\varphi} = \tilde{\varphi}^\perp - \varphi^\perp = 0$ also $\varphi = \tilde{\varphi}$ und $\tilde{\varphi}^\perp = \varphi^\perp$. \square

3.16 Definition. Beschränkter linearer Operator

Ein linearer Operator $L : X \rightarrow Y$ zwischen normierten Räumen X und Y heißt *beschränkt*, falls es ein $C < \infty$ gibt mit

$$\|Lx\|_Y \leq C\|x\|_X \quad \text{für alle } x \in X.$$

3.17 Proposition. Operatornorm

Die Menge $\mathcal{L}(X, Y)$ der linearen beschränkten Operatoren von X nach Y ist mit der Norm

$$\|L\|_{\mathcal{L}(X, Y)} := \sup_{\|x\|_X=1} \|Lx\|_Y$$

selbst ein normierter Raum. Falls Y vollständig ist, ist auch $\mathcal{L}(X, Y)$ vollständig, also ein Banachraum.

Beweis. Übung. □

3.18 Satz. Sei $L : X \rightarrow Y$ linear. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- (i) L ist stetig in 0.
- (ii) L ist stetig.
- (iii) L ist beschränkt.

Beweis. (iii) \Rightarrow (i): Sei $\|x_n\| \rightarrow 0$. Dann folgt $\|Lx_n\| \leq \|L\| \|x_n\| \rightarrow 0$.

(i) \Rightarrow (ii): Sei $\|x_n - x\| \rightarrow 0$ und L ist stetig bei 0. Dann ist $\|Lx_n - Lx\| = \|L(x_n - x)\| \rightarrow 0$.

(ii) \Rightarrow (iii): Angenommen, L ist nicht beschränkt, d.h. es gibt eine Folge (x_n) mit $\|x_n\| = 1$ so, dass $\|Lx_n\| \geq n$. Dann ist $z_n := \frac{x_n}{\|Lx_n\|}$ eine Nullfolge mit $\|z_n\| \leq \frac{1}{n}$, aber $\|Lz_n\| = 1$, was im Widerspruch zur Stetigkeit bei der Null steht. □

3.19 Beispiel. Unbeschränkter linearer Operator

Sei $\ell_0 = \{(x_n) \in \ell^1 \mid \exists N \in \mathbb{N} : x_n = 0 \quad \forall n \geq N\}$ der Raum der abbrechenden Folgen versehen mit der Norm $\|x\|_{\ell^1} := \sum_{n=1}^{\infty} |x_n|$. Dann ist $T : \ell_0 \rightarrow \ell_0$ mit $x \mapsto Tx = (x_1, 2x_2, 3x_3, \dots)$ unbeschränkt, da $\|Te_n\| = n$, aber $\|e_n\| = 1$.

3.20 Satz. Fortsetzung einer dicht definierten linearen beschränkten Abbildung

Sei $Z \subset X$ ein dichter Unterraum eines normierten Raumes X und Y ein Banachraum. Sei weiterhin $L : Z \rightarrow Y$ linear und beschränkt. Dann besitzt L eine eindeutige lineare beschränkte Fortsetzung $\tilde{L} \in \mathcal{L}(X, Y)$ mit $\tilde{L}|_Z = L$ und

$$\|\tilde{L}\|_{\mathcal{L}(X, Y)} = \|L\|_{\mathcal{L}(Z, Y)}.$$

Beweis. Sei $x \in X$, dann gibt es nach Voraussetzung eine Folge (z_n) in Z mit $\|z_n - x\|_X \rightarrow 0$. Da (z_n) konvergiert, ist die Folge insbesondere Cauchy und wegen $\|Lz_n - Lz_m\|_Y = \|L(z_n - z_m)\|_Y \leq \|L\| \|z_n - z_m\|_X$, ist dann auch (Lz_n) eine Cauchyfolge in Y . Da Y vollständig ist, konvergiert $Lz_n \rightarrow y \in Y$. Dabei hängt y nicht von der Wahl der Folge (z_n) ab, denn sei (z'_n) eine andere Folge in Z mit $\|z'_n - x\|_X \rightarrow 0$, dann konvergiert auch die Folge $z_1, z'_1, z_2, z'_2, \dots$ gegen x und mit obigem Argument $Lz_1, Lz'_1, Lz_2, Lz'_2, \dots$ gegen $\tilde{y} \in Y$. Da aber jede Teilfolge einer konvergenten Folge gegen den gleichen Grenzwert konvergiert, gilt $y = \lim Lz_n = \lim Lz'_n = \tilde{y}$. Damit können wir $\tilde{L}x := y$ definieren. Die Linearität von \tilde{L} ist klar aus der Konstruktion. Die Beschränktheit folgt aus

$$\|\tilde{L}x\|_Y = \lim_{n \rightarrow \infty} \|Lz_n\|_Y \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|L\| \|z_n\|_X = \|L\| \|x\|_X.$$

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

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

Um den Fortsetzungssatz auf die Fouriertransformation anzuwenden, zitieren wir folgendes Ergebnis aus der Integrationstheorie.

3.21 Satz. $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ liegt dicht in $L^p(\mathbb{R}^d)$ für $1 \leq p < \infty$.

3.22 Satz. Die Fouriertransformation auf L^2

Die Fouriertransformation $\mathcal{F} : (\mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \|\cdot\|_{L^2}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ lässt sich eindeutig zu einem linearen beschränkten Operator auf L^2 fortsetzen.

Weiterhin gilt für $f \in L^2$, dass $\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2}$ und $\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = \mathcal{F}^{-1}\mathcal{F} = \text{id}_{L^2}$.

Beweis. Mit Satz 3.21 liegt auch \mathcal{S} dicht in L^2 . Damit folgt die erste Aussage aus Satz 3.20. Außerdem ist

$$\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}|_{\mathcal{S}} = \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}|_{\mathcal{S}} = \text{id}_{L^2}|_{\mathcal{S}}$$

bekannt. Da alle Abbildungen stetig sind, gilt die Gleichung auf ganz L^2 . \square

3.23 Definition. Unitärer Operator

Ein linearer beschränkter Operator $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ heißt unitär, falls U surjektiv und isometrisch ist, also $\|U\psi\|_{\mathcal{H}_2} = \|\psi\|_{\mathcal{H}_1}$ für alle $\psi \in \mathcal{H}_1$ erfüllt.

Mit der Polarisationsidentität folgt sofort, dass unitäre Operatoren "Winkel" erhalten, d.h.

$$\langle U\psi, U\varphi \rangle_{\mathcal{H}_2} = \langle \psi, \varphi \rangle_{\mathcal{H}_1} \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in \mathcal{H}_1$$

gilt.

3.24 Bemerkung. Die Fouriertransformation $\mathcal{F} : L^2 \rightarrow L^2$ ist also unitär.

3.25 Bemerkung. Der freie Propagator als unitäre Gruppe

Wir können nun den freien Propagator

$$P_f(t) : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d), \quad P_f(t) = \mathcal{F}^{-1}e^{-i\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F}$$

auf L^2 definieren. Es ist $P_f(t)$ für jedes $t \in \mathbb{R}$ unitär. Außerdem gilt

$$P_f(s)P_f(t) = \mathcal{F}^{-1}e^{-i\frac{k^2}{2}s}\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}e^{-i\frac{k^2}{2}t}\mathcal{F} = \mathcal{F}^{-1}e^{-i\frac{k^2}{2}(s+t)}\mathcal{F} = P_f(s+t).$$

Deshalb nennt man $P_f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(L^2)$ eine unitäre Gruppe.

Es stellt sich nun die Frage, in welchem Sinne

$$\psi(t) := P_f(t)\psi_0$$

für $\psi_0 \in L^2$ die freie Schrödingergleichung löst. Bevor wir die Differenzierbarkeit in t untersuchen, stellen wir fest, dass

$$\psi : \mathbb{R} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d), \quad \psi_0 \mapsto \psi(t) = P_f(t)\psi_0$$

stetig ist, da mit dominierter Konvergenz

$$\|\psi(t) - \psi(t_0)\|_{L^2}^2 = \|(P_f(t) - P_f(t_0))\psi_0\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^d} \left| e^{-i\frac{k^2}{2}t} - e^{-i\frac{k^2}{2}t_0} \right|^2 |\widehat{\psi}_0(k)|^2 dk \xrightarrow{t \rightarrow t_0} 0.$$

Betrachten wir nun den Differenzenquotienten, so legt obige Rechnung nahe, dass $\psi : \mathbb{R} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ genau dann differenzierbar ist, wenn

$$|k|^4 |\widehat{\psi}_0(k)|^2$$

integrierbar ist, also wenn $|k|^2 \widehat{\psi}_0(k) \in L^2$.

Man könnte statt $t \mapsto P_{\mathfrak{f}}(t)\psi_0$ auch gleich die Abbildung $P_{\mathfrak{f}} : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(L^2)$ betrachten. Wegen

$$\|P_{\mathfrak{f}}(t) - P_{\mathfrak{f}}(t_0)\|_{\mathcal{L}(L^2)} = \left\| e^{-i\frac{k^2}{2}t} - e^{-i\frac{k^2}{2}t_0} \right\|_{\mathcal{L}(L^2)} = \sup_{k \in \mathbb{R}^d} \left| e^{-i\frac{k^2}{2}t} - e^{-i\frac{k^2}{2}t_0} \right| = 2$$

ist diese aber nicht stetig. Für die verschiedenen Konvergenzbegriffe führt man nun eigene Bezeichnungen ein.

3.26 Definition. Normkonvergenz, starke und schwache Konvergenz

Sei (A_n) eine Folge in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ und $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

- (a) A_n konvergiert in der Norm (oder uniform) gegen A , falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|A_n - A\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} = 0.$$

Hierfür schreibt man auch $\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$ oder $A_n \rightarrow A$.

- (b) A_n konvergiert stark (oder punktweise) gegen A , falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|A_n\psi - A\psi\|_{\mathcal{H}} = 0 \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H}.$$

Hierfür schreibt man auch $s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$ oder $A_n \xrightarrow{s} A$.

- (c) A_n konvergiert schwach gegen A , falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\langle \varphi, (A_n - A)\psi \rangle| = 0 \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in \mathcal{H}.$$

Hierfür schreibt man auch $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$ oder $A_n \xrightarrow{w} A$.

3.27 Bemerkung. Es gelten die folgenden Implikationen für die Konvergenz von Operatorfolgen:

$$\text{Normkonvergenz} \Rightarrow \text{starke Konvergenz} \Rightarrow \text{schwache Konvergenz}.$$

Die umgekehrten Implikationen gelten im Allgemeinen nicht, vgl. Übungen.

3.2 Unitäre Gruppen und ihre Erzeuger

In welchem Sinne löst nun $\psi(t) = P_{\mathfrak{f}}(t)\psi_0$ für $\psi_0 \in L^2$ die freie Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = -\frac{1}{2} \Delta \psi(t) ?$$

Einerseits ist $\psi(t)$ stark-differenzierbar, wenn $|k|^2 \widehat{\psi}(t) \in L^2$ ist. Andererseits ist die distributionelle Ableitung

$$-\frac{1}{2} \Delta \psi(t) = \mathcal{F}^{-1} \frac{|k|^2}{2} \widehat{\psi}(t)$$

genau dann wieder in L^2 , wenn $|k|^2 \widehat{\psi}(t) \in L^2$ ist. Schließlich gilt

$$|k|^2 \widehat{\psi}(t) = |k|^2 e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \widehat{\psi}_0 \in L^2$$

genau dann, wenn $|k|^2 \widehat{\psi}_0 \in L^2$.

Es passt also alles zusammen: wenn für die Anfangsdaten gilt $|k|^2 \widehat{\psi}_0 \in L^2$, dann gilt für alle Zeiten $|k|^2 \widehat{\psi}(t) \in L^2$ und $\psi(t)$ löst die freie Schrödingergleichung im L^2 -Sinne.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.28 Definition. Sobolevraum

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

$$(1 + |k|^2)^{\frac{m}{2}} \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^d)$$

gilt. Für $m \geq 0$ ist $H^m \subset L^2$.

3.29 Bemerkung. Wir fassen nochmals unsere Beobachtungen zusammen: Der freie Propagator, gegeben durch

$$P_f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(L^2), \quad t \mapsto P_f(t) = \mathcal{F}^{-1} e^{-i\frac{k^2}{2}t} \mathcal{F}$$

erfüllt:

- (a) $P_f(t)$ ist für alle $t \in \mathbb{R}$ unitär.
- (b) P_f ist stark stetig, d.h. $t \mapsto P_f(t)\psi$ ist für alle $\psi \in L^2$ stetig.
- (c) P_f ist ein Gruppenhomomorphismus, d.h. $P_f(s)P_f(t) = P_f(s+t)$ für alle $s, t \in \mathbb{R}$.

Weiterhin gilt im Hinblick auf die freie Schrödingergleichung

- (d) Für $\psi_0 \in L^2$ ist $\psi(t) = P_f(t)\psi_0$ eine Lösung im distributionellen Sinne.
- (e) Für $\psi_0 \in H^2 \subset L^2$ ist $\psi(t) = P_f(t)\psi_0$ sogar eine Lösung im L^2 -Sinne, d.h. die Abbildung $\mathbb{R} \rightarrow L^2, t \mapsto \psi(t)$, ist differenzierbar und die Ableitung erfüllt

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

wobei auch $-\frac{1}{2} \Delta \psi(t) \in L^2$ gilt.

Die Punkte (a)–(c) geben Anlaß zu folgender Definition.

3.30 Definition. Stark stetige unitäre einparametrische Gruppe

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

- (i) $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}), t \mapsto U(t)$ ist stark stetig.
- (ii) $U(t+s) = U(t)U(s)$ für alle $t, s \in \mathbb{R}$ und somit insbesondere $U(0) = \text{id}_{\mathcal{H}}$.

Die Punkte (d)–(e) motivieren weiterhin:

3.31 Definition. Erzeuger einer unitären Gruppe

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

- (i) $D(H) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid t \mapsto U(t)\psi \text{ ist differenzierbar}\}$.
- (ii) Für $\psi \in D(H)$ gilt $i \frac{d}{dt} U(t)\psi = U(t)H\psi$.

3.32 Beispiel. Der freie Hamiltonoperator

Der freie Hamilton-Operator

$$H_0 = -\frac{1}{2} \Delta \quad \text{mit} \quad D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d)$$

ist also der Erzeuger der unitären Gruppe $P_f(t)$.

3.33 Proposition. Eigenschaften des Erzeugers

Sei H ein Erzeuger von $U(t)$. Dann gilt:

- (i) $D(H)$ ist invariant unter $U(t)$, d.h. $U(t)D(H) = D(H)$ für alle $t \in \mathbb{R}$.

(ii) H vertauscht mit $U(t)$, d.h.

$$[H, U(t)]\psi := HU(t)\psi - U(t)H\psi = 0 \quad \text{für alle } \psi \in D(H).$$

(iii) H ist symmetrisch, d.h.

$$\langle H\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, H\varphi \rangle \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in D(H).$$

(iv) U ist eindeutig bestimmt durch H .

(v) H ist eindeutig bestimmt durch U .

Beweis. (i) Es ist $s \mapsto U(s)U(t)\psi = U(s+t)\psi$ genau dann differenzierbar, wenn $s \mapsto U(s)\psi = U(-t)U(s+t)\psi$ differenzierbar ist.

(ii) Für $\psi \in D(H)$ gilt

$$U(t)H\psi = U(t)i \frac{d}{ds} U(s)\psi \Big|_{s=0} = i \frac{d}{ds} U(t)U(s)\psi \Big|_{s=0} = i \frac{d}{ds} U(s) \underbrace{U(t)\psi}_{\in D(H)} \Big|_{s=0} = HU(t)\psi.$$

(iii) Dies folgt direkt aus der Unitarität, da für $\varphi, \psi \in D(H)$

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

(iv) Angenommen $\tilde{U}(t)$ wird ebenfalls von H erzeugt. Dann ist wegen der Symmetrie von H

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\| (U(t) - \tilde{U}(t))\psi \right\|^2 &= 2 \frac{d}{dt} \left(\|\psi\|^2 - \operatorname{Re} \langle U(t)\psi, \tilde{U}(t)\psi \rangle \right) \\ &= -2 \operatorname{Re} \left(\langle -iHU(t)\psi, \tilde{U}(t)\psi \rangle + \langle U(t)\psi, -iH\tilde{U}(t)\psi \rangle \right) \\ &= -2 \operatorname{Re} \left(i \langle HU(t)\psi, \tilde{U}(t)\psi \rangle - i \langle U(t)\psi, H\tilde{U}(t)\psi \rangle \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

für alle $\psi \in D(H)$. Da $(U(0) - \tilde{U}(0))\psi = 0$, folgt $\tilde{U}|_{D(H)} = U|_{D(H)}$ und wegen $\overline{D(H)} = \mathcal{H}$ schließlich $U = \tilde{U}$ auf ganz \mathcal{H} .

(v) Dies ist offensichtlich aus der Definition von H . □

3.34 Beispiele. Translationen als unitäre Gruppe auf L^2

(a) Sei $T(t) : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ mit $\psi \mapsto (T(t)\psi)(x) := \psi(x-t)$ die Gruppe der Translationen. Es ist $T(t)$ eine stark stetige unitäre Gruppe, die von $D_0 = -i \frac{d}{dx}$ mit $D(D_0) = H^1(\mathbb{R})$ erzeugt wird. (Übungsaufgabe)

(b) Um Translationen auf $L^2([0, 1])$ als unitäre Gruppe zu definieren, muss die „Masse“, die auf einer Seite herausgeschoben wird, auf der anderen Seite wieder dazukommen. Wir definieren für $0 \leq t < 1$ und $\theta \in [0, 2\pi)$ also

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

Was „rechts rausgeschoben“ wird, kommt „links bis auf den Phasenfaktor $e^{i\theta}$ wieder rein“. Somit ist $T_\theta(t)$ unitär und für alle $t \in \mathbb{R}$ durch die Gruppeneigenschaft eindeutig bestimmt. Für $\theta \neq \theta'$ gilt dann aber $T_\theta(t) \neq T_{\theta'}(t)$ für $t \neq 0$, die Gruppen zu verschiedenen θ sind also

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

verschieden. Nach Proposition 3.33(iv) müssen diese Gruppen dann aber auch verschiedene Erzeuger haben.

Da innerhalb von $(0, 1)$ alle Gruppen T_θ einfach nur verschieben, sollte der Erzeuger für alle θ immernoch $-i\frac{d}{dx}$ sein. Wie kann das sein, wenn die Erzeuger doch verschieden sein müssen? Der Unterschied liegt im Definitionsbereich, welcher jetzt von θ abhängt!

Es sei $D_\theta = -i\frac{d}{dx}$ der Operator mit Definitionsbereich

$$D(D_\theta) = \{\psi \in H^1([0, 1]) \mid e^{i\theta}\psi(1) = \psi(0)\}.$$

Dann ist tatsächlich $D(D_\theta)$ unter $T_\theta(t)$ invariant und D_θ ist Erzeuger von T_θ .

Hier ist $H^1([0, 1])$ ein lokaler Sobolevraum, definiert durch

$$H^1([0, 1]) := \{\psi \in L^2([0, 1]) \mid \text{es gibt ein } \varphi \in H^1(\mathbb{R}) \text{ mit } \varphi|_{[0, 1]} = \psi\}.$$

Da, wie wir in Lemma 3.37 zeigen werden, $H^1(\mathbb{R}) \subset C(\mathbb{R})$ ist, macht die Punktauswertung in der Definition von $D(D_\theta)$ Sinn.

3.35 Bemerkung. zum Definitionsbereich von $-i\frac{d}{dx}$ auf $L^2([0, 1])$

Der Definitionsbereich von $-i\frac{d}{dx}$ darf im Beispiel mit $\mathcal{H} = L^2([0, 1])$ weder zu groß noch zu klein gewählt werden: Der Operator $-i\frac{d}{dx}$ ausgestattet mit dem maximalen Definitionsbereich $D_{\max} = H^1([0, 1])$ erzeugt keine unitäre Gruppe, da H^1 unter keinem T_θ invariant ist. Wählt man den Definitionsbereich aber zu klein, z.B. $D_{\min} := \{\psi \in H^1([0, 1]) \mid \psi(0) = \psi(1) = 0\}$, so erhält man ebenfalls keinen Erzeuger, da D_{\min} wieder unter keiner der Gruppen T_θ invariant ist.

Da D_{\min} für alle $\theta \in [0, 2\pi)$ in D_θ enthalten ist, können wir $-i\frac{d}{dx}$ auf D_{\min} auch nicht eindeutig zu einem Erzeuger fortsetzen.

3.36 Bemerkung. zur Symmetrie von $-i\frac{d}{dx}$ auf $L^2([0, 1])$

Für $\varphi, \psi \in H^1([0, 1])$ gilt

$$\begin{aligned} \langle \psi, -i\frac{d}{dx}\varphi \rangle &= \int_0^1 \overline{\psi}(x) (-i\frac{d}{dx}\varphi(x)) dx = -i(\overline{\psi}(1)\varphi(1) - \overline{\psi}(0)\varphi(0)) + \int_0^1 \overline{(-i\frac{d}{dx}\psi(x))}\varphi(x) dx \\ &= -i(\overline{\psi}(1)\varphi(1) - \overline{\psi}(0)\varphi(0)) + \langle -i\frac{d}{dx}\psi, \varphi \rangle. \end{aligned}$$

Also ist $-i\frac{d}{dx}$ auf dem zu großen Definitionsbereich D_{\max} nicht symmetrisch und wieder sehen wir, dass $-i\frac{d}{dx}$ auf D_{\max} kein Erzeuger sein kann.

Auf D_θ und auf D_{\min} ist $-i\frac{d}{dx}$ symmetrisch, da die Randterme wegen der Randbedingungen verschwinden. Aber nur auf D_θ ist $-i\frac{d}{dx}$ tatsächlich Erzeuger.

Die Symmetrie ist also eine notwendige aber keine hinreichende Bedingung dafür, Erzeuger einer unitären Gruppe zu sein.

Bevor wir uns im nächsten Abschnitt mit der Frage befassen, wie sich die Erzeuger unitärer Gruppen genau charakterisieren lassen, tragen wir noch das folgende Resultat zur Regularität von Funktionen in Sobolevräumen nach.

3.37 Lemma. von Sobolev

Sei $\ell \in \mathbb{N}_0$ und $f \in H^m(\mathbb{R}^d)$ mit $m > \ell + \frac{d}{2}$. Dann ist $f \in C^\ell(\mathbb{R}^d)$ und $\partial^\alpha f \in C_\infty(\mathbb{R}^d)$ für alle $|\alpha| \leq \ell$.

Beweis. Wir werden zeigen, dass $k^\alpha \hat{f}(k) \in L^1(\mathbb{R}^d)$ ist für alle $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ mit $|\alpha| \leq \ell$. Mit dem Lemma von Riemann-Lebesgue, Satz 2.3, erhalten wir dann, dass $\partial^\alpha f \in C_\infty(\mathbb{R}^d)$ ist.

Nach Definition von H^m ist $(1 + |k|^2)^{\frac{m}{2}} \hat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^d)$ und somit für jedes $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ mit $|\alpha| \leq \ell$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |k^\alpha \hat{f}(k)| \, dk &\leq \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |k|^2)^{\frac{\ell}{2}} |\hat{f}(k)| \, dk \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |k|^2)^{\frac{m}{2}} |\hat{f}(k)| (1 + |k|^2)^{\frac{\ell-m}{2}} \, dk \\ &\leq \|(1 + |k|^2)^{\frac{m}{2}} \hat{f}(k)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \left(\int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{(1 + |k|^2)^{m-\ell}} \, dk \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt die Cauchy-Schwarz Ungleichung verwendet haben. Das letzte Integral ist aber genau dann endlich, wenn $2(m - \ell) > d$ ist. \square

3.3 Selbstdjungierte Operatoren

3.38 Erinnerung. Der adjungierter Operator auf normierten Räumen

Seien V und W normierte Räume und $A \in \mathcal{L}(V, W)$. Dann sind die Dualräume V' und W' Banachräume und man definiert den adjungierten Operator $A' : W' \rightarrow V'$ für $w' \in W'$ durch

$$(A'w')(v) := w'(Av) \quad \text{für alle } v \in V.$$

Offensichtlich ist $A' \in \mathcal{L}(W', V')$ und aus dem Satz von Hahn-Banach folgt $\|A'\| = \|A\|$.

Für Hilberträume gilt $\mathcal{H}' \cong \mathcal{H}$, weshalb für $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ dann $A' \in \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ auch wieder als Operator in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ aufgefasst werden kann. Das wollen wir jetzt genauer erklären.

3.39 Satz. Riesz'scher Darstellungssatz

Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $T \in \mathcal{H}'$. Dann existiert ein eindeutiges $\psi_T \in \mathcal{H}$ so, dass

$$T(\varphi) = \langle \psi_T, \varphi \rangle_{\mathcal{H}} \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{H}.$$

Beweis. Sei $T \in \mathcal{H}'$. Da wir zeigen wollen, dass T die "Projektion" auf einen Vektor ψ_T ist, betrachten wir den Kern von T , $M := \text{Kern}(T)$, welcher das orthogonale Komplement von ψ_T sein sollte. Da T stetig ist, ist M sicherlich abgeschlossen. Falls $M = \mathcal{H}$ ist, ist $T = 0$ und $\psi_T = 0$ liefert den gewünschten eindeutigen Vektor.

Sei also $M \neq \mathcal{H}$. Dann ist die Aussage des Satzes im wesentlichen, dass M^\perp eindimensional ist. Um das zu sehen wähle $\psi_0, \psi_1 \in M^\perp \setminus \{0\}$. Dann gilt für $\alpha := \frac{T(\psi_0)}{T(\psi_1)}$, dass

$$T(\psi_0 - \alpha\psi_1) = T(\psi_0) - \alpha T(\psi_1) = 0$$

also

$$\psi_0 - \alpha\psi_1 \in M \cap M^\perp = \{0\}$$

und somit $\psi_0 = \alpha\psi_1$. Mit dem Projektionssatz lässt sich nun jedes $\varphi \in \mathcal{H}$ eindeutig als

$$\varphi = \varphi_M + \varphi_{M^\perp} = \varphi_M + \frac{\langle \psi_0, \varphi \rangle}{\|\psi_0\|^2} \psi_0$$

schreiben. Für $\psi_T := \frac{T(\psi_0)}{\|\psi_0\|^2} \psi_0$ ergibt sich schließlich

$$T(\varphi) = T(\varphi_M + \frac{\langle \psi_0, \varphi \rangle}{\|\psi_0\|^2} \psi_0) = \langle \psi_0, \varphi \rangle \frac{T(\psi_0)}{\|\psi_0\|^2} = \langle \psi_T, \varphi \rangle.$$

Die Eindeutigkeit folgt sofort aus der Definitheit des Skalarprodukts. \square

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.40 Korollar. Selbstdualität des Hilbertraums

Es gibt eine kanonische antilineare Bijektion

$$J : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}', \quad \varphi \mapsto J\varphi := \langle \varphi, \cdot \rangle.$$

Es ist J eine stetige Isometrie.

3.41 Definition. Hilbertraumadjungierte

Sei $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, dann ist der (Hilbertraum-)adjungierte Operator A^* definiert durch

$$A^* = J^{-1}A'J.$$

3.42 Proposition. Für $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ gilt

$$\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle A^*\psi, \varphi \rangle \quad \text{für alle } \psi, \varphi \in \mathcal{H}$$

und A^* ist durch diese Eigenschaft eindeutig bestimmt.

Beweis. Zunächst folgt aus der Definition von A^* , dass

$$\langle \psi, A\varphi \rangle = J\psi(A\varphi) = A'J\psi(\varphi) = JJ^{-1}A'J\psi(\varphi) = JA^*\psi(\varphi) = \langle A^*\psi, \varphi \rangle.$$

Nun ist aber die Abbildung $\varphi \mapsto \langle \psi, A\varphi \rangle$ stetig und linear. Nach Satz 3.39 gibt es also ein eindeutiges $\eta \in \mathcal{H}$ mit $\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle \eta, \varphi \rangle$ für alle $\varphi \in \mathcal{H}$. \square

3.43 Satz. Eigenschaften der Hilbertraumadjungierten

Seien $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und $\lambda \in \mathbb{C}$. Dann gelten

- (a) $(A + B)^* = A^* + B^*$ und $(\lambda A)^* = \bar{\lambda}A^*$
- (b) $(AB)^* = B^*A^*$
- (c) $\|A^*\| = \|A\|$
- (d) $A^{**} = A$
- (e) $\|AA^*\| = \|A^*A\| = \|A\|^2$
- (f) $\text{Kern } A = (\text{Bild } A^*)^\perp$ und $\text{Kern } A^* = (\text{Bild } A)^\perp$

Beweis. (a)–(c) folgen direkt aus der Definition und den entsprechenden Eigenschaften von A' und (d) ist klar wegen

$$\langle \psi, A\varphi \rangle = \langle A^*\psi, \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi, A^*\psi \rangle} = \overline{\langle A^{**}\varphi, \psi \rangle} = \langle \psi, A^{**}\varphi \rangle \quad \text{für alle } \psi, \varphi \in \mathcal{H}.$$

Für (e) folgern wir aus

$$\|A\varphi\|^2 = \langle A\varphi, A\varphi \rangle = \langle \varphi, A^*A\varphi \rangle \leq \|\varphi\|^2 \|A^*A\|,$$

dass

$$\|A\|^2 = \sup_{\|\varphi\|=1} \|A\varphi\|^2 \leq \|A^*A\| \leq \|A^*\| \cdot \|A\| = \|A\|^2.$$

Bleibt (f) zu zeigen:

$$\begin{aligned} \varphi \in \text{Kern } A &\iff A\varphi = 0 \\ &\iff \langle \psi, A\varphi \rangle = 0 \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H} \\ &\iff \langle A^*\psi, \varphi \rangle = 0 \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H} \\ &\iff \varphi \in (\text{Bild } A^*)^\perp. \end{aligned}$$

\square

3.44 Beispiel. Rechts- und Linksshift

Sei $T : \ell^2 \rightarrow \ell^2$ der Rechtsshift, d.h. $(x_1, x_2, \dots) \mapsto (0, x_1, x_2, \dots)$. Wegen

$$\langle x, Ty \rangle = \sum_{j=2}^{\infty} x_j y_{j-1} = \sum_{j=1}^{\infty} x_{j+1} y_j =: \langle T^* x, y \rangle$$

ist T^* der Linksshiftoperator, d.h. $(x_1, \dots) \mapsto (x_2, x_3, \dots)$.

Der Rechtsshift T ist zwar isometrisch, aber nicht surjektiv und somit nicht unitär. Es gilt zwar $T^*T = \text{id}$, aber $TT^* \neq \text{id}$.

3.45 Proposition. $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ist genau dann unitär, wenn $U^* = U^{-1}$ gilt.

Beweis. \Rightarrow : Sei U unitär. Dann gilt wegen

$$\langle U^*U\psi - \psi, \varphi \rangle = \langle U\psi, U\varphi \rangle - \langle \psi, \varphi \rangle = 0 \quad \text{für alle } \psi, \varphi \in \mathcal{H}$$

$U^*U = \text{id}$. Da U surjektiv ist, folgt aus $UU^*U = U$, dass auch $UU^* = \text{id}$. Also ist $U^* = U^{-1}$.

\Leftarrow : Sei umgekehrt $U^* = U^{-1}$. Dann ist U insbesondere surjektiv und es gilt

$$\langle U\varphi, U\psi \rangle = \langle U^*U\varphi, \psi \rangle = \langle U^{-1}U\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle.$$

□

3.46 Definition. Beschränkter selbstdjungierter Operator

$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt selbstdjungiert, falls $A = A^*$ ist.

3.47 Proposition. Für $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ gilt also,

$$A \text{ ist selbstdjungiert} \quad \Leftrightarrow \quad A \text{ ist symmetrisch.}$$

Es sei aber schonmal betont, dass für einen unbeschränkten Operator die Richtung \Leftarrow im allgemeinen nicht gilt.

3.48 Satz. Beschränkte Erzeuger

Sei $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit $H^* = H$. Dann wird durch

$$e^{-iHt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iHt)^n}{n!}$$

eine unitäre Gruppe definiert und ihr Erzeuger ist H mit $D(H) = \mathcal{H}$. Es gilt sogar, dass $\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) : t \mapsto e^{-iHt}$ differenzierbar ist.

3.49 Definition. Unbeschränkter Operator, Erweiterung

- (a) Ein *unbeschränkter Operator* ist ein Tupel $(T, \underline{D(T)})$ aus einem Unterraum $D(T) \subset \mathcal{H}$ und einem linearen Operator $T : D(T) \rightarrow \mathcal{H}$. Falls $\underline{D(T)} = \mathcal{H}$ ist, so heißt T dicht definiert.
- (b) Ein Operator $(S, D(S))$ heißt eine *Erweiterung* von $(T, D(T))$ falls $D(S) \supset D(T)$ und $S|_{D(T)} = T$ ist. Wir schreiben dann $T \subset S$.
- (c) Ein Operator $(T, D(T))$ heißt *symmetrisch*, falls für alle $\varphi, \psi \in D(T)$ gilt

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

3.50 Beispiel. Der freie Hamiltonoperator $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$ auf $D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d)$ ist ein symmetrischer unbeschränkter dicht definierter Operator.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.51 Erinnerung. Wir haben in Proposition 3.33 gesehen, dass ein Erzeuger H einer unitären Gruppe immer symmetrisch ist. Die Rückrichtung gilt im Allgemeinen nicht, was in Bemerkung 3.36 deutlich wurde.

3.52 Motivation. Im Beispiel 3.34(b) hatten wir folgende Situation: wählt man H symmetrisch, aber $D(H)$ zu klein, so gibt es mehrere Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung, die aber alle $D(H)$ verlassen.

Wir wollen uns nun überlegen, warum die Symmetrieeigenschaft die Erzeugereigenschaft noch nicht impliziert, und was genau fehlt. Sei dazu $(H_0, D(H_0))$ symmetrisch und $(H_1, D(H_1))$ eine symmetrische Erweiterung. Angenommen, die Gleichung

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H_1 \psi(t)$$

hat zumindest für kleine Zeiten zum Anfangswert $\psi(0) \in D(H_0)$ eine Lösung $\psi(t)$ die nicht notwendigerweise in $D(H_0)$ bleibt, aber zumindest in $D(H_1)$. Wir fragen uns, wo $\psi(t)$ hinläuft, wenn es $D(H_0)$ verlässt. Für $\varphi \in D(H_0) \subset D(H_1)$ gilt

$$\langle H_1 \psi(t), \varphi \rangle = \langle \psi(t), H_1 \varphi \rangle = \langle \psi(t), H_0 \varphi \rangle.$$

Somit bleibt $\psi(t)$ wenn schon nicht in $D(H_0)$, dann doch zumindest noch in der Domäne des adjungierten Operators H_0^* , den wir entsprechend definieren.

3.53 Definition. Der adjungierte Operator

Sei T ein dicht definierter linearer Operator auf einem Hilbertraum \mathcal{H} . Dann ist der Definitionsbereich $D(T^*)$ des adjungierten Operators T^*

$$D(T^*) := \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \text{es gibt ein } \eta \in \mathcal{H} \text{ mit } \langle \psi, T\varphi \rangle = \langle \eta, \varphi \rangle \text{ für alle } \varphi \in D(T) \}.$$

Da $D(T)$ dicht liegt, ist η eindeutig bestimmt und wir definieren für $\psi \in D(T^*)$

$$T^* : D(T^*) \rightarrow \mathcal{H}, \quad \psi \mapsto T^* \psi := \eta.$$

3.54 Bemerkung. Mit Satz 3.39 hätten wir auch äquivalent

$$D(T^*) = \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \varphi \mapsto \langle \psi, T\varphi \rangle \text{ ist stetig auf } D(T) \}$$

definieren können.

3.55 Proposition. $(T^*, D(T^*))$ ist ein linearer (nicht notwendigerweise dicht definierter) Operator und es gilt

$$\langle \psi, T\varphi \rangle = \langle T^* \psi, \varphi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in D(T^*) \text{ und } \varphi \in D(T).$$

3.56 Definition. Selbstadjungierter Operator

Sei $(T, D(T))$ ein dicht definierter linearer Operator. Falls $D(T^*) = D(T)$ ist und auf $D(T)$ gilt, dass $T^* = T$, so heißt $(T, D(T))$ *selbstadjungiert*.

3.57 Beispiel. Wir führen unser einfaches Beispiel 3.34(b) fort.

(a) Wir betrachten zunächst $D_{\min} = -i \frac{d}{dx}$ mit

$$D(D_{\min}) = \{ \varphi \in H^1([0, 1]) \mid \varphi(0) = \varphi(1) = 0 \}.$$

Für $\varphi \in D(D_{\min})$ ist

$$\langle \psi, D_{\min} \varphi \rangle = \int_0^1 \overline{\psi(x)} \left(-i \frac{d}{dx} \varphi(x) \right) dx = \int_0^1 \overline{\left(-i \frac{d}{dx} \psi(x) \right)} \varphi(x) dx = \underbrace{\langle -i \frac{d}{dx} \psi, \varphi \rangle}_{= \eta},$$

vorausgesetzt, dass $\frac{d}{dx} \psi \in L^2([0, 1])$ ist, also $\psi \in H^1([0, 1])$ gilt. Also ist $D(D_{\min}^*) = H^1([0, 1]) \supsetneq D(D_{\min})$ und D_{\min} ist nicht selbstadjungiert.

(b) Für $D_\theta = -i\frac{d}{dx}$ mit

$$D(D_\theta) = \{\varphi \in H^1([0, 1]) \mid e^{i\theta}\varphi(1) = \varphi(0)\}$$

ist für $\varphi \in D(D_\theta)$

$$\begin{aligned} \langle \psi, D_\theta \varphi \rangle &= \int_0^1 \overline{\psi}(x) \left(-i\frac{d}{dx}\varphi(x)\right) dx \\ &= i(\overline{\psi}(0)\varphi(0) - \overline{\psi}(1)\varphi(1)) + \int_0^1 \overline{\left(-i\frac{d}{dx}\psi(x)\right)}\varphi(x) dx = \underbrace{\langle -i\frac{d}{dx}\psi, \varphi \rangle}_{= \eta}, \end{aligned}$$

vorausgesetzt, dass $\psi \in H^1([0, 1])$ **und**, dass

$$\overline{\psi}(0)\varphi(0) - \overline{\psi}(1)\varphi(1) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\overline{\psi}(0)}{\overline{\psi}(1)} = \frac{\varphi(1)}{\varphi(0)} = e^{-i\theta}.$$

Es ist somit $D(D_\theta^*) = D(D_\theta)$ und $D_\theta^* = -i\frac{d}{dx} = D_\theta$. Also ist D_θ selbstadjungiert.

3.58 Satz. Erzeuger unitärer Gruppen

Ein dicht definierter Operator $(H, D(H))$ ist genau dann Erzeuger einer unitären Gruppe

$$U(t) = e^{-iHt},$$

wenn H selbstadjungiert ist.

3.59 Bemerkung. Aus dem *Spektralsatz* wird folgen, dass jeder selbstadjungierte Operator eine unitäre Gruppe erzeugt. Die Aussage, dass jede unitäre Gruppe einen selbstadjungierten Erzeuger hat, heißt der *Satz von Stone*. Beides werden wir im nächsten Kapitel beweisen, und der vorgehende Satz ist dann eine offensichtliche Konsequenz daraus.

Für den Moment wollen wir das Resultat so akzeptieren und uns überlegen, was es für die Lösungstheorie der Schrödingergleichung bedeutet. Genauer wollen wir Kriterien für Selbstadjungiertheit entwickeln und auf Operatoren vom Typ des Schrödingeroperators $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ anwenden.

3.60 Definition. Direkte Summe von Hilberträumen

Seien \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 zwei Hilberträume. Dann ist die direkte Summe, definiert durch

$$\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 := \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle \varphi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2} := \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle_{\mathcal{H}_1} + \langle \varphi_2, \psi_2 \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

wieder ein Hilbertraum.

3.61 Definition. Graph eines Operators, abgeschlossener Operator, Abschluss

(a) Der *Graph* eines linearen Operators $T : D(T) \rightarrow \mathcal{H}$ ist der Unterraum

$$\Gamma(T) = \{(\varphi, T\varphi) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \mid \varphi \in D(T)\} \subset \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}.$$

(b) Eine Operator T heißt *abgeschlossen*, wenn $\Gamma(T)$ ein abgeschlossener Teilraum von $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ ist.

(c) Ein Operator T heißt *abschließbar*, falls er eine abgeschlossene Erweiterung besitzt. In diesem Fall heißt die kleinste abgeschlossene Erweiterung \overline{T} der *Abschluss* von T und es ist leicht zu sehen, dass

$$\Gamma(\overline{T}) = \overline{\Gamma(T)}$$

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.62 Bemerkung. Ein Operator T ist also abgeschlossen, falls für jede Folge (φ_n) in $D(T)$ gilt, dass aus $\varphi_n \rightarrow \varphi$ und $T\varphi_n \rightarrow \eta$ folgt, dass $(\varphi, \eta) \in \Gamma(T)$ ist, also $\varphi \in D(T)$ und $T\varphi = \eta$.

3.63 Satz. Der adjungierte Operator ist immer abgeschlossen

Sei $(T, D(T))$ dicht definiert, dann ist T^* abgeschlossen.

Beweis. Es ist zu zeigen, dass $\Gamma(T^*)$ ein abgeschlossener Unterraum von $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ ist. Dazu stellen wir zunächst fest, dass

$$\begin{aligned} (\psi, \eta) \in \Gamma(T^*) &\iff \langle \psi, T\varphi \rangle = \langle \eta, \varphi \rangle \quad \text{für alle } \varphi \in D(T) \\ &\iff \langle \psi, T\varphi \rangle - \langle \eta, \varphi \rangle = 0 \quad \text{für alle } \varphi \in D(T) \\ &\iff \langle (\psi, \eta), (-T\varphi, \varphi) \rangle_{\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}} = 0 \quad \text{für alle } \varphi \in D(T). \end{aligned}$$

Führen wir die unitäre Abbildung

$$W : \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} : (\varphi_1, \varphi_2) \mapsto (-\varphi_2, \varphi_1)$$

ein, so können wir das in der Form

$$(\psi, \eta) \in \Gamma(T^*) \iff \langle (\psi, \eta), \phi \rangle_{\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}} = 0 \quad \text{für alle } \phi \in W(\Gamma(T))$$

schreiben. Also ist $\Gamma(T^*) = (W(\Gamma(T)))^\perp$. Da orthogonale Komplemente abgeschlossen sind, ist $\Gamma(T^*)$ abgeschlossen und damit T^* ein abgeschlossener Operator. \square

3.64 Proposition. Symmetrische Operatoren werden durch die Adjungierte fortgesetzt

Ein dicht definierter Operator T ist genau dann symmetrisch, wenn $T \subset T^*$ gilt, also wenn die Adjungierte den Operator fortsetzt.

Beweis. Wenn T symmetrisch ist, gilt $D(T) \subset D(T^*)$, da für $\psi \in D(T)$ dann $\eta = T\psi =: T^*\psi$ gewählt werden kann. Ist umgekehrt $T \subset T^*$, so gilt für $\psi \in D(T) \subset D(T^*)$ ja $\langle \psi, T\varphi \rangle = \langle T^*\psi, \varphi \rangle = \langle T\psi, \varphi \rangle$ für alle $\varphi \in D(T)$. \square

3.65 Korollar. Symmetrische Operatoren sind abschließbar

Da für symmetrische Operatoren $T \subset T^*$ gilt und T^* abgeschlossen ist, sind symmetrische Operatoren immer abschließbar.

3.66 Bemerkung. Für symmetrisches T muss nicht gelten, dass $\overline{T} = T^*$. Denn mit T ist auch \overline{T} symmetrisch (Übungsaufgabe), T^* in der Regel aber nicht.

3.67 Proposition. Sei T dicht definiert und $T \subset S$, dann gilt $S^* \subset T^*$.

Beweis. Mit der Notation aus dem Beweis von Satz 3.63 ist $\Gamma(S^*) = (W\Gamma(S))^\perp$. Weiter ist wegen $T \subset S$, also $\Gamma(T) \subset \Gamma(S)$, dann auch $W\Gamma(T) \subset W\Gamma(S)$ und somit

$$\Gamma(S^*) = (W\Gamma(S))^\perp \subset (W\Gamma(T))^\perp = \Gamma(T^*).$$

\square

3.68 Proposition. Sei T dicht definiert und abschließbar. Dann ist auch T^* dicht definiert.

Beweis. Wir zeigen, dass $D(T^*)$ dicht liegt, indem wir $D(T^*)^\perp = 0$ zeigen. Sei also $\eta \in D(T^*)^\perp$, dann ist

$$(\eta, 0) \in \Gamma(T^*)^\perp = (W\Gamma(T))^{\perp\perp} = \overline{W\Gamma(T)}.$$

Da $W\Gamma(T) = \{(-T\varphi, \varphi) \mid \varphi \in D(T)\}$, gibt es eine Folge (φ_n) in $D(T)$ mit $\varphi_n \rightarrow 0$ so, dass $-T\varphi_n \rightarrow \eta$. Da T abschließbar ist, gilt aber $\overline{T}0 = \eta = 0$. \square

3.69 Proposition. Sei T dicht definiert und abschließbar, dann gilt

- (a) $T^{**} = \overline{T}$
- (b) $(\overline{T})^* = T^* = T^{***}$.

Beweis. Da W unitär ist, gilt für beliebige Teilräume $M \subset \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$, dass $W(M^\perp) = (W(M))^\perp$.

- (a) Wir wissen bereits, dass $\Gamma(T^*) = (W\Gamma(T))^\perp$. Für T^* statt T liefert uns das

$$\Gamma(T^{**}) = (W\Gamma(T^*))^\perp = \left(W \left((W\Gamma(T))^\perp \right) \right)^\perp = W \circ W(\Gamma(T)^{\perp\perp}) = -\overline{\Gamma(T)} = -\Gamma(\overline{T}) = \Gamma(\overline{T}).$$

- (b) Mit der ersten Gleichheit ergibt sich $\overline{T}^* = T^{***}$. Weiterhin ist

$$\Gamma(\overline{T}^*) = (W\Gamma(\overline{T}))^\perp = \overline{W\Gamma(T)}^\perp = (W\Gamma(T))^\perp = \Gamma(T^*).$$

□

3.70 Korollar. Abschluss und Adjungierte symmetrischer Operatoren

Sei T dicht definiert und symmetrisch. Dann ist T abschließbar und T^* ist dicht definiert. Weiter gelten die folgenden Aussagen:

- (a) $T \subset \overline{T} = T^{**} \subset T^* = T^{***}$. Insbesondere ist auch T^{**} symmetrisch.
- (b) $(\overline{T})^* = T^*$

Beweis. Ergibt sich aus den vorangegangenen Propositionen. □

3.71 Definition. Wesentlich selbstadjungierter Operator

Ein symmetrischer dicht definierter Operator heißt *wesentlich selbstadjungiert*, falls sein Abschluss selbstadjungiert ist.

3.72 Korollar. Ein symmetrischer, dicht definierter Operator T ist genau dann wesentlich selbstadjungiert, wenn T^* symmetrisch ist. In diesem Fall ist $\overline{T} = T^*$ und \overline{T} ist die einzige selbstadjungierte Erweiterung von T .

Beweis. Nach Korollar 3.70 ist $\overline{T} \subset T^*$ und $T^* = T^{***}$ und $\overline{T} = T^{**}$. Angenommen auch T^* ist symmetrisch dann liefert Korollar 3.70 (a) angewandt auf T^* dass $T^{***} \subset T^{**}$ und somit $T^* \subset \overline{T}$. Insgesamt ergibt sich also $\overline{T} = T^* = (\overline{T})^*$.

Sei nun andererseits T wesentlich selbstadjungiert, dann ist mit \overline{T} auch T^* symmetrisch, da $T^* = (\overline{T})^* = \overline{T}$.

Um zu sehen, dass \overline{T} die einzige selbstadjungierte Erweiterung von T ist, sei S eine weitere solche. Aus $T \subset S$ folgt $\overline{T} \subset \overline{S} = S$ (da S ja als s.a. Operator abgeschlossen ist). Andererseits folgt mit Proposition 3.67, dass $S = S^* \subset T^* = \overline{T}$, also insgesamt $S = \overline{T}$. □

3.73 Definition. Determinierender Bereich und Graphennorm

Sei $(T, D(T))$ selbstadjungiert. Ein Teilraum $D_0 \subset D(T)$, welcher dicht in \mathcal{H} liegt, heißt *determinierender Bereich* (core) für T , falls (T, D_0) wesentlich selbstadjungiert ist, also wenn gilt:

$$\overline{T|_{D_0}} = T.$$

Es ist D_0 also genau dann determinierender Bereich für $(T, D(T))$, wenn D_0 dicht in $D(T)$ liegt bezüglich der Graphennorm

$$\|\varphi\|_T^2 := \|T\varphi\|_{\mathcal{H}}^2 + \|\varphi\|_{\mathcal{H}}^2.$$

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.74 Beispiel. Der Operator $D_{\min} = -i\frac{d}{dx}$ auf $D_{\min} = \{\psi \in H^1([0,1]) \mid \psi(1) = \psi(0) = 0\}$ ist zwar symmetrisch aber nicht wesentlich selbstadjungiert. Wir haben bereits gesehen, dass er viele selbstadjungierte Erweiterungen besitzt.

3.75 Beispiel. Multiplikationsoperatoren

Sei $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ messbar und

$$M_V : D(M_V) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d), \quad f \mapsto (M_V f)(x) := V(x)f(x)$$

der zugehörige Multiplikationsoperator auf

$$D(M_V) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid Vf \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}.$$

Es liegt $D(M_V)$ dicht in L^2 und der adjungierte Operator auf $D(M_V^*) = D(M_V)$ ist gegeben durch

$$(M_V^* f)(x) = \overline{V(x)}f(x).$$

Für reelles V ist M_V also auf der maximalen Domäne $D(M_V)$ selbstadjungiert.

3.76 Lemma. Sei $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ unitär und $(H, D(H))$ auf \mathcal{H}_1 selbstadjungiert. Dann ist $(UHU^*, UD(H))$ selbstadjungiert auf \mathcal{H}_2 .

Beweis. Übungsaufgabe. □

3.77 Beispiel. Der Laplaceoperator auf \mathbb{R}^d

Der Laplaceoperator $H_0 = -\Delta$ ist auf $D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d)$ selbstadjungiert, da $\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^* = |k|^2$ als Multiplikationsoperator auf seiner maximalen Domäne selbstadjungiert ist.

Nun ist jeder Teilraum $X \subset H^2(\mathbb{R}^d)$ welcher dicht liegt bezüglich der Graphennorm von H_0 , also der H^2 -Norm

$$\|\varphi\|_{H^2}^2 := \|\Delta\varphi\|_{L^2}^2 + \|\varphi\|_{L^2}^2,$$

ein determinierender Bereich für H_0 . Also ist z.B. $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ ein determinierender Bereich für den selbstadjungierten Operator $(H_0, H^2(\mathbb{R}^d))$. Andererseits ist $X_0 := C_0^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{0\})$ für $d \leq 3$ **kein** determinierender Bereich für $(H_0, H^2(\mathbb{R}^d))$, da X_0 nicht dicht in $H^2(\mathbb{R}^d)$ liegt (aber in L^2 !). Wir werden sehen, dass der symmetrische dicht definierte Operator (H_0, X_0) viele verschiedene selbstadjungierte Erweiterungen besitzt.

3.78 Satz. Kriterium für Selbstadjungiertheit

Sei $(H, D(H))$ dicht definiert und symmetrisch. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- (i) H ist selbstadjungiert.
- (ii) H ist abgeschlossen und $\text{Kern}(H^* \pm i) = \{0\}$
- (iii) $\text{Bild}(H \pm i) = \mathcal{H}$

Beweis. (i) \Rightarrow (ii): Sei H selbstadjungiert, dann ist $H = H^*$, also ist H abgeschlossen. Seien $\varphi_\pm \in \text{Kern}(H^* \pm i)$, also $H\varphi_\pm = \mp i\varphi_\pm$. Da die Eigenwerte symmetrischer Operatoren immer reell sind, folgt $\varphi_\pm = 0$.

(ii) \Leftrightarrow (iii): Diese Aussage werden wir im Anschluss als Lemma formulieren und beweisen.

(iii) \Rightarrow (i): Da H symmetrisch ist, folgt bereits, dass $H \subset H^*$. Es bleibt also nur noch zu zeigen, dass $D(H^*) \subset D(H)$. Sei dazu $\psi \in D(H^*)$, dann existiert wegen der Annahme $\text{Bild}(H \pm i) = \mathcal{H}$ ein $\varphi \in D(H)$ so, dass $(H^* - i)\psi = (H - i)\varphi$. Wegen $H \subset H^*$ gilt auch

$$(H^* - i)\psi = (H^* - i)\varphi,$$

also $\varphi - \psi \in \text{Kern}(H^* - i)$. Mit dem ersten Teil des nachfolgenden Lemma folgt $\varphi - \psi = 0$, also $\psi = \varphi \in D(H)$, was zu zeigen war. □

3.79 Lemma. Sei $(T, D(T))$ dicht definiert. Dann gilt:

(a) Für alle $z \in \mathbb{C}$ ist $\text{Kern}(T^* \pm z) = \text{Bild}(T \pm \bar{z})^\perp$. Damit gilt insbesondere

$$\text{Kern}(T^* \pm z) = \{0\} \iff \overline{\text{Bild}(T \pm \bar{z})} = \mathcal{H}.$$

(b) Ist T abgeschlossen und symmetrisch, so sind auch die Mengen $\text{Bild}(T \pm i)$ abgeschlossen.

Beweis. Um (a) zu sehen, verwenden wir $(T + z)^* = T^* + \bar{z}$ in

$$\begin{aligned} \psi \in \text{Bild}(T \pm z)^\perp &\iff \langle \psi, (T \pm z)\varphi \rangle = 0 \quad \text{für alle } \varphi \in D(T) \\ &\iff \psi \in D(T^*) \text{ und } (T^* \pm \bar{z})\psi = 0 \\ &\iff \psi \in \text{Kern}(T^* \pm \bar{z}). \end{aligned}$$

Der Übersichtlichkeit halber zeigen wir (b) nur für $+i$. Für symmetrisches T gilt $\langle \psi, T\psi \rangle = \langle T\psi, \psi \rangle = \langle \psi, T\psi \rangle$, also $\langle \psi, T\psi \rangle \in \mathbb{R}$. Daher ist für $\psi \in D(T)$

$$\begin{aligned} \|(T + i)\psi\|^2 &= \langle (T + i)\psi, (T + i)\psi \rangle = \|T\psi\|^2 + \|\psi\|^2 - \underbrace{2\text{Re}\langle \psi, T\psi \rangle}_{=0} \\ &= \|T\psi\|^2 + \|\psi\|^2 \geq \|\psi\|^2. \end{aligned}$$

Also ist $T + i$ injektiv und $(T + i)^{-1}: \text{Bild}(T + i) \rightarrow D(T)$ existiert und ist beschränkt.

Sei nun ψ_n eine Folge in $\text{Bild}(T + i)$ mit $\psi_n \rightarrow \psi$. Dann ist $\varphi_n := (T + i)^{-1}\psi_n$ eine Cauchyfolge und konvergiert gegen ein $\varphi \in \mathcal{H}$. Da T abgeschlossen ist, ist auch der Graph von $T + i$ abgeschlossen. Damit konvergiert die Folge (φ_n, ψ_n) im Graphen von $T + i$ gegen einen Punkt $(\varphi, \psi) = (\varphi, (T + i)\varphi)$ im Graphen, was schließlich $\psi \in \text{Bild}(T + i)$ zeigt. \square

3.80 Korollar. Kriterium für wesentliche Selbstadjungiertheit

Sei H dicht definiert und symmetrisch. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- (i) H ist wesentlich selbstadjungiert.
- (ii) $\text{Kern}(H^* \pm i) = \{0\}$.
- (iii) $\overline{\text{Bild}(H \pm i)} = \mathcal{H}$.

Beweis. (ii) \Leftrightarrow (iii) ist genau die Aussage von Lemma 3.79 und (i) \Leftrightarrow (ii) folgt aus

$$\begin{aligned} H \text{ ist wesentlich selbstadjungiert} &\iff \overline{H} = H^{**} \text{ ist selbstadjungiert} \\ &\iff H^{**} \text{ ist abgeschlossen und } \text{Kern}(H^{***} \pm i) = \{0\} \\ &\iff \text{Kern}(H^* \pm i) = \{0\}. \end{aligned}$$

\square

3.81 Beispiele. (a) Der Operator $D_{\min} = -i\frac{d}{dx}$ auf $D_{\min} = \{\psi \in H^1([0, 1]) \mid \psi(1) = \psi(0) = 0\}$ ist nicht wesentlich selbstadjungiert, da

$$D_{\min}^* \varphi_\pm = -i\frac{d}{dx} \varphi_\pm = \mp i \varphi_\pm$$

die Lösungen $\varphi_\pm = e^{\pm x}$ hat, welche in $D(D_{\min}^*) = H^1([0, 1])$ liegen. Also ist die Dimension von $\text{Kern}(D_{\min}^* \pm i) = 1 \neq 0$ und wir sehen ein weiteres mal, dass dieser Operator nicht wesentlich selbstadjungiert ist.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

(b) Für $H_0 = -\Delta$ auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ ist $D(H_0^*) = H^2(\mathbb{R}^d)$ und

$$H_0^* \varphi_\pm = -\Delta \varphi_\pm = \mp i \varphi_\pm$$

hat keine Lösung in H^2 . Also ist $\text{Kern}(H_0^* \pm i) = \{0\}$ und H_0 ist auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert.

3.82 Definition. Defekträume und Defektindices

Sei $(H, D(H))$ symmetrisch und dicht definiert. Dann heißen die Räume

$$L^\pm := \text{Kern}(H^* \mp i) = \text{Bild}(H \pm i)^\perp$$

die *Defekträume* von H und

$$N^\pm := \dim L^\pm$$

die *Defektindices* von H .

3.83 Bemerkung. Wegen

$$\mathcal{H} = \overline{\text{Bild}(H \pm i)} \oplus L^\pm$$

ist H also genau dann wesentlich selbstadjungiert, wenn $N^+ = N^- = 0$ ist.

Wir zeigen im Folgenden, dass H genau dann selbstadjungierte Erweiterungen hat, wenn die Defektindices gleich sind.

3.84 Definition. Die Cayley-Transformierte

Sei H symmetrisch und dicht definiert. Die *Cayley-Transformierte* von H ist der isometrische und surjektive Operator

$$U := (H - i)(H + i)^{-1} : \text{Bild}(H + i) \rightarrow \text{Bild}(H - i).$$

3.85 Bemerkung. Die behaupteten Eigenschaften der Cayley-Transformierten folgen mit Hilfe der Identität (vgl. Beweis von Lemma 3.79)

$$\|(H + i)\varphi\|^2 = \|H\varphi\|^2 + \|\varphi\|^2 = \|(H - i)\varphi\|^2 \quad \text{für alle } \varphi \in D(H),$$

da

$$\|U\psi\| = \|U(H + i)\varphi\| = \|(H - i)\varphi\| = \|(H + i)\varphi\| = \|\psi\|.$$

3.86 Lemma. Sei H dicht definiert und symmetrisch. Dann besteht eine eins-zu-eins Korrespondenz zwischen den symmetrischen Erweiterungen von H und den isometrischen Erweiterungen von U .

Beweis. Sei (\tilde{H}, \tilde{D}) eine symmetrische Erweiterung von (H, D) und sei weiter \tilde{U} die Cayley-Transformierte von \tilde{H} . Dann gibt es für jedes $\psi \in \text{Bild}(H + i)$ ein $\varphi \in D \subset \tilde{D}$ mit der Eigenschaft, dass $\psi = (H + i)\varphi = (\tilde{H} + i)\varphi$. Also ist $\text{Bild}(H + i) \subset \text{Bild}(\tilde{H} + i)$ und

$$\tilde{U}\psi = (\tilde{H} - i)(\tilde{H} + i)^{-1}\psi = (\tilde{H} - i)\varphi = (H - i)\varphi = (H - i)(H + i)^{-1}\psi = U\psi.$$

Somit ist $U \subset \tilde{U}$ und \tilde{U} ist eine isometrische Erweiterung von U .

Sei nun umgekehrt \tilde{U} eine isometrische Erweiterung von U und $\tilde{U} : M^+ \rightarrow M^-$ mit $\text{Bild}(H \pm i) \subset M^\pm$. Zunächst definieren wir formal die Cayley-Rücktransformierte

$$\tilde{H} = -i(\tilde{U} + 1)(\tilde{U} - 1)^{-1} : \text{Bild}(\tilde{U} - 1) \rightarrow \mathcal{H}.$$

Damit dies überhaupt wohldefiniert ist, müssen wir die Injektivität von $(\tilde{U} - 1)$ zeigen: Da $\tilde{U} : M^+ \rightarrow M^-$ unitär ist, folgt aus $\tilde{U}\psi = \psi$ auch $\tilde{U}^*\psi = \tilde{U}^{-1}\psi = \psi$ und somit für $\varphi \in D(H)$

$$\begin{aligned} -2i\langle \psi, \varphi \rangle &= \langle \psi, (H - i)\varphi - (H + i)\varphi \rangle = \langle \psi, (U - 1)(H + i)\varphi \rangle \\ &= \langle \psi, (\tilde{U} - 1)(H + i)\varphi \rangle = \langle (\tilde{U}^* - 1)\psi, (H + i)\varphi \rangle = 0. \end{aligned}$$

Wegen $\overline{D(H)} = \mathcal{H}$ ist also $\psi = 0$ und $\tilde{U} - 1$ injektiv.

Damit ist \tilde{H} wohldefiniert. Wegen

$$-(\tilde{U} - 1)(H + i)\varphi = -(U - 1)(H + i)\varphi = 2i\varphi$$

für $\varphi \in D(H)$ ist $D(H) \subset \text{Bild}(\tilde{U} - 1) = D(\tilde{H})$ und wegen

$$2i\tilde{H}\varphi = i(\tilde{U} + 1)(H + i)\varphi = i(U + 1)(H + i)\varphi = 2iH\varphi$$

für $\varphi \in D(H)$ ist \tilde{H} eine Erweiterung von H .

Es bleibt die Symmetrie von \tilde{H} zu zeigen. Für $\varphi = (\tilde{U} - 1)\psi \in D(\tilde{H})$ gilt

$$\langle \varphi, \tilde{H}\varphi \rangle = -i\langle (\tilde{U} - 1)\psi, (\tilde{U} + 1)\psi \rangle = -i(\langle \tilde{U}\psi, \psi \rangle - \langle \psi, \tilde{U}\psi \rangle) = -2\text{Im}(\langle \psi, \tilde{U}\psi \rangle) \in \mathbb{R}.$$

Mit dem nachfolgenden Lemma impliziert dies die Symmetrie von \tilde{H} . □

3.87 Lemma. Kriterium für Symmetrie

Sei T ein Operator auf einem komplexen Hilbertraum \mathcal{H} . Dann gilt

$$\langle \varphi, T\varphi \rangle \in \mathbb{R} \quad \text{für alle } \varphi \in D(T) \quad \Rightarrow \quad T \text{ ist symmetrisch.}$$

Beweis. Übungsaufgabe. □

3.88 Bemerkung. Wir haben also gezeigt, dass für symmetrisches und dicht definiertes H die Cayley-Transformierte

$$U = (H - i)(H + i)^{-1} : \text{Bild}(H + i) \rightarrow \text{Bild}(H - i)$$

unitär ist. Weiter haben wir gesehen, dass die Rücktransformation durch

$$H = -i(U + 1)(U - 1)^{-1} : \underbrace{\text{Bild}(U - 1)}_{=D(H)} \rightarrow \text{Bild}(U + 1)$$

gegeben ist. Erweitern wir $U : \text{Bild}(H + i) \rightarrow \text{Bild}(H - i)$ zu einem unitären

$$\tilde{U} : \overline{\text{Bild}(H + i)} \oplus M^+ \rightarrow \overline{\text{Bild}(H - i)} \oplus M^-$$

für geeignete M^+ bzw. M^- , so ist $\tilde{H} = -i(\tilde{U} + 1)(\tilde{U} - 1)^{-1}$ eine symmetrische Erweiterung von H . Der neue Definitionsbereich ist

$$D(\tilde{H}) = \text{Bild}(\tilde{U} - 1) = D(\tilde{H}) \oplus (\tilde{U} - 1)M^+,$$

welchen wir explizit berechnen können, falls wir \tilde{U} explizit kennen.

3.89 Satz. Kriterium für Existenz selbstadjungierter Erweiterungen

Sei H symmetrisch und dicht definiert. Es besitzt H genau dann selbstadjungierte Erweiterungen, wenn die Dimensionen der Defekträume gleich sind, d.h. $N^+ = N^-$.

Es ist H ist genau dann wesentlich selbstadjungiert, wenn $N^+ = N^- = 0$.

Beweis. Wir beweisen zunächst folgendes Lemma.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

3.90 Lemma. H ist genau dann selbstadjungiert, wenn die Cayley-Transformierte unitär ist.

Beweis. Sei H selbstadjungiert. Dann ist $D(U) = \text{Bild}(H + i) = \mathcal{H}$ und $\text{Bild}(U) = \text{Bild}(H - i) = \mathcal{H}$. Also ist U eine auf ganz \mathcal{H} definierte surjektive Isometrie und damit unitär.

Sei umgekehrt U unitär, dann ist $\text{Bild}(H \pm i) = \mathcal{H}$, also ist \mathcal{H} selbstadjungiert. \square

Weiter im Beweis von Satz 3.89. Da $\mathcal{H} = \overline{\text{Bild}(H + i)} \oplus L^+ = \overline{\text{Bild}(H - i)} \oplus L^-$, läßt sich U genau dann zu einem unitären Operator $\tilde{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ fortsetzen, wenn es eine surjektive Isometrie von L^+ nach L^- gibt, also wenn $N^+ = \dim L^+ = \dim L^- = N^-$ ist.

Falls $N^+ = N^- = 0$ ist, so ist die Fortsetzung eindeutig ist, da U eine Isometrie und beschränkt ist. Ist $N^+ = N^- = n > 0$, so sind die verschiedenen Fortsetzungen durch $u \in U(n)$ parametrisiert. \square

3.91 Beispiele. Translationsgruppe auf Intervallen

- (a) Sei $D_{[0,\infty)} = -i \frac{d}{dx}$ auf $L^2([0, \infty))$ mit $D(D_{[0,\infty)}) = C_0^\infty((0, \infty))$. Mit partieller Integration zeigen wir wie in Beispiel 3.57, dass $D_{[0,\infty)}$ symmetrisch ist und $D(D_{[0,\infty)}^*) = H^1([0, \infty))$. Um nun $L^\pm = \text{Kern}(D_{[0,\infty)}^* \mp i)$ zu berechnen, stellen wir zunächst fest, dass die beiden Gleichungen

$$D_{[0,\infty)}^* \varphi_\pm = -i \frac{d}{dx} \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm$$

die Lösungen $\varphi_\pm = e^{\mp x}$ haben. Da φ_+ in der Domäne $D(D_{[0,\infty)}^*)$ des adjungierten Operators liegt, ist der zugehörige Defektraum $L^+ = \text{Span}\{\varphi_+\}$ eindimensional, also $N^+ = 1$. Andererseits ist $\varphi_- \notin L^2([0, \infty))$, also $L^- = \{0\}$ und $N^- = 0$. Somit hat $D_{[0,\infty)}$ keine selbstadjungierte Erweiterung.

Man hätte natürlich auch gleich argumentieren können, dass es auf $L^2([0, \infty))$ keine unitäre Translationsgruppe geben kann.

- (b) Für $D_{\min} = -i \frac{d}{dx}$ auf $L^2([0, 1])$ mit $D(D_{\min}) = C_0^\infty((0, 1))$ sind $\varphi_\pm = e^{\mp x} \in D(D_{\min}^*) = H^1([0, 1])$, also $L^\pm = \text{Span}\{\varphi_\pm\}$ und $N^+ = N^- = 1$. Somit hat D_{\min} selbstadjungierte Erweiterungen, die durch $U(1)$, also durch Multiplikation mit $e^{i\alpha}$ parametrisiert sind. Das sind (bis auf eine andere Parametrisierung des Winkels) genau die Operatoren D_θ die wir schon zuvor gefunden haben.

Es ist aber instruktiv diese nochmals mit Hilfe der allgemeinen Theorie zu konstruieren. Dazu setzen wir U fort zu \tilde{U} mittels

$$\tilde{U}|_{L^+} : L^+ \rightarrow L^-, \quad e^{-x} \mapsto \frac{e^{i\alpha} e^{+x}}{e}$$

Die entsprechende Erweiterung von D_{\min} hat den Definitionsbereich

$$\begin{aligned} D(D_\alpha) &= \underbrace{D(\bar{D}_{\min})}_{=: H_0^1([0,1])} \oplus (\tilde{U} - 1) L^+ = H_0^1([0, 1]) \oplus \text{Span}\left\{ \frac{e^{i\alpha} e^{+x}}{e} - e^{-x} \right\} \\ &= \{ \psi \in H^1([0, 1]) \mid e^{i\theta} \psi(1) = \psi(0) \} \end{aligned}$$

mit $\theta = \arg\left(\frac{e^{i\alpha} - e}{e e^{i\alpha} - 1}\right)$.

3.92 Bemerkung. Allgemein definiert man für ein offenes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ die am Rand verschwindenden Sobolevfunktionen durch

$$H_0^m(\bar{\Omega}) := \overline{C_0^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^m}} \subset H^m(\bar{\Omega}).$$

Beachte, dass die letzte Inklusion gilt, wenn man die Sobolevräume durch $H^m(\bar{\Omega}) := \overline{C^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^m}}$ definiert. Das stimmt mit dem Raum $H^m(\mathbb{R}^d)|_{\bar{\Omega}}$ nur für Gebiete Ω mit hinreichend regulärem Rand überein.

3.93 Definition. Konjugation

Eine *anti-lineare* Abbildung $C : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, d.h.

$$C(\alpha\psi + \varphi) = \bar{\alpha}C\psi + C\varphi,$$

heißt eine *Konjugation*, wenn

$$\|C\psi\| = \|\psi\| \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H}$$

und $C^2 = \text{id}_{\mathcal{H}}$.

3.94 Beispiele. (a) Die komplexe Konjugation $\psi(x) \mapsto \bar{\psi}(x)$ ist eine Konjugation auf $L^2(\Omega)$.

(b) Die Zeitumkehr für Dirac-Spinoren in $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ gegeben durch $\psi(x) \mapsto \gamma\bar{\psi}(x)$ mit $\gamma^2 = \text{id}_{\mathbb{C}^4}$ ist eine Konjugation.

3.95 Satz. von Neumann-Theorem

Sei H symmetrisch und dicht definiert. Wenn es eine Konjugation C gibt mit $CD(H) \subset D(H)$ und $CH\varphi = HC\varphi$ für alle $\varphi \in D(H)$, dann stimmen die Defektindizes von H überein und H hat selbstadjungierte Erweiterungen.

Beweis. Wegen $C^2 = 1$ gilt auch $D(H) \subset CD(H)$, also $D(H) = CD(H)$. Es gilt für alle $\psi_+ \in L^+$ und $\varphi \in D(H)$, dass

$$0 = \langle (H^* - i)\psi_+, \varphi \rangle = \langle \psi_+, (H + i)\varphi \rangle \stackrel{(*)}{=} \overline{\langle C\psi_+, C(H + i)\varphi \rangle} = \langle (H - i)C\varphi, C\psi_+ \rangle,$$

wobei (*) aus einer Übungsaufgabe folgt. Wegen $CD(H) = D(H)$ impliziert dies

$$C\psi_+ \in \text{Bild}(H - i)^\perp = L^-.$$

Analog folgt $CL^- \subset L^+$ also insgesamt $CL^- = L^+$. Wegen der Injektivität und Antilinearität von C ist also $\dim L^- = \dim L^+$. □

3.96 Beispiele. (a) Der Operator $D_{[0,\infty)} = -i\frac{d}{dx}$ auf $C_0^\infty((0, \infty))$ vertauscht mit keiner Konjugation.

(b) Der Operator $-\Delta$ auf $C_0^\infty(\Omega)$ vertauscht mit der komplexen Konjugation, hat also immer selbstadjungierte Erweiterungen.

3.97 Definition. Resolventenmenge, Resolvente, Spektrum

Sei T ein abgeschlossener Operator auf \mathcal{H} . Die *Resolventenmenge* von H ist

$$\varrho(T) := \{z \in \mathbb{C} \mid (T - z) : D(T) \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist bijektiv mit stetiger Inverser}\}.$$

Für $z \in \varrho(T)$ heißt

$$R_z(T) := (T - z)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

die Resolvente von T an der Stelle z .

Das Spektrum von T ist das Komplement der Resolventenmenge,

$$\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \varrho(T).$$

Man unterteilt das Spektrum noch nach folgenden Kriterien

(a) $\sigma_p(T) := \{z \in \mathbb{C} \mid T - z \text{ ist nicht injektiv}\}$

heißt das *Punktspektrum* und ist genau die Menge der Eigenwerte des Operators.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

- (b) $\sigma_c(T) := \{z \in \mathbb{C} \mid T - z \text{ ist injektiv, nicht surjektiv, aber mit dichtem Bild}\}$
 heißt das *stetige Spektrum*.
- (c) $\sigma_r(T) := \{z \in \mathbb{C} \mid T - z \text{ ist injektiv, nicht surjektiv, ohne dichtes Bild}\}$
 heißt das *Restspektrum*.

3.98 Satz. Es gilt

$$\varrho(T) = \{z \in \mathbb{C} \mid (T - z) : D(T) \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist bijektiv}\}$$

und für $z \in \varrho(T)$ ist sogar $(T - z)^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow (D(T), \|\cdot\|_{D(T)})$ beschränkt.

Beweis. Da T abgeschlossen ist, ist $(D(T), \|\cdot\|_{D(T)})$ ein Hilbertraum. Weiterhin ist $T : (D(T), \|\cdot\|_{D(T)}) \rightarrow \mathcal{H}$ beschränkt mit Norm 1, da $\|T\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \leq \|T\psi\|_{\mathcal{H}}^2 + \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 = \|\psi\|_{D(T)}^2$. Der Satz von der offenen Abbildung besagt nun, dass $T - z : (D(T), \|\cdot\|_{D(T)}) \rightarrow \mathcal{H}$ offen ist, falls $T - z$ surjektiv ist. Also ist $(T - z)^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow (D(T), \|\cdot\|_{D(T)})$ stetig, falls $T - z$ bijektiv ist. \square

Also gilt

$$\sigma(T) = \sigma_p(T) \dot{\cup} \sigma_c(T) \dot{\cup} \sigma_r(T).$$

und für $\dim \mathcal{H} < \infty$ ist $\sigma(T) = \sigma_p(T)$ die Menge aller Eigenwerte.

3.99 Beispiele. Orts- und Impulsoperator

- (a) Wir betrachten den ‘‘Ortsoperator’’ \hat{x} , gegeben durch

$$D(\hat{x}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}$$

mit $\hat{x} : \psi \mapsto x\psi$.

Es ist $(\hat{x} - z)^{-1}$ die Multiplikation mit der Funktion $(x - z)^{-1}$, welche genau dann beschränkt ist, wenn $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ ist. Also ist $\sigma(\hat{x}) = \mathbb{R}$.

Die Abbildung $(\hat{x} - \lambda)$ hat für $\lambda \in \mathbb{R}$ aber dichtes Bild: für $\psi \in L^2$ setze

$$\varphi_n := \chi_{\mathbb{R} \setminus [\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n}]} \frac{\psi}{x - \lambda}.$$

Dann gilt $(x - \lambda)\varphi_n \rightarrow \psi$ in L^2 und somit ist das Bild von $x - \lambda$ dicht. Also ist $\sigma(\hat{x}) = \sigma_c(\hat{x}) = \mathbb{R}$.

- (b) Sei $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ unitär, dann ist $\sigma(T) = \sigma(UTU^{-1})$, da $T - z$ genau dann bijektiv ist, wenn $U(T - z)U^{-1} = UTU^{-1} - z$ bijektiv ist.

Also hat auch der ‘‘Impulsoperator’’ $\hat{p} = -i\frac{d}{dx}$ auf $L^2(\mathbb{R})$ rein kontinuierliches Spektrum, $\sigma(\hat{p}) = \sigma_c(\hat{p}) = \mathbb{R}$, denn $\hat{p} = \mathcal{F}\hat{x}\mathcal{F}^{-1}$, und die Fouriertransformation ist unitär.

3.100 Satz. Eigenschaften der Resolvente und des Spektrums

Sei $(T, D(T))$ ein dicht definierter Operator auf einem Hilbertraum \mathcal{H} . Dann gilt:

- (a) $\varrho(T)$ ist offen, das Spektrum $\sigma(T)$ also abgeschlossen.
- (b) Die Resolventenabbildung

$$\varrho(T) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}), \quad z \mapsto R_z(T)$$

ist analytisch, d.h. die Resolvente lässt sich lokal als konvergente Potenzreihe mit Koeffizienten in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ schreiben.

- (c) Falls $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, so gilt $|z| \leq \|T\|$ für alle $z \in \sigma(T)$. Insbesondere ist das Spektrum dann kompakt.

(d) Für $z, w \in \rho(T)$ gilt die erste Resolventenformel

$$R_z(T) - R_w(T) = (z - w)R_w(T)R_z(T).$$

Insbesondere kommutieren die Resolventen,

$$R_w(T)R_z(T) = R_z(T)R_w(T).$$

Beweis. (a) Sei $z_0 \in \rho(T)$ und $|z - z_0| < \|R_{z_0}\|^{-1}$. Dann ist

$$T - z = T - z_0 - (z - z_0) = (T - z_0)(1 - (z - z_0)R_{z_0}).$$

Da $\|(z - z_0)R_{z_0}\| < 1$ gilt, ist nach der folgenden Proposition $1 - (z - z_0)R_{z_0}$ und somit ist auch $T - z$ stetig invertierbar. Also ist $z \in \rho(T)$.

3.101 Proposition. Neumannsche Reihe

Sei X ein Banachraum und $T \in \mathcal{L}(X)$ mit $\|T\| < 1$. Dann ist $1 - T$ stetig invertierbar und es gilt

$$(1 - T)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} T^n$$

und

$$\|(1 - T)^{-1}\| \leq (1 - \|T\|)^{-1}.$$

Beweis. Übungsaufgabe. □

(b) Mit der Neumannschen Reihe ist

$$R_z = (1 - (z - z_0)R_{z_0})^{-1}R_{z_0} = \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n R_{z_0}^{n+1},$$

wobei die Koeffizienten $R_{z_0}^{n+1}$ in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ liegen.

(c) Sei $|z| > \|T\|$, dann ist $1 - \frac{T}{z}$ invertierbar und damit auch $T - z$, also ist $z \in \rho(T)$.

(d) Es ist

$$R_z(T) - R_w(T) = R_z(T)(T - w)R_w(T) - R_z(T)(T - z)R_w(T) = (z - w)R_z(T)R_w(T).$$

□

3.102 Satz. Spektrum eines selbstadjungierten Operators

Sei H selbstadjungiert, dann ist $\sigma(H) \subset \mathbb{R}$ und für $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ gilt

$$\|(H - z)^{-1}\| \leq \frac{1}{|\operatorname{Im}(z)|}.$$

Beweis. Sei $z = \lambda + i\mu$ mit $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ und $\mu \neq 0$. Dann ist $\frac{H - \lambda}{\mu}$ selbstadjungiert auf $D(H)$ und somit gilt

$$\operatorname{Kern}\left(\frac{H - \lambda}{\mu} - i\right) = \operatorname{Kern}(H - \lambda - i\mu) = \{0\}$$

und

$$\operatorname{Bild}\left(\frac{H - \lambda}{\mu} - i\right) = \operatorname{Bild}(H - \lambda - i\mu) = \mathcal{H}.$$

Also ist $H - z : D(H) \rightarrow \mathcal{H}$ bijektiv und die Inverse ist wegen

$$\|(H - \lambda - i\mu)\psi\|^2 = \|(H - \lambda)\psi\|^2 + \|\mu\psi\|^2 \geq \mu^2\|\psi\|^2$$

durch $\frac{1}{|\mu|}$ beschränkt. □

3.103 Bemerkung. Die Norm der Resolvente

Wir werden später sehen, dass für selbstadjungierte Operatoren sogar

$$\|(H - z)^{-1}\| = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(H))}$$

gilt, die Norm der Resolvente also mit dem inversen Abstand zum Spektrum abfällt.

3.104 Proposition. Sei H dicht definiert und symmetrisch. Falls H eine Orthonormalbasis (φ_n) aus Eigenvektoren besitzt, d.h. $\varphi_n \in D(H)$ und $H\varphi_n = \lambda_n\varphi_n$, so ist H wesentlich selbstadjungiert und $\sigma(\overline{H}) = \{\overline{\lambda_n} \mid n \in \mathbb{N}\}$.

Beweis. Jeder Vektor $\varphi \in L^\pm = \text{Kern}(H^* \mp i)$ erfüllt

$$\lambda_n \langle \varphi, \varphi_n \rangle = \langle \varphi, H\varphi_n \rangle = \langle H^*\varphi, \varphi_n \rangle = \mp i \langle \varphi, \varphi_n \rangle.$$

Da die Eigenwerte λ_n symmetrischer Operatoren reell sind, folgt $\langle \varphi, \varphi_n \rangle = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$ somit $\varphi = 0$. Damit ist $N^+ = N^- = 0$ und H ist wesentlich selbstadjungiert.

Da die φ_n auch Eigenvektoren von \overline{H} sind und das Spektrum abgeschlossen ist, gilt sicherlich

$$\overline{\{\lambda_n \mid n \in \mathbb{N}\}} \subset \sigma(\overline{H}).$$

Für $\lambda \notin \overline{\{\lambda_n \mid n \in \mathbb{N}\}}$ können wir $R_\lambda \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ durch

$$R_\lambda \varphi_n = \frac{1}{\lambda_n - \lambda} \varphi_n$$

definieren (und es genügt, einen beschränkten Operator auf einer ONB anzugeben). Es bleibt zu zeigen, dass R_λ die Inverse zu $\overline{H} - \lambda$ ist, da dann $\lambda \in \rho(\overline{H})$ folgt. Sei dazu $\varphi \in \mathcal{H}$ beliebig mit Basisdarstellung

$$\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \varphi_n.$$

Da \overline{H} abgeschlossen ist (vgl. Bemerkung 3.62), folgt

$$(\overline{H} - \lambda)R_\lambda \varphi = (\overline{H} - \lambda) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_n}{\lambda_n - \lambda} \varphi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \varphi_n = \varphi.$$

□

3.105 Beispiel. Wir betrachten $H = -\frac{d^2}{dx^2}$ auf $C^2([0, \pi])$ mit Dirichlet-Randbedingungen, d.h. $D(H) = \{\psi \in H^2([0, \pi]) \mid \psi(0) = \psi(\pi) = 0\}$. Die Eigenwerte sind $\lambda_n = n^2$ für $n \in \mathbb{N}$ mit Eigenfunktionen

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx).$$

Die (φ_n) bilden eine Orthonormalbasis von $L^2([0, \pi])$ (Fourierreihe). Also ist H wesentlich selbstadjungiert und

$$\sigma(\overline{H}) = \{n^2 \mid n \in \mathbb{N}\}.$$

3.106 Motivation. Wir werden nun den Satz von Kato-Rellich beweisen, der uns ein recht allgemeines Werkzeug zur Konstruktion selbstadjungierter Operatoren liefert. Zur Motivation betrachten wir erst ein Beispiel.

Der Hamiltonoperator für das Wasserstoffatom lautet

$$H_{\text{Coul}} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{|x|}.$$

Als natürliche Domäne könnte man beispielsweise $D_0 := C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ wählen, da das Potential bei $x = 0$ singularär ist. Es stellt sich dann die Frage, ob (H_{Coul}, D_0) wesentlich selbstadjungiert ist. Aus physikalischer Sicht ist die Frage also, ob die Spezifikation des Operators außerhalb der Singularität des Potentials schon die Physik eindeutig bestimmt, d.h. ob die Lösungen der zugehörigen Schrödingergleichung dadurch eindeutig festgelegt werden.

Wir wollen diese Frage zunächst an einem noch einfacheren Operator untersuchen, nämlich an $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$ auf $D_0 = C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$. Es wird sich zeigen, dass (H_0, D_0) nicht wesentlich selbstadjungiert ist.

Dazu untersuchen wir wieder die Defekträume von H_0 , suchen also nach potentiellen Lösungen von

$$H_0^* \varphi_\pm = -\frac{1}{2}\Delta \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm.$$

Nun hat zwar $-\frac{1}{2}\Delta \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm$ die eindeutige distributionelle Lösung $\varphi_\pm = 0$, da die Gleichung nach Fouriertransformation äquivalent zu $|k|^2 \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm$ ist. Allerdings werden wir sehen, dass H_0^* gar nicht auf seiner ganzen Domäne gleich dem distributionellen Laplace-Operator ist. Dazu lösen wir die Gleichung in Kugelkoordinaten und suchen kugelsymmetrische Lösungen. Es ergibt sich jeweils eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung,

$$-\frac{1}{2}\Delta_r \varphi_\pm := -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\varphi_\pm(r) = \pm i \varphi_\pm(r),$$

deren zwei linear unabhängige Lösungen man ohne große Mühe bestimmt,

$$\varphi_\pm^{(1)}(r) = \frac{e^{-(1\mp i)r}}{r}, \quad \varphi_\pm^{(2)}(r) = \frac{e^{+(1\pm i)r}}{r}.$$

Es ist offensichtlich $\varphi_\pm^{(1)} \in L^2(\mathbb{R}^3)$, aber $\varphi_\pm^{(2)} \notin L^2(\mathbb{R}^3)$. Nun sind dies wie gesagt zwar keine distributionellen Lösungen der Gleichung $-\frac{1}{2}\Delta \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm$, aber möglicherweise doch Lösungen der Gleichung $H_0^* \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm$. Um das zu klären, führen wir die übliche Rechnung mit partieller Integration durch, wobei wegen $\psi(0) = 0$ für $\psi \in D(H_0)$ die Randterme bei der Null verschwinden:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_\pm, H_0 \psi \rangle &= -\frac{1}{2} \int_{S^2} d\Omega \int_0^\infty r^2 dr \overline{\varphi_\pm(r)} (\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_\omega) \psi(r, \omega) \\ &= -\frac{1}{2} \int_{S^2} d\Omega \int dr \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{d}{dr} \frac{2}{r} \right) \left(r^2 \overline{\varphi_\pm(r)} \right) \psi(r, \omega) \\ &= -\frac{1}{2} \int_{S^2} d\Omega \int r^2 dr \overline{\Delta_r \varphi_\pm(r)} \psi(r, \omega) = \langle \pm i \varphi_\pm, \psi \rangle. \end{aligned}$$

Damit ist $\varphi_\pm \in D(H_0^*)$ und es gilt $H_0^* \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm$ und die Defektindices N^+ und N^- sind größer oder gleich eins. Es ist aber auch klar, dass L^\pm höchstens eindimensional sind, da $\text{Bild}(H_0 \pm i) \oplus \text{Span}\{f\}$ für jede Funktion f die in einer Umgebung von Null nicht verschwindet dicht liegt. Also gilt $N_+ = N_- = 1$. Somit hat (H_0, D_0) eine einparametrische Schar von selbstadjungierten Erweiterungen charakterisiert durch

$$\tilde{U}_\theta : L^+ \rightarrow L^-, \quad \varphi_+ \mapsto e^{i\theta} \varphi_-$$

und mit Domäne

$$D(H_\theta) = D(\bar{H}) \oplus (\tilde{U} - 1)L^+ = D(\bar{H}) \oplus \text{Span}\{e^{i\theta} \varphi_- - \varphi_+\} =: D(\bar{H}) \oplus \text{Span}\{\psi_\theta\},$$

wobei

$$\psi_\theta = \frac{e^{-r}}{r} \left(e^{i(r+\theta)} - e^{-ir} \right).$$

Für $\theta = 0$ ist $\psi_0 \sim \frac{e^{-r} \sin(r)}{r}$ stetig und beschränkt und es liegt nahe, dass $D(H_{\theta=0}) = H^2(\mathbb{R}^3)$ ist.

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

Für $\theta \neq 0$ ist $\psi_\theta \sim \frac{e^{-r}}{r} \sin(r + \frac{\theta}{2})$. Diese Funktion ist zwar quadratintegrabel aber nicht stetig, sondern bei Null singular. Für $\theta \neq 0$ ist der Ursprung für H_θ ein spezieller Punkt und man spricht von einer δ -Wechselwirkung am Ursprung.

Um die physikalische Bedeutung von θ besser zu verstehen, suchen wir nach Eigenvektoren von H_θ , sogenannten gebundenen Zuständen. Es erfüllt $\varphi_\alpha = \frac{e^{-\alpha r}}{r}$ ja die Gleichung

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \varphi_\alpha(r) = -\frac{\alpha^2}{2} \varphi_\alpha(r).$$

Für $\alpha > 0$ ist $\varphi_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und es stellt sich die Frage, ob und für welches θ auch $\varphi_\alpha \in D(H_\theta)$ ist. Dafür ist nur das Verhalten bei der Null relevant. Wir zerlegen $\varphi_\alpha = \frac{e^{-r}}{r} e^{(1-\alpha)r} =: \frac{e^{-r}}{r} R_\alpha(r)$ und vergleichen das Verhalten der nichtsingulären Teile von φ_α und ψ_θ am Ursprung, also

$$\left. \frac{R'_\alpha}{R_\alpha} \right|_{r=0} = 1 - \alpha \quad \text{mit} \quad \left. \frac{\cos(r + \frac{\theta}{2})}{\sin(r + \frac{\theta}{2})} \right|_{r=0} = \cot\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

Es ist also $\varphi_\alpha \in D(H_\theta)$, falls $\alpha > 0$ und $\alpha = 1 - \cot(\frac{\theta}{2})$. Wir sehen also, dass H_θ für $\theta > \frac{\pi}{2}$ den Eigenwert $-\frac{\alpha^2}{2}$ zur Eigenfunktion φ_α hat, wobei $\alpha(\theta) = 1 - \cot(\frac{\theta}{2})$ ist.

3.107 Bemerkung. Ziel der folgenden Konstruktion ist es, ausgehend von einem selbstadjungierten Operator H_0 mit Domäne $D(H_0)$ auch Operatoren vom Typ $H = H_0 + V$ als selbstadjungierte Operatoren auf $D(H_0)$ zu realisieren. Die Störung durch ein möglicherweise singuläres Potential soll also die Domäne nicht verändern, um keine künstlichen Randpunkte einzuführen.

3.108 Definition. Relative Beschränktheit

Seien A und B dicht definiert und es gelte

- (i) $D(A) \subset D(B)$
- (ii) Es gibt $a, b \geq 0$ so, dass

$$\|B\varphi\| \leq a\|A\varphi\| + b\|\varphi\|$$

für alle $\varphi \in D(A)$.

Dann heißt der Operator B *relativ beschränkt* durch A (oder auch A -beschränkt) und das Infimum der zulässigen a heißt die *relative Schranke*. Falls die relative Schranke 0 ist, so heißt B *infinitesimal A -beschränkt*.

3.109 Bemerkung. Man kann äquivalent zur zweiten Bedingung in Definition 3.108 auch die Existenz von $\tilde{a}, \tilde{b} \geq 0$ fordern, mit

$$\|B\varphi\|^2 \leq \tilde{a}^2 \|A\varphi\|^2 + \tilde{b} \|\varphi\|^2$$

für alle $\varphi \in D(A)$. Beide Bedingungen liefern die gleichen relativen Schranken.

3.110 Satz. Kato-Rellich

Sei A selbstadjungiert und B symmetrisch. Sei weiterhin B relativ beschränkt durch A mit der relativen Schranke $a < 1$. Dann ist $A + B$ selbstadjungiert auf $D(A + B) = D(A)$ und wesentlich selbstadjungiert auf jedem determinierenden Bereich von A .

Beweis. Wir zeigen, dass $\text{Bild}(A + B \pm i\mu_0) = \mathcal{H}$ für ein geeignetes $\mu_0 > 0$ gilt. Daraus folgt nach Satz 3.78 die Selbstadjungiertheit von $\frac{A+B}{\mu_0}$ auf $D(A)$ und somit auch die von $A + B$.

Für $\varphi \in D(A)$ und jedes $\mu > 0$ gilt

$$\|(A + i\mu)\varphi\|^2 = \|A\varphi\|^2 + \mu^2 \|\varphi\|^2.$$

Da A selbstadjungiert ist, ist die Resolvente $(A + i\mu)^{-1}$ beschränkt und Einsetzen von $\varphi = (A + i\mu)^{-1}\psi$ liefert

$$\|\psi\|^2 \geq \|A(A + i\mu)^{-1}\psi\|^2 \quad \text{und} \quad \|\psi\|^2 \geq \mu^2 \|(A + i\mu)^{-1}\psi\|^2$$

für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Also ist $\|A(A + i\mu)^{-1}\| \leq 1$ und $\|(A + i\mu)^{-1}\| \leq \mu^{-1}$ (letzteres wissen wir schon aus Satz 3.102). Aus der relativen Beschränktheit ergibt sich für $\varphi = (A + i\mu)^{-1}\psi$

$$\|B(A + i\mu)^{-1}\psi\| \leq a\|A(A + i\mu)^{-1}\psi\| + b\|(A + i\mu)^{-1}\psi\| \leq \left(a + \frac{b}{\mu}\right) \|\psi\|.$$

Für $\mu_0 > \frac{b}{1-a} > 0$ (beachte $a < 1$) folgt dann $\|B(A + i\mu_0)^{-1}\| < 1$. Demnach ist $1 + B(A + i\mu_0)^{-1} = 1 - (-B(A + i\mu_0)^{-1})$ stetig invertierbar und $\text{Bild}(1 + B(A + i\mu_0)^{-1}) = \mathcal{H}$. Da aber

$$(1 + B(A + i\mu_0)^{-1})(A + i\mu_0)\varphi = (A + B + i\mu_0)\varphi$$

für alle $\varphi \in D(A)$ gilt und $\text{Bild}(A + i\mu_0) = \mathcal{H}$ ist (weil A selbstadjungiert ist), ist auch $\text{Bild}(A + B + i\mu_0) = \mathcal{H}$.

Das Argument für $\text{Bild}(A + B - i\mu_0) = \mathcal{H}$ geht vollkommen analog und damit ist der Satz bewiesen. \square

3.111 Satz. $-\Delta$ -beschränkte Potentiale im \mathbb{R}^3

Sei $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ und $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, d.h. man kann $V = V_1 + V_2$ mit $V_1 \in L^2$ und $V_2 \in L^\infty$ schreiben. Dann ist V infinitesimal H_0 -beschränkt, wobei $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$ auf $D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^3)$ ist, und somit der Schrödinger-Operator $H = H_0 + V$ selbstadjungiert auf $D(H_0)$.

Beweis. $D(V) = \{\psi \in L^2 \mid V\psi \in L^2\}$ enthält beispielsweise die beschränkten L^2 -Funktionen und liegt somit dicht. Sei $V = V_1 + V_2$ mit $V_1 \in L^2$ und $V_2 \in L^\infty$. Da $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^3)$ nach dem Lemma von Sobolev stetig und beschränkt ist, folgt

$$\|V\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq \|\varphi\|_\infty \|V_1\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|V_2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)},$$

also $H^2(\mathbb{R}^3) \subset D(V)$. Mit dem nachfolgenden Lemma 3.112 erhalten wir direkt die infinitesimale Beschränktheit von V . \square

3.112 Lemma. Zu jedem $a > 0$ gibt es ein $b > 0$ so, dass für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^3)$

$$\|\varphi\|_\infty \leq a\|\Delta\varphi\|_{L^2} + b\|\varphi\|_{L^2}$$

gilt.

Beweis. Es gilt mit Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned} \|\varphi\|_\infty &\leq \|\hat{\varphi}\|_{L^1} = \|(1 + k^2)(1 + k^2)^{-1}\hat{\varphi}\|_{L^1} \\ &\leq \underbrace{\|(1 + k^2)^{-1}\|_{L^2}}_{=: C} \|(1 + k^2)\hat{\varphi}\|_{L^2} \\ &\leq C(\|k^2\hat{\varphi}\|_{L^2} + \|\hat{\varphi}\|_{L^2}). \end{aligned}$$

Sei nun $\hat{\varphi}_r(k) := r^3\hat{\varphi}(rk)$, dann ist

$$\|\hat{\varphi}_r\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} = \|\hat{\varphi}\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \quad \text{für alle } r \neq 0.$$

Gleichzeitig gilt aber

$$\|\hat{\varphi}_r\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = r^{\frac{3}{2}}\|\hat{\varphi}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}, \quad \text{und} \quad \|k^2\hat{\varphi}_r\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = r^{-\frac{1}{2}}\|k^2\hat{\varphi}\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

3 Die Schrödingergleichung mit Potential

Zusammengenommen ergibt sich

$$\begin{aligned}\|\varphi\|_\infty &\leq \|\hat{\varphi}\|_{L^1} = \|\hat{\varphi}_r\|_{L^1} \leq C(\|k^2\hat{\varphi}_r\|_{L^2} + \|\hat{\varphi}_r\|_{L^2}) = Cr^{-\frac{1}{2}}\|k^2\hat{\varphi}\|_{L^2} + cr^{\frac{3}{2}}\|\hat{\varphi}\|_{L^2} \\ &= Cr^{-\frac{1}{2}}\|\Delta\varphi\|_{L^2} + Cr^{\frac{3}{2}}\|\varphi\|_{L^2}.\end{aligned}$$

Da r beliebig groß gewählt werden kann, folgt die Behauptung. \square

3.113 Beispiele. Das Coulombpotential

Sei $V(x) = -\frac{e}{|x|}$ das Coulombpotential.

(a) Wegen

$$V(x) = -\frac{e}{|x|} = \underbrace{-\chi_{|x|\leq R}\frac{e}{|x|}}_{\in L^2(\mathbb{R}^3)} - \underbrace{\chi_{|x|>R}\frac{e}{|x|}}_{\in L^\infty(\mathbb{R}^3)}$$

ist $H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{e}{|x|}$ selbstadjungiert auf $H^2(\mathbb{R}^3)$. Analog kann man zeigen, dass auch der Vielteilchen-Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} - \sum_{j>k} \frac{e_{jk}}{|x_j - x_k|}$$

selbstadjungiert auf $H^2(\mathbb{R}^{3N})$ ist.

(b) Für den Dirac-Operator $D = D_0 - \frac{e}{|x|}$ (mit $c = 1$) gilt nur

$$\left\| \frac{e}{|x|}\varphi \right\| \leq 2e\|D_0\varphi\| + b\|\varphi\|.$$

Um Kato-Rellich anwenden zu können, muss also $e < \frac{1}{2}$ sein. Tatsächlich ist für $e > \frac{1}{2}$ der Dirac-Operator D nicht mehr wesentlich selbstadjungiert auf $D(D_0)$.

3.114 Definition. Halbbeschränkter Operator

Ein Operator H heißt *halbbeschränkt*, wenn es ein $c \in \mathbb{R}$ gibt, sodass für alle $\psi \in D(H)$

$$\langle \psi, H\psi \rangle \geq c\|\psi\|^2$$

oder

$$\langle \psi, H\psi \rangle \leq c\|\psi\|^2$$

gilt. Insbesondere ist also mit Lemma 3.87 jeder halbbeschränkte Operator symmetrisch.

3.115 Satz. Friedrichs-Erweiterung

Jeder dicht definierte, halbbeschränkte Operator H besitzt eine selbstadjungierte Erweiterung, welche der gleichen oberen bzw. unteren Schranke genügt.

Beweis. Wir skizzieren den Beweis des Satzes. O.b.d.A. nehmen wir an, dass $c = 0$. Definiere für $\psi, \varphi \in D(H)$

$$q_H(\psi, \varphi) := \langle \psi, (H + 1)\varphi \rangle \quad \text{und} \quad \|\psi\|_H^2 := q_H(\psi, \psi) \geq \|\psi\|^2.$$

Es ist $q_H : D(H) \times D(H) \rightarrow \mathbb{C}$ eine positiv definite symmetrische Sesquilinearform, also ein Skalarprodukt. Insbesondere ist q_H stetig bezüglich der Norm $\|\cdot\|_H$ auf $D(H)$ und lässt sich somit eindeutig auf den Abschluss Q_H von $D(H)$ in \mathcal{H} bezüglich der Norm $\|\cdot\|_H$ fortsetzen. Es ist Q_H also ein Hilbertraum mit Skalarprodukt q_H . Nun sei

$$D(\tilde{H}) := \{\psi \in Q_H \mid \text{es gibt ein } \eta \in \mathcal{H} \text{ so, dass } q_H(\psi, \varphi) = \langle \eta, \varphi \rangle \text{ für alle } \varphi \in D(H)\}.$$

Da wegen der Dichtheit von $D(H) \subset Q_H$ das zu $\psi \in D(\tilde{H})$ gehörige η eindeutig ist, können wir auf $D(\tilde{H})$

$$(\tilde{H} + 1)\psi := \eta$$

setzen. Damit ist $\tilde{H} + 1$ offenbar eine symmetrische und abgeschlossene Erweiterung von $H + 1$. Weiterhin ist zu jedem $\eta \in \mathcal{H}$ das lineare Funktional $Q_H \rightarrow \mathbb{C}$, $\varphi \mapsto \langle \eta, \varphi \rangle$ stetig. Somit existiert zu jedem $\eta \in \mathcal{H}$ ein $\psi \in Q_H$ mit $\langle \eta, \varphi \rangle = q_H(\psi, \varphi)$, d.h. $\text{Bild}(\tilde{H} + 1) = \mathcal{H}$. Daraus folgt nun analog zu dem Beweis von Satz 3.78, dass \tilde{H} selbstadjungiert ist. \square

Der Vorteil dieses Satzes ist, dass er leicht anwendbar ist. Beispielsweise erfüllt $-\Delta$ auf $C_0^\infty(\Omega)$, mit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen,

$$\langle \varphi, -\Delta\varphi \rangle = \|\nabla\varphi\|^2 \geq 0 \cdot \|\varphi\|^2.$$

Er macht jedoch keine Aussage über die Eindeutigkeit oder die Domäne der Erweiterung.

3.116 Bemerkung. Quadratische Formen

Dem Satz über die Friedrichs-Erweiterung liegt die folgende Aussage zugrunde. Jede abgeschlossene dicht definierte symmetrische Sesquilinearform

$$q(\cdot, \cdot) : Q \times Q \rightarrow \mathbb{C}$$

die nach unten beschränkt ist, d.h.

$$q(\psi, \psi) \geq c \|\psi\|^2$$

für ein $c \in \mathbb{R}$ erfüllt, ist die Form eines eindeutigen selbstadjungierten Operators. Genauer gilt

$$q(\psi, \varphi) = \langle \psi, H\varphi \rangle,$$

für $\psi, \varphi \in D(H) \subset Q$ für einen selbstadjungierten Operator $(H, D(H))$ der nach unten beschränkt ist und dessen Formdomäne mit Q übereinstimmt. Letztere können wir erst mit Hilfe des Spektralsatzes definieren.

Beispielsweise ist die Friedrichserweiterung von $H = -\frac{d^2}{dx^2}$ auf $C_0^\infty((0, 1))$ durch den Dirichlet-Laplace-Operator H_D gegeben. Die zugehörige Formdomäne ist $H_0^1([0, 1])$. Dagegen ist der Neumann-Laplace-Operator H_N der selbstadjungierte Operator der zur symmetrischen Sesquilinearform $q(\psi, \varphi) = \int_0^1 \overline{\psi'(x)}\varphi'(x)dx$ mit Domäne $Q = H^1([0, 1])$, gehört.

4 Der Spektralsatz

4.1 Motivation. Übersicht zum Spektralsatz

Wir werden im Folgenden den Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren auf Hilberträumen in drei verschiedenen Formen formulieren und auch beweisen. Diese Versionen seien an dieser Stelle vorab kurz skizziert. Sei H selbstadjungiert, dann besagt der Spektralsatz:

- (i) H ist unitär äquivalent zu einem Multiplikationsoperator auf einem geeigneten L^2 -Raum. Im Endlichdimensionalen ist dies die aus der linearen Algebra bekannte Aussage, dass jede selbstadjungierte $n \times n$ -Matrix unitär äquivalent zu einer Diagonalmatrix ist, d.h. einem Multiplikationsoperator auf $L^2(\{1, \dots, n\})$.
- (ii) Es existiert ein Funktionalkalkül für H , d.h. für beschränkte Borel-Funktion f ist $f(H)$ definiert und die Abbildung $f \mapsto f(H)$ ist ein Homomorphismus der Algebra der Borel-Funktionen. Im Endlichdimensionalen erhält man den Funktionalkalkül durch Diagonalisieren: ist A selbstadjungiert und $A = U \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) U^{-1}$, so setzt man

$$f(A) = U \text{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)) U^{-1}.$$

- (iii) H besitzt eine Spektraldarstellung, d.h. es existiert ein Projektorwertiges Maß P_H auf dem Spektrum $\sigma(H)$ so, dass $H = \int_{\sigma(H)} \lambda dP_H(\lambda)$. Im Endlichdimensionalen bedeutet dies, dass sich jede selbstadjungierte Matrix in der Form $A = \sum_{j=1}^n \lambda_j P_j$ schreiben läßt, wobei die P_j die Projektionen auf die Eigenräume sind.

Die drei Formulierungen des Spektralsatzes sind im wesentlichen äquivalent und jede Formulierung hat ihre Vorteile und Anwendungen. Wir werden die Aussagen in folgender Reihenfolge zeigen:

- (1) Zunächst entwickeln wir einen Funktionalkalkül für „schöne“ Funktionen.
- (2) Dann können wir die Multiplikationsoperatorversion des Spektralsatzes beweisen.
- (3) Damit läßt sich der Funktionalkalkül auf beschränkte Borel-Funktionen fortsetzen.
- (4) Die Spektraldarstellung bekommen wir schließlich, indem wir das Projektorwertige Maß $P_H : \mathcal{B}(\sigma(H)) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ explizit durch charakteristische Funktionen von H definieren, also $P_H(\Lambda) = \chi_\Lambda(H)$ für jede Borel-messbare Menge $\Lambda \subset \sigma(H)$.

4.1 Der Funktionalkalkül und die Helffer-Sjöstrand-Formel

4.2 Motivation. Idee zum Funktionalkalkül

Wir diskutieren zunächst einige Ideen, wie man für einen selbstadjungierten Operator H den Operator $f(H)$ definieren könnte, wobei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion auf \mathbb{R} sei.

Für Polynome $f(x) = \sum_{j=0}^n c_j x^j$ kann dann nur der Operator $f(H) = \sum_{j=0}^n c_j H^j$ gemeint sein. Allerdings ist selbst hier bei unbeschränkten Operatoren H nicht klar, was genau der Definitionsbereich von $f(H)$ ist. Ist f analytisch, d.h. $f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f^j(x_0)}{j!} (x - x_0)^j$, dann liegt es nahe,

$$f(H) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{f^j(x_0)}{j!} (H - x_0)^j$$

zu setzen. Dies konvergiert allerdings nur, wenn $\|H - x_0\| < \varrho$ ist. Insbesondere funktioniert das nur für beschränkte Operatoren.

4 Der Spektralsatz

Eine Klasse von Funktionen f , für die wir schon wissen, was $f(H)$ bedeutet, sind die Funktionen $f(x) = r_z(x) := (x - z)^{-1}$ für $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Denn dann ist

$$f(H) = r_z(H) = (H - z)^{-1}$$

einfach die Resolvente von H bei z , also ein wohldefinierter beschränkter Operator. Versucht man nun allgemeinere Funktionen aus $(x - z)^{-1}$ zu bilden, so kann man entweder durch Polynome in $(x - z)^{-1}$ approximieren oder man denkt an die Cauchy-Integralformel:

$$f(x_0) = \frac{i}{2\pi} \int_{\gamma} f(z)(x_0 - z)^{-1} dz.$$

Hier ist f holomorph auf einem Gebiet welches den darin nullhomotopen geschlossenen Weg γ und den Punkt x_0 enthält. Setzen wir für x_0 den Operator H ein, dann steht im Integral die Resolvente. Für $H \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ und $\sigma(H)$ innerhalb von γ wird durch diese Formel tatsächlich ein Funktionalkalkül für holomorphe f erklärt. Das ist aber für unsere Zwecke zu wenig, die Idee die Resolvente zu verwenden ist aber genau richtig.

Um über holomorphe Funktionen hinaus zu kommen, erinnern wir uns an die Herleitung der Cauchy-Integralformel aus dem Satz von Stokes. Wir fassen $\omega = f(z)(z_0 - z)^{-1} dz$ als komplexe 1-Form auf und identifizieren wie üblich \mathbb{C} mit \mathbb{R}^2 (also $z = x + iy$ und somit $dz = dx + i dy$, $d\bar{z} = dx - i dy$, $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right)$, $\frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right)$). Dann ist die äußere Ableitung

$$d\omega = \frac{\partial \omega}{\partial z} dz \wedge dz + \frac{\partial \omega}{\partial \bar{z}} d\bar{z} \wedge dz = \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (z_0 - z)^{-1} d\bar{z} \wedge dz = \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (z_0 - z)^{-1} 2i dx \wedge dy,$$

da $dz \wedge dz = 0$ und $\frac{\partial}{\partial \bar{z}}(z_0 - z)^{-1} = 0$.

Sei $\Gamma \subset \mathbb{C}$ ein Kompaktum mit glattem Rand γ und $B_{\delta}(z_0) := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - z_0| \leq \delta\} \subset \Gamma^{\circ}$. Wir wenden nun den Satz von Stokes auf das Gebiet $\Gamma \setminus B_{\delta}(z_0)$ an und erhalten

$$\int_{\partial(\Gamma \setminus B_{\delta}(z_0))} \omega = \int_{\partial\Gamma} \omega - \int_{\partial B_{\delta}(z_0)} \omega = \int_{\Gamma \setminus B_{\delta}(z_0)} d\omega.$$

Ist f stetig bei z_0 , so gilt

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\partial B_{\delta}(z_0)} \omega = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\partial B_{\delta}(z_0)} f(z)(z_0 - z)^{-1} dz = -f(z_0)2\pi i,$$

und für die rechte Seite ergibt sich

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Gamma \setminus B_{\delta}(z_0)} \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (z_0 - z)^{-1} d\bar{z} \wedge dz = 2i \int_{\Gamma} \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (z_0 - z)^{-1} dx \wedge dy.$$

Also gilt insgesamt

$$f(z_0) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Gamma} \omega + \frac{1}{\pi} \int_{\Gamma} \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (z_0 - z)^{-1} dx \wedge dy.$$

Ist f holomorph, also $\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} = 0$, so erhalten wir die Cauchy-Integralformel. Nehmen wir andererseits an, dass f auf dem Rand von Γ verschwindet, also $f|_{\partial\Gamma} = 0$, so ergibt sich die Formel

$$f(z_0) = \frac{1}{\pi} \int_{\Gamma} \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (z_0 - z)^{-1} dx dy, \quad (4.1)$$

wobei ja $dx \wedge dy$ Integration bezüglich des Lebesguemaßes auf \mathbb{R}^2 bedeutet.

4.1 Der Funktionalkalkül und die Helffer-Sjöstrand-Formel

Die Idee ist nun, in dieser Formel $(z_0 - z)^{-1}$ durch die Resolvente

$$R_z(H) = (H - z)^{-1}$$

zu ersetzen und

$$f(H) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial f}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} dx dy \quad (4.2)$$

zu definieren. Allerdings ist diese Formel für Operatoren zunächst aus zwei Gründen problematisch: während der Integrand in (4.1) singular in einem Punkt ist und somit integrabel ist, ist $(H - z)^{-1}$ singular auf dem ganzen Spektrum von H , welches Intervalle in \mathbb{R} enthalten kann. Außerdem sind wir an einem Funktionalkalkül für Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ interessiert und es ist nicht klar, was $\frac{\partial f}{\partial \bar{z}}$ für eine auf \mathbb{R} definierte Funktion überhaupt bedeuten soll.

Der clevere Trick ist nun, beide Probleme gleichzeitig zu lösen, indem man Fortsetzungen $\tilde{f} : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ von $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ in die komplexe Ebene betrachtet, für die $\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}$ wie $\text{Im}(z)$ verschwindet wenn z gegen die reelle Achse strebt. Dieses Verhalten kompensiert dann genau die Divergenz der Norm der Resolvente nahe der reellen Achse. Solche Fortsetzungen heißen *fast analytisch*, da für eine analytische Funktion ja $\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}$ identisch verschwinden würde.

4.3 Definition. Fast-analytische Fortsetzung

Sei $\tau \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ mit $\text{supp} \tau \in [-2, 2]$ und $\tau|_{[-1, 1]} \equiv 1$ und sei $\sigma(x, y) = \tau(\frac{y}{\langle x \rangle})$, wobei $\langle x \rangle := (1 + x^2)^{\frac{1}{2}}$ der regularisierte Betrag ist.

Für $f \in C^\infty(\mathbb{R})$ und $n \geq 1$ definieren wir die n -te *fast-analytische Fortsetzung* $\tilde{f} : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ durch

$$\tilde{f}_n(z) := \sigma(x, y) \sum_{j=0}^n \frac{f^{(j)}(x)}{j!} (iy)^j$$

wobei $z = x + iy$ ist.

4.4 Bemerkung. Eigenschaften der fast-analytischen Fortsetzung

Offenbar ist \tilde{f} unendlich oft stetig partiell differenzierbar, aber nicht analytisch. Es gilt jedoch

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \tilde{f}(x, y) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{j=0}^n \frac{f^{(j+1)}(x)}{j!} (iy)^j - \sum_{j=1}^n \frac{f^{(j)}(x)}{(j-1)!} (iy)^{j-1} \right) \sigma(x, y) + \frac{1}{2} (\dots) \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} + i \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{f^{(n+1)}(x)}{n!} (iy)^n + \frac{1}{2} (\dots) \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} + i \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

Nun ist $\sigma \equiv 1$ auf einem Streifen der Breite $\langle x \rangle$ um die reelle Achse. Deshalb gilt

$$\left| \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z) \right| = \mathcal{O}(|y|^n) \quad \text{für } y \rightarrow 0.$$

4.5 Definition. Funktionalkalkül

Sei H selbstadjungiert. Eine Abbildung, die jedem Element $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ einer Unteralgebra \mathcal{E} der beschränkten Borel-Funktionen $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ einen Operator $f(H) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ zuordnet, heißt *Funktionalkalkül* für H , falls gilt:

- (i) $f \mapsto f(H)$ ist ein Algebren-Homomorphismus, d.h. linear und multiplikativ, also

$$(f + \alpha g)(H) = f(H) + \alpha g(H) \quad \text{und} \quad f(H)g(H) = (fg)(H) \quad \text{für alle } f, g \in \mathcal{E}.$$

4 Der Spektralsatz

- (ii) $f(H)^* = \bar{f}(H)$
- (iii) $\|f(H)\| \leq \|f\|_\infty$
- (iv) Für $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ und $r_z(x) = (x - z)^{-1}$ ist $r_z(H) = (H - z)^{-1}$, also gleich der Resolvente.
- (v) Falls $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ auf dem Spektrum von H verschwindet, also $\text{supp} f \cap \sigma(H) = \emptyset$ gilt, so ist $f(H) = 0$.

Wir definieren nun zunächst eine Algebra schöner Funktionen, auf der wir mit Hilfe der Formel (4.2) einen Funktionalkalkül konstruieren können. Dabei ist es wichtig, dass diese Algebra zumindest die Funktionen r_z enthält.

4.6 Definition. Für $\beta \in \mathbb{R}$ sei

$$S^\beta := \{f \in C^\infty(\mathbb{R}) \mid \text{für jedes } n \in \mathbb{N} \text{ existiert ein } c_n < \infty \text{ mit } |f^{(n)}(x)| \leq c_n \langle x \rangle^{\beta-n}\}.$$

Wir setzen $\mathcal{A} := \cup_{\beta < 0} S^\beta$ und definieren darauf die Normen $\|\cdot\|_n$ durch

$$\|f\|_n := \sum_{j=0}^n \int_{-\infty}^{\infty} |f^{(j)}(x)| \langle x \rangle^{j-1} dx$$

- 4.7 Proposition.** (a) Es ist \mathcal{A} eine Unteralgebra von $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$, also insbesondere ist für $f, g \in \mathcal{A}$ auch $fg \in \mathcal{A}$.
- (b) Für $f \in \mathcal{A}$ gilt $f' \in L^1(\mathbb{R})$ and $\lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) = 0$.
- (c) Für $f \in \mathcal{A}$ und $n \geq 1$ gilt $\|f\|_\infty \leq \|f\|_n$.

Beweis. Übungen. □

Da wir in (4.2) eine Funktion integrieren wollen, die Werte in dem unendlichdimensionalen Banachraum $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ annimmt, müssen wir uns zunächst klar machen, was das genau bedeuten soll.

4.8 Bemerkung. Schwaches Integral und Bochner-Integral

Sei $A : \Omega \rightarrow X$ für einen Maßraum (Ω, μ) und einen Banachraum X . Wir möchten das Integral

$$I = \int_{\Omega} A d\mu$$

definieren und sehen dazu mehrere Möglichkeiten:

- (1) Sei A schwach-messbar, d.h. $\ell(A) : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ ist messbar für alle $\ell \in X'$, dann definiert man das schwache Integral durch

$$\ell(I) = \int_{\Omega} \ell(A) d\mu \quad \text{falls} \quad \int_{\Omega} |\ell(A)| d\mu < \infty.$$

- (2) Für $\Omega = \mathbb{R}^n$ könnte man das Integral auch über Norm-konvergente Riemannsummen definieren.
- (3) Das Bochner-Integral ist schließlich die natürliche Verallgemeinerung des Lebesgueintegrals. Ist $A : \Omega \rightarrow X$ Borel-messbar, so heißt A Bochner-integrierbar, wenn $\int_{\Omega} \|A\| d\mu < \infty$ ist. Dann ist $\int_{\Omega} A d\mu$ wohldefiniert und man kann zeigen, dass dieser Integralbegriff die üblichen Eigenschaften des Lebesgue-Integrals besitzt.
- (4) Für Funktionen $A : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ können wir schließlich auch

$$\langle \psi, I\varphi \rangle := \int_{\Omega} \langle \psi, A\varphi \rangle d\mu$$

setzen, was dem schwachen Integral über $A\varphi : \Omega \rightarrow \mathcal{H}$ entspricht. Dadurch wird der beschränkte Operator I eindeutig definiert.

Wir werden im Folgenden wegen der einfacheren Notation das Bochnerintegral verwenden. Allerdings kann man in allen Aussagen auch den zuletzt erklärten schwachen Integralbegriff zur Definition der Integrale verwenden.

4.9 Proposition. Sei H selbstadjungiert, $f \in \mathcal{A}$ und $n \geq 1$. Sei \tilde{f}_n die n -te fast-analytische Fortsetzung von f zur Abschneidefunktion τ , dann existiert

$$f_{\tau,n}(H) := \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{f}_n}{\partial \bar{z}}(z)(H - z)^{-1} dx dy$$

und es gibt ein $C_{\tau,n} < \infty$ welches nur von n und τ abhängt, sodass

$$\|f_{\tau,n}(H)\| \leq C_{\tau,n} \|f\|_{n+1}. \quad (4.3)$$

Beweis. Seien

$$U := \{(x, y) \mid \langle x \rangle \leq |y| \leq 2\langle x \rangle\} \supset \text{supp } \tau' \left(\frac{y}{\langle x \rangle} \right)$$

und

$$V := \{(x, y) \mid |y| \leq 2\langle x \rangle\} \supset \underbrace{\text{supp } \tau \left(\frac{y}{\langle x \rangle} \right)}_{=\sigma(x,y)}.$$

Wir haben bereits festgestellt, dass

$$\frac{\partial \tilde{f}_n}{\partial \bar{z}}(z) = \frac{1}{2} \underbrace{\left(\sum_{j=0}^n \frac{f^{(j)}(x)}{j!} (iy)^j \right)}_{=: \tilde{g}(x,y)} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} + i \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) + \frac{1}{2} \frac{f^{(n+1)}(x)}{n!} (iy)^n \sigma(x, y).$$

Nun ist

$$\left| \frac{\partial \sigma(x, y)}{\partial x} + i \frac{\partial \sigma(x, y)}{\partial y} \right| = \left| -\tau' \frac{yx}{\langle x \rangle^3} + i\tau' \frac{1}{\langle x \rangle} \right| \leq |\tau'| \frac{2\langle x \rangle^2}{\langle x \rangle^3} + |\tau'| \frac{1}{\langle x \rangle} \leq C_{\tau} \frac{1}{\langle x \rangle} \chi_U$$

mit einer Konstante C_{τ} welche nur von der Abschneidefunktion τ abhängt, nicht aber von f oder H . Also gilt auf dem Gebiet U

$$\left| \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}} \right| \leq \frac{|\tilde{g}| C_{\tau}}{2\langle x \rangle} \chi_U + \frac{1}{2} \left| \frac{f^{(n+1)}(x)}{n!} (iy)^n \sigma(x, y) \right| \leq C_{\tau} \sum_{j=0}^n \frac{|f^{(j)}(x)|}{j!} (2\langle x \rangle)^{j-1} \chi_U + \frac{1}{2} \frac{|f^{(n+1)}(x)|}{n!} |y|^n \chi_V.$$

Wegen $\|(H - z)^{-1}\| \leq |y|^{-1} \leq \langle x \rangle^{-1}$ auf U können wir den Integranden abschätzen durch

$$I = \left| \frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial \bar{z}} \right| \|(H - z)^{-1}\| \leq C_{\tau} \sum_{j=0}^n \frac{|f^{(j)}(x)|}{j!} \langle x \rangle^{j-2} \chi_U + \frac{1}{2} \frac{|f^{(n+1)}(x)|}{n!} |y|^{n-1} \chi_V.$$

Für das Integral ergibt sich mit Fubini

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{C}} \|\dots\| dx dy &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} I dy \right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-2\langle x \rangle}^{2\langle x \rangle} I dy \right) dx \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} \left(2C_{\tau} \sum_{j=0}^n |f^{(j)}(x)| \langle x \rangle^{j-1} + C_n |f^{(n+1)}(x)| \langle x \rangle^n \right) dx \\ &\leq C_{\tau,n} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{n+1} |f^{(j)}(x)| \langle x \rangle^{j-1} \right) dx \\ &= C_{\tau,n} \|f\|_{n+1}, \end{aligned}$$

womit die Behauptung gezeigt ist. \square

4 Der Spektralsatz

4.10 Lemma. $C_0^\infty(\mathbb{R})$ liegt dicht in \mathcal{A} bezüglich $\|\cdot\|_{n+1}$ für jedes $n \geq 1$.

Beweis. Sei $\Phi : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ glatt mit $\text{supp}\Phi \subset [2, 2]$ und $\Phi|_{[-1, 1]} \equiv 1$ und $\Phi_m(x) = \Phi\left(\frac{x}{m}\right)$. Zu $f \in \mathcal{A}$ sei $f_m := \Phi_m f \in C_0^\infty$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \|f - f_m\|_{n+1} &= \sum_{j=0}^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d^j}{dx^j} \left(f(x)(1 - \Phi_m(x)) \right) \right| \langle x \rangle^{j-1} dx \\ &\leq \sum_{j=0}^{n+1} \int_{|x|>m} |f^{(j)}(x)| \langle x \rangle^{j-1} dx \\ &\quad + \sum_{j=0}^{n+1} \int_{m < |x| < 2m} \sum_{k=0}^{j-1} \binom{j}{k} |f^{(k)}(x)| \cdot |(1 - \Phi_m(x))^{(j-k)}| \langle x \rangle^{j-1} dx \\ &\xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

□

4.11 Lemma. Sei $F \in C_0^\infty(\mathbb{C})$ und $F(x, y) = \mathcal{O}(y^2)$ für $|y| \rightarrow 0$ bei festem $x \in \mathbb{R}$. Dann gilt

$$\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial F}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} dx dy = 0.$$

Beweis. Wir wählen N so, dass $\text{supp}F \subset [-N, N] \times [-N, N] \subset \mathbb{C}$ gilt und setzen

$$\Omega_\delta := [-N, N] \times ([-N, -\delta] \cup [\delta, N]).$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial F}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} dx dy &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{\Omega_\delta} \frac{\partial F}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} dx dy \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{2i\pi} \int_{\Omega_\delta} d(F(z) (H - z)^{-1} dz) \\ &\stackrel{\text{Stokes}}{=} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Omega_\delta} F(z) (H - z)^{-1} dz \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-N}^N \left(F(x + i\delta) (H - x - i\delta)^{-1} - F(x - i\delta) (H - x + i\delta)^{-1} \right) dx \end{aligned}$$

und somit

$$\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \left\| \frac{\partial F}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} \right\| dx dy \leq \frac{1}{2\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-N}^N \frac{1}{\delta} \left(\underbrace{|F(x + i\delta)|}_{=\mathcal{O}(\delta^2)} + \underbrace{|F(x - i\delta)|}_{=\mathcal{O}(\delta^2)} \right) dx = 0.$$

□

4.12 Proposition. Sei H selbstadjungiert, $f \in \mathcal{A}$ und $n \geq 1$. Dann ist der in Proposition 4.9 konstruierte Operator $f_{\tau, n}(H)$ unabhängig von τ und n und wir bezeichnen ihn mit $f(H)$.

Beweis. Wegen der Dichtheit von $C_0^\infty(\mathbb{R})$ in \mathcal{A} und der Schranke (4.3) genügt es, die Aussage für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ zu zeigen.

Sei also $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ und $f_{\tau_1, n}$ und $f_{\tau_2, n}$ seien n -te fast analytische Fortsetzungen. Dann gilt

$$f_{\tau_1, n} - f_{\tau_2, n} = \sum_{j=0}^n \frac{f^{(j)}(x)}{j!} (iy)^j \left(\tau_1 \left(\frac{y}{\langle x \rangle} \right) - \tau_2 \left(\frac{y}{\langle x \rangle} \right) \right) = 0 \quad \text{für } y \leq \langle x \rangle$$

und $f_{\tau_1, n}(H) = f_{\tau_2, n}(H)$ folgt aus Lemma 4.11. Analog seien $f_{\tau, n}$ und $f_{\tau, m}$ für $m > n \geq 1$ fast analytische Fortsetzungen, dann gilt

$$f_{\tau, m} - f_{\tau, n} = \sum_{j=n+1}^m \frac{f^{(j)}(x)}{j!} (iy)^j \tau \left(\frac{y}{\langle x \rangle} \right) = \mathcal{O}(|y|^{n+1}) \quad \text{für } y \rightarrow 0.$$

□

4.13 Satz. Der Funktionalkalkül für \mathcal{A}

Die Abbildung $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit

$$f \mapsto f(H) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} dx dy$$

ist ein Funktionalkalkül für den selbstadjungierten Operator H .

Beweis. Wir müssen die Eigenschaften (i)–(v) aus Definition 4.5 nachweisen.

- (i) Die Linearität ist klar und wir zeigen nun, dass für alle $f, g \in \mathcal{A}$ gilt $f(H)g(H) = (fg)(H)$. Seien zunächst $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ und sei $K = \text{supp} \tilde{f}$ und $L = \text{supp} \tilde{g}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} f(H)g(H) &= \frac{1}{\pi^2} \int_{K \times L} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z) \frac{\partial \tilde{g}}{\partial \bar{w}}(w) (H - z)^{-1} (H - w)^{-1} dx dy dudv \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int_{K \times L} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z) \frac{\partial \tilde{g}}{\partial \bar{w}}(w) \frac{R_w(H) - R_z(H)}{w - z} dx dy dudv \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{K \cap L} \tilde{f}(w) \frac{\partial \tilde{g}}{\partial \bar{w}}(w) R_w(H) dudv + \frac{1}{\pi} \int_{K \cap L} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z) \tilde{g}(z) R_z(H) dx dy \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{K \cap L} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\tilde{f}(z) \tilde{g}(z) \right) R_z(H) dx dy \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{K \cap L} \frac{\partial (\tilde{f}\tilde{g})(z)}{\partial \bar{z}} R_z(H) dx dy = (fg)(H). \end{aligned}$$

Dabei gilt das vorletzte Gleichheitszeichen, da $\tilde{f}\tilde{g} - \widetilde{fg} = \mathcal{O}(y^2)$ für $y \rightarrow 0$.

Für $f, g \in \mathcal{A}$ seien f_m, g_m Folgen in C_0^∞ mit $\|f_m - f\|_{n+1} \rightarrow 0$ und $\|g_m - g\|_{n+1} \rightarrow 0$. Dann ist $f_m(H)g_m(H) = (f_m g_m)(H)$. Man überlegt sich leicht (Übung), dass auch $\|f_m g_m - fg\|_{n+1} \rightarrow 0$ und somit $\|(f_m g_m)(H) - (fg)(H)\| \rightarrow 0$ gilt. Schließlich gilt auch

$$\begin{aligned} \|f_m(H)g_m(H) - f(H)g(H)\| &\leq \|f_m(H)\| \|g_m(H) - g(H)\| + \|f_m(H) - f(H)\| \|g(H)\| \\ &\rightarrow 0. \end{aligned}$$

- (ii) Es ist zu zeigen, dass $\bar{f}(H) = f(H)^*$ für alle $f \in \mathcal{A}$. Dazu wählen wir die Abschneidefunktion symmetrisch zur reellen Achse, also $\tau(-y) = \tau(y)$. Dann ist $\overline{\tilde{f}(z)} = \tilde{f}(\bar{z})$ und es gilt

$$\begin{aligned} f(H)^* &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \overline{\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \bar{z}}(z)} [(H - z)^{-1}]^* dx dy \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{f}(\bar{z})}{\partial z} (H - \bar{z})^{-1} dx dy \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial \bar{z}} (H - z)^{-1} dx dy = \bar{f}(H). \end{aligned}$$

4 Der Spektralsatz

(iii) Es ist zu zeigen, dass $\|f(H)\| \leq \|f\|_\infty$. Sei dazu $f \in \mathcal{A}$ und $c > \|f\|_\infty$ beliebig. Sei

$$g(x) = c - (c^2 - |f(x)|^2)^{\frac{1}{2}}$$

Man sieht leicht, dass $g \in \mathcal{A}$ ist und es gilt offenbar

$$\bar{f}f - 2cg + g^2 = 0.$$

Mit den ersten beiden Eigenschaften, die wir ja schon bewiesen haben, gilt also

$$f(H)^*f(H) = 2cg(H) - g(H)^*g(H) = c^2 - (c - g(H))^*(c - g(H))$$

und somit

$$\|f(H)\psi\|^2 = \langle \psi, f(H)^*f(H)\psi \rangle = c^2\|\psi\|^2 - \|(c - g(H))\psi\|^2 \leq c^2\|\psi\|^2.$$

(iv) Wir müssen zeigen, dass für $w \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ und $r_w(x) = (x - w)^{-1}$ nun $r_n(H) = (H - w)^{-1}$ tatsächlich die Resolvente liefert. Diese Bedingung stellt sicher, dass unser Funktionalkalkül nicht trivial ist, denn bisher hätte ja $f(H) := 0$ für alle $f \in \mathcal{A}$ auch funktioniert.

Sei $n = 1$ und $\sigma(x, y) = \tau\left(\frac{\lambda y}{\langle x \rangle}\right)$ mit $\lambda \geq 1$ so, dass $w \notin \text{supp } \sigma$. Wir definieren das Gebiet Ω_m durch

$$\Omega_m := \left\{ (x, y) \mid |x| < m \text{ und } \frac{\langle x \rangle}{m} < |y| < 2m \right\}$$

und erhalten wieder mit dem Staz von Stokes

$$\begin{aligned} r_w(H) &= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_{\Omega_m} \frac{\partial \tilde{r}_w}{\partial \bar{z}}(z) (H - z)^{-1} dx dy \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial \Omega_m} \tilde{r}_w(z) (H - z)^{-1} dz. \end{aligned}$$

Durch explizite Berechnung des Kurvenintegrals findet man, dass

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \left\| \int_{\partial \Omega_m} \left(\tilde{r}_w(z) - \underbrace{(z - w)^{-1}}_{=r_w(z)} \right) (H - z)^{-1} dz \right\| = 0.$$

Dann können wir im obigen Integral die fast-analytische Fortsetzung durch die analytische Fortsetzung ersetzen und erhalten mit dem Residuensatz

$$r_w(H) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial \Omega_m} (z - w)^{-1} (H - z)^{-1} dz = (H - w)^{-1}.$$

(v) ist eine Übungsaufgabe. □

4.14 Korollar. Es gibt einen eindeutigen Funktionalkalkül auf $C_\infty(\mathbb{R})$, dem Raum der nach Unendlich abfallenden Funktionen.

Beweis. Wir haben bereits die Existenz auf \mathcal{A} . Wegen $C_0^\infty \subset \mathcal{A} \subset C_\infty$ und wegen $\overline{C_0^\infty}^{\|\cdot\|_\infty} = C_\infty$ ist auch

$$\overline{\mathcal{A}}^{\|\cdot\|_\infty} = C_\infty.$$

Also können wir die wegen $\|f(H)\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} \leq \|f\|_\infty$ stetige lineare Abbildung $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) : f \mapsto f(H)$ eindeutig auf C_∞ fortsetzen, wobei alle Eigenschaften erhalten bleiben.

Die Eindeutigkeit sieht man so: aufgrund der Eigenschaften des Funktionskalküls folgt, dass jeder andere Funktionalkalkül auf dem Abschluss der von

$$\left\{ r_z(x) = (x - z)^{-1} \mid z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \right\}$$

erzeugten Unteralgebra R mit unserem übereinstimmen muss. Nun gilt nach dem Satz von Stone-Weierstraß 4.15, dass $\overline{R}^{\|\cdot\|_\infty} = C_\infty$ ist. \square

4.15 Satz. Stone-Weierstraß

Sei X ein lokalkompakter topologischer Raum und B eine Unteralgebra von $C_\infty(X)$, die Punkte in X trennt, $f \in B \Rightarrow \bar{f} \in B$ erfüllt und zu jedem $x \in X$ ein $f \in B$ mit $f(x) \neq 0$ enthält. Dann liegt B bezüglich $\|\cdot\|_\infty$ dicht in $C_\infty(X)$.

Beweis. Analysis-Grundvorlesung bzw. Funktionalanalysis. \square

4.2 Spektralsatz: Multiplikationsoperatorversion

Wir haben den Funktionalkalkül für Funktionen in C_∞ konstruiert und werden diesen nun verwenden, um die Multiplikationsoperatorversion des Spektralsatzes zu zeigen. Wie zuvor nehmen wir immer an, dass H ein auf $D(H)$ selbstadjungierter Operator ist.

4.16 Definition. Invarianter Unterraum

Ein abgeschlossener Unterraum $L \subset \mathcal{H}$ heißt *invariant* unter H , wenn für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ gilt, dass $(H - z)^{-1}L \subset L$.

4.17 Lemma. Sei L invariant unter H . Dann gilt:

- (a) Ist $\varphi \in L \cap D(H)$, dann gilt $H\varphi \in L$.
- (b) Die Eigenräume $\text{Kern}(H - \lambda) \subset \mathcal{H}$ für $\lambda \in \mathbb{R}$ Eigenwert sind invariant.
- (c) L^\perp ist invariant unter H .
- (d) Für $f \in C_\infty$ ist L auch invariant unter $f(H)$.

Beweis. (a) Übungsaufgabe.

(b) Folgt aus $(H - z)^{-1}\varphi = (\lambda - z)^{-1}\varphi$ für $\varphi \in \text{Kern}(H - \lambda)$ und $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$.

(c) Sei $\varphi \in L^\perp$, also $\langle \psi, \varphi \rangle = 0$ für alle $\psi \in L$. Dann ist

$$\langle \psi, (H - z)^{-1}\varphi \rangle = \underbrace{\langle (H - \bar{z})^{-1}\psi, \varphi \rangle}_{\in L} = 0 \quad \text{für alle } \psi \in L.$$

also ist $(H - z)^{-1}\varphi \in L^\perp$.

(d) Für $f \in \mathcal{A}$ folgt dies direkt aus der Formel des Funktionalkalküls, für die anderen durch Approximation unter Verwendung der Abgeschlossenheit von L . \square

4.18 Definition. Zyklischer Unterraum und zyklischer Vektor

Für ein selbstadjungiertes H auf \mathcal{H} ist der von einem Vektor $v \in \mathcal{H}$ erzeugte zyklische Unterraum

$$L_v = \overline{\text{span}\{(H - z)^{-1}v \mid z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}\}}.$$

Falls $L_v = \mathcal{H}$ ist, so heißt v ein zyklischer Vektor für H .

4 Der Spektralsatz

4.19 Bemerkung. (a) Zyklische Unterräume sind invariant unter H : es folgt sofort aus der Resolventengleichung und

$$\overline{\text{span}\{(H - z)^{-1}v \mid z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}\}} = \overline{\text{span}\{(H - z)^{-1}v \mid z \in \mathbb{C} \setminus (\mathbb{R} \cup \{z_0\})\}} \quad \text{für jedes } z_0 \in \mathbb{C},$$

daß $(H - z_0)^{-1}L_v \subset L_v$.

(b) Es gilt immer $v \in L_v$, da

$$s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} (-in)(H - in)^{-1} = \text{id}_{\mathcal{H}}.$$

Letzteres ist eine Übungsaufgabe. (Man zeigt die Aussage erst auf $D(H)$ und verwendet dann, dass die Operatorfolge wegen Bemerkung 3.103 gleichmäßig beschränkt ist.)

(c) Ist v ein Eigenvektor, $Hv = \lambda v$, so ist $L_v = \text{span}\{v\}$.

(d) Im Endlichdimensionalen hat eine Matrix genau dann einen zyklischen Vektor, wenn alle Eigenwerte einfach sind.

4.20 Lemma. Sei H selbstadjungiert auf dem separablen Hilbertraum \mathcal{H} . Dann gibt es eine Folge paarweise orthogonaler zyklischer Unterräume $L_n \subset \mathcal{H}$ mit zyklischen Vektoren v_n so, dass

$$\mathcal{H} = \overline{\bigoplus_{n=1}^N L_n}$$

wobei $N \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ ist.

Beweis. Sei $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine ONB von \mathcal{H} und L_1 der zyklische Untervektorraum zu φ_1 . Wir nehmen nun an, dass L_1, \dots, L_n bereits konstruiert sind und setzen

$$m(n) := \min\{k \in \mathbb{N} \mid \varphi_k \notin L_1 \oplus \dots \oplus L_n\}.$$

Sei weiterhin $\varphi_{m(n)}^\perp$ die Projektion von $\varphi_{m(n)}$ auf $(L_1 \oplus \dots \oplus L_n)^\perp$ und sei L_{n+1} der von $\varphi_{m(n)}^\perp$ erzeugte zyklische Raum. Dann ist $L_{n+1} \perp L_k$ für $k \leq n$, da für $\varphi \in L_{n+1}$ gilt

$$\varphi = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j (H - z_j)^{-1} \varphi_{m(n)}^\perp$$

und somit

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \left\langle \underbrace{\sum_{j=1}^{\infty} \bar{\alpha}_j (H - \bar{z}_j)^{-1} \psi, \varphi_{m(n)}^\perp}_{\in L_k} \right\rangle = 0 \quad \text{für alle } \psi \in L_k.$$

Damit ist $\varphi_{m(n)} \in L_1 \oplus \dots \oplus L_{n+1}$ und $m(n+1) > m(n)$. Entweder bricht die Induktion ab, wenn die direkte Summe bereits der ganze Raum ist oder nicht. Dann hätten wir eine Folge von solchen Unterräumen konstruiert und, da (φ_n) eine ONB ist, ist dann $\mathcal{H} = \overline{\bigoplus_{n=1}^{\infty} L_n}$. \square

4.21 Bemerkung. Die so gewonnene Zerlegung erlaubt es uns, H auf L_n jeweils isoliert zu betrachten. Die Zerlegung ist allerdings nicht eindeutig.

4.22 Satz. Spektralsatz: Multiplikationsoperatorversion

Sei H selbstadjungiert auf dem separablen Hilbertraum \mathcal{H} . Dann existiert ein endliches Maß μ auf $\sigma(H) \times \mathbb{N}$ und ein unitärer Operator $U : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu)$ so, dass für

$$h : \sigma(H) \times \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R} : (x, n) \mapsto x$$

gilt:

- (i) $\varphi \in D(H)$ genau dann, wenn $hU\varphi \in L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu)$.
- (ii) Für $\varphi \in D(H)$ ist $UH\varphi = hU\varphi$ und es gilt

$$Uf(H)\psi = f(h)U\psi \quad \text{für alle } f \in C_\infty, \text{ und } \psi \in \mathcal{H}.$$

Beweis. Dies ist ein einfaches Korollar aus Lemma 4.20 und dem nachfolgenden Satz 4.23. \square

4.23 Satz. Spezialfall des Spektralsatzes

Falls H unter den Bedingungen des Spektralsatzes 4.22 einen zyklischen Vektor v besitzt, so gelten die analogen Aussagen mit $L^2(\sigma(H), \mu)$ anstelle von $L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu)$.

Beweis. Sei $\Phi : C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$ gegeben durch $\Phi(f) = \langle v, f(H)v \rangle$. Der Funktionalkalkül besagt, dass Φ ein positives lineares beschränktes Funktional ist, d.h. für $0 \leq f \in C_\infty$ ist mit $g := \sqrt{f}$

$$\Phi(f) = \langle v, g^2(H)v \rangle = \langle v, g(H)g(H)v \rangle = \langle g(H)v, g(H)v \rangle = \|g(H)v\|^2 \geq 0.$$

Nach dem Satz von Riesz-Markov (Satz 4.24) existiert ein eindeutiges endliches reguläres Borelmaß μ auf \mathbb{R} so, dass

$$\Phi(f) = \langle v, f(H)v \rangle = \int_{\mathbb{R}} f \, d\mu \quad \text{für alle } f \in C_\infty(\mathbb{R}).$$

Da für $\text{supp} f \cap \sigma(H) = \emptyset$, gilt $f(H) = 0$, ist $\text{supp} \mu \subset \sigma(H)$, und da μ endlich ist, gilt $C_\infty(\mathbb{R}) \subset L^2(\sigma(H), \mu)$.

Nun folgt aus $f(H)v = 0$, dass $f(H)\psi = 0$ für alle $\psi \in \mathcal{H}$, da v ja zyklischer Vektor ist. Also ist $f(H) = 0$ und auch $|f|^2(H) = \bar{f}(H)f(H) = 0$ und somit folgt $|f|^2 = 0$ μ -fast überall. Damit ist die Abbildung

$$U : M \rightarrow C_\infty(\mathbb{R}) \subset L^2(\sigma(H), \mu) : f(H)v \mapsto Uf(H)v = f$$

auf $M := \{f(H)v \in \mathcal{H} \mid f \in C_\infty\}$ wohldefiniert. Wegen

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\sigma(H), \mu)} = \int_{\mathbb{R}} \bar{f} g \, d\mu = \langle v, f^*(H)g(H)v \rangle = \langle f(H)v, g(H)v \rangle$$

für $f, g \in C_\infty(\mathbb{R})$ ist U eine surjektive Isometrie. Da v zyklisch ist, liegt M dicht in \mathcal{H} und da auch C_∞ dicht in $L^2(\sigma(H), \mu)$ liegt (selbst $C_0(\mathbb{R})$ liegt dicht, vgl. z.B. Bauer, Maß- und Integrationstheorie, Satz 29.14), hat U eine eindeutige unitäre Fortsetzung $U : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\sigma(H), \mu)$.

Seien $f_1, f_2, f \in C_\infty$ und $\psi_i = f_i(H)v \in \mathcal{H}$. Dann gilt

$$\langle \psi_2, f(H)\psi_1 \rangle_{\mathcal{H}} = \langle f_2(H)v, f(H)f_1(H)v \rangle = \int_{\mathbb{R}} \bar{f}_2 f f_1 \, d\mu = \langle U\psi_2, fU\psi_1 \rangle_{L^2(\sigma(H), \mu)},$$

wobei f als Multiplikationsoperator aufgefasst wird. Für $r_i(x) = (x - i)^{-1}$ ergibt sich

$$Ur_i(H)U^{-1}f = r_i f \quad \text{für alle } f \in L^2(\sigma(H), \mu).$$

und somit

$$UD(H) = U \text{Bild}(r_i(H)) = \text{Bild}r_i = \{r_i f \in L^2 \mid f \in L^2\} = \{f \in L^2 \mid xf \in L^2\} = D(h).$$

Für $f = r_i g \in D(h)$ ist dann schließlich

$$r_i U H U^{-1} f = Ur_i(H) H U^{-1} r_i g = Ur_i(H) H r_i(H) U^{-1} g = r_i x r_i g = r_i h r_i g = r_i h f.$$

Da $r_i : L^2(\sigma(H), \mu) \rightarrow D(h)$ injektiv ist, folgt auch $U H U^{-1} f = h f$. Damit ist der Spezialfall bewiesen. \square

4.24 Satz. Riesz-Markov

Sei X ein lokal-kompakter topologischer Raum. Dann existiert zu jedem positiven beschränkten linearen Funktional $\ell \in (C_\infty(X))'$ ein eindeutiges endliches reguläres Borel-Maß μ so, dass

$$\ell(f) = \int_X f \, d\mu.$$

Beweis. Siehe z.B. Werner, Funktionalanalysis, Theorem 2.5 und die Diskussion auf Seite 89, oder Bauer, Maß- und Integrationstheorie, Kapitel 29 und Aufgabe 29.6. \square

Beweis. (von Satz 4.22)

Wir können den Hilbertraum gemäß Lemma 4.20 in zyklische Teilräume L_n zu zyklischen Vektoren v_n aufspalten, $\mathcal{H} = \overline{\bigoplus L_n}$. Wir normieren die zyklischen Vektoren zu $\|v_n\| = 2^{-n}$. Es existieren dann Maße μ_n auf $\sigma(H)$ und unitäre Abbildungen $U_n : L_n \rightarrow L^2(\sigma(H), \mu_n)$ so, dass $H_n = H|_{L_n}$ unitär äquivalent zur Multiplikation mit x auf $L^2(\sigma(H), \mu_n)$ ist. Wir definieren nun μ auf $\sigma(H) \times \mathbb{N}$ durch

$$\mu|_{\sigma(H) \times \{n\}} := \mu_n$$

und setzen $U = \bigoplus U_n$. Um zu sehen, dass μ tatsächlich endlich ist, sei (f_j) eine Folge in C_∞ , die punktweise monoton wachsend gegen 1 konvergiert. Dann gilt, dass

$$\mu_n(\sigma(H)) = \lim_{j \rightarrow \infty} \int f_j \, d\mu_n = \langle v_n, f_j(H)v_n \rangle \leq \sup_j \|f_j\|_\infty \|v_n\|^2 \leq \|v_n\|^2 = 2^{-2n}.$$

Somit ist μ endlich und der Satz folgt. \square

4.25 Beispiel. Für $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ und einfache Eigenwerte λ_j können wir die Konstruktion konkret angeben. Setze $\mu := \sum_{j=1}^n \delta(x - \lambda_j)$, wobei δ das Diracmaß auf λ_j ist und wir $\mathbb{C}^n \cong L^2(\sigma(H), \mu)$ identifizieren. Genau so gut könnten wir allerdings auch $\tilde{\mu} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \delta(x - \lambda_j)$ mit $\alpha_j > 0$ wählen. Das Maß ist also in keiner Weise eindeutig, da die Wahl des zyklischen Vektors bzw. der zyklischen Vektoren nicht eindeutig ist.

Mit der Multiplikationsoperatorversion des Spektralsatzes ist es nun evident, wie man einen Funktionalkalkül für beschränkte Borelfunktionen definiert: Für $f \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$ ist $f \circ h$ ein beschränkter Multiplikationsoperator auf $L^2(\sigma(H), \mu)$ und man setzt $f(H) := U^{-1}f(h)U$. Wir müssen aber sicherstellen, dass dieser Kalkül den alten fortsetzt und nicht von der Wahl von μ abhängt.

4.26 Lemma. Sei A auf \mathcal{H} selbstadjungiert und $U : \mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}}$ unitär. Dann ist $\tilde{A} := UAU^{-1}$ auf $D(\tilde{A}) = UD(A)$ selbstadjungiert und es gilt für $f \in C_\infty(\mathbb{R})$, dass

$$Uf(A)U^{-1} = f(\tilde{A})$$

Beweis. Die erste Aussage ist Lemma 3.76. Sei $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ und $\tilde{\varphi} \in \tilde{\mathcal{H}}$. Da \tilde{A} selbstadjungiert ist, existiert ein $\tilde{\psi} \in D(\tilde{A})$ so, dass $\tilde{\varphi} = (\tilde{A} - z)\tilde{\psi} = U(A - z)U^{-1}\tilde{\psi}$. Dann gilt

$$U(A - z)^{-1}U^{-1}\tilde{\varphi} = U(A - z)^{-1}U^{-1}U(A - z)U^{-1}\tilde{\psi} = \tilde{\psi} = (\tilde{A} - z)^{-1}\tilde{\varphi}$$

und somit

$$U(A - z)^{-1}U^{-1} = (\tilde{A} - z)^{-1}.$$

Aus der Konstruktion des Funktionalkalküls folgt die Aussage für alle $f \in C_\infty(\mathbb{R})$. \square

4.27 Satz. Spektralsatz: Funktionalkalkül für beschränkte Borelfunktionen

Sei H selbstadjungiert und \mathcal{H} separabel. Dann gibt es einen Funktionalkalkül $f \mapsto f(H)$ auf $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$, dem Raum der beschränkten Borel-messbaren Funktionen von \mathbb{R} nach \mathbb{C} .

Dieser Funktionalkalkül erfüllt weiterhin

- (vi) Falls $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ in $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ punktweise gegen $f \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$ konvergiert und $\sup_{n \in \mathbb{N}} \|f_n\|_\infty < \infty$ ist, dann gilt $s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(H) = f(H)$.

Der Funktionalkalkül auf $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ ist durch die Eigenschaften (i)-(vi) eindeutig festgelegt.

Beweis. Die Existenz folgt sofort aus der Multiplikatorversion des Spektralsatzes, wenn wir

$$f(H) = U^{-1}f(h)U$$

setzen. Man prüft leicht nach, dass die Eigenschaften (i)-(v) eines Funktionalkalküls erfüllt sind. Wir zeigen zunächst (vi). Sei dazu $f_m \rightarrow f$ punktweise μ -fast-überall mit $\sup_{m \in \mathbb{N}} \|f_m\|_\infty < \infty$. Dann gilt mit dem Satz der dominierten Konvergenz für jedes $\psi \in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} \|[f_m(H) - f(H)]\psi\|^2 &= \|(f_m(h) - f(h))(U\psi)\|^2 \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\sigma(H)} |f_m(h(x)) - f(h(x))|^2 |U\psi(x, n)|^2 d\mu \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Dieser Funktionalkalkül stimmt wegen Lemma 4.26 mit dem auf $C_\infty(\mathbb{R})$ definierten überein. Die Eindeutigkeit folgt nun aus der Eindeutigkeit auf $C_\infty(\mathbb{R})$ und auf allen Funktionen, die sich als punktwiser Grenzwert gleichmäßig beschränkter Folgen in C_∞ schreiben lassen. Diese Menge ist genau $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$. Die eine Richtung sieht man leicht: Sei f_m eine gleichmäßig beschränkte Folge in C_∞ die punktweise gegen f konvergiert. Dann ist f ebenfalls beschränkt und als punktwiser Limes messbarer Funktionen selbst messbar, also in $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$. Die andere Richtung ist eine offensichtliche Konsequenz aus folgendem Korollar zum Satz von Lusin (vgl. Bauer, Maß- und Integrationstheorie, Satz 26.7).

4.28 Korollar. zum Satz von Lusin

Sei μ ein endliches Borelmaß auf \mathbb{R} und $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine Borel-messbare Funktion. Dann existiert eine Folge $f_m \in C_0(\mathbb{R})$ die punktweise μ -fast überall gegen f konvergiert und $\|f_m\|_\infty \leq \|f\|_\infty$ für alle $n \in \mathbb{N}$ erfüllt.

□

4.29 Korollar. zum Spektralsatz

Das Spektrum $\sigma(H)$ ist der wesentliche Bildbereich von h auf $L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu)$.

Beweis. Folgt aus dem Spektralsatz und Aufgabe 25.

□

4.30 Korollar. Norm der Resolvente

Für einen selbstadjungierten Operator H gilt

$$\|(H - z)^{-1}\| = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(H))}.$$

Beweis.

$$\|(H - z)^{-1}\| = \sup_{x \in \sigma(H)} |(x - z)^{-1}| = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(H))}.$$

□

4.31 Satz. Hauptsatz

Sei $(H, D(H))$ selbstadjungiert und $U(t) = e^{-iHt}$ durch den Funktionalkalkül definiert. Dann ist $U(t)$ eine stark-stetige unitäre Gruppe und ihr Erzeuger ist $(H, D(H))$.

4 Der Spektralsatz

Beweis. Die Gruppeneigenschaft sowie $U(t)^{-1} = U(-t) = U(t)^*$ folgen aus den Eigenschaften (i) und (ii) des Funktionalkalküls. Weiter gilt $e^{-ixt} \rightarrow 1$ punktweise für $t \rightarrow 0$ und $\|e^{-ixt}\|_\infty = 1$. Eigenschaft (vi) des Funktionalkalküls impliziert dann $s\text{-}\lim_{t \rightarrow 0} e^{-iHt} = \text{id}_{\mathcal{H}}$. Also ist $U(t)$ eine stark-stetige unitäre Gruppe.

Es bleibt noch zu zeigen, dass H die Gruppe $U(t)$ erzeugt. Sei dazu $V : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu)$ die im Spektralsatz konstruierte unitäre Diagonalisierung. Dann ist $U(t) = Ve^{-iht}V^*$ und es gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}U(t)\psi &= V \frac{d}{dt}e^{-iht}V^*\psi = -iVhe^{-iht}V^*\psi \in \mathcal{H} \Leftrightarrow hV^*\psi \in L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu) \\ &\Leftrightarrow \psi \in D(H). \end{aligned}$$

Somit ist H Erzeuger von $U(t)$. □

4.3 Ergänzungen: Stone, Ergodensatz, Trotter und Pfadintegrale

4.32 Satz. von Stone

Jede unitäre stark-stetige Gruppe $U(t)$ hat einen selbstadjungierten Erzeuger H , ist also von der Form $U(t) = e^{-iHt}$.

Beweis. Für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ und $\varphi \in \mathcal{H}$ sei

$$\varphi_f = \int f(t)U(t)\varphi dt$$

und

$$D = \text{Span} \{ \varphi_f \mid \varphi \in \mathcal{H}, f \in C_0^\infty \}.$$

Es liegt D dicht in \mathcal{H} , denn sei $j_\varepsilon(t) = \frac{1}{\varepsilon}j(\frac{t}{\varepsilon})$ für $0 \leq j \in C_0^\infty$ mit $\text{supp } j \subset [-1, 1]$ und $\int j(t)dt = 1$. Die starke Stetigkeit von $U(t)$ impliziert dann für jedes $\varphi \in \mathcal{H}$, dass

$$\|\varphi_{j_\varepsilon} - \varphi\| = \left\| \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} j_\varepsilon(t) (U(t)\varphi - \varphi) dt \right\| \leq \sup_{t \in [-\varepsilon, \varepsilon]} \|U(t)\varphi - \varphi\| \int j_\varepsilon(t) dt \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Wir zeigen nun, dass dieses D ein determinierender Bereich für den Erzeuger ist. Für $\varphi_f \in D$ ist

$$\begin{aligned} \frac{U(s) - \text{id}}{s} \varphi_f &= \int_{\mathbb{R}} f(t) \frac{U(t+s) - U(t)}{s} \varphi dt = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(r-s) - f(r)}{s} U(r) \varphi dr \\ &\xrightarrow{s \rightarrow 0} - \int_{\mathbb{R}} f'(r) U(r) dr = \varphi_{-f'}. \end{aligned}$$

Also setzen wir für $\varphi_f \in D$

$$H\varphi_f := \frac{1}{i} \varphi_{-f'} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - \text{id}}{it} \varphi_f.$$

Es gilt offensichtlich, dass $HD \subset D$, $U(t)D = D$ und $U(t)H\varphi_f = HU(t)\varphi_f$. Für $\varphi_f, \psi_g \in D$ ist

$$\langle \varphi_f, H\psi_g \rangle = \lim_{s \rightarrow 0} \left\langle \varphi_f, \frac{U(s) - \text{id}}{is} \psi_g \right\rangle = \lim_{s \rightarrow 0} \left\langle \frac{U(-s) - \text{id}}{-is} \varphi_f, \psi_g \right\rangle = \langle H\varphi_f, \psi_g \rangle,$$

also ist H symmetrisch.

Wir zeigen im nächsten Schritt, dass H auf D wesentlich selbstadjungiert ist. Sei $\psi \in \text{Ker}(H^* \pm i)$, dann gilt für $\varphi \in D$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi, U(t)\varphi \rangle = \langle \psi, -iHU(t)\varphi \rangle = \langle iH^*\psi, U(t)\varphi \rangle = \mp \langle \psi, U(t)\varphi \rangle.$$

Durch Lösen dieser Differentialgleichung erhalten wir einerseits

$$\langle \psi, U(t)\varphi \rangle = e^{\mp t} \langle \psi, U(0)\varphi \rangle = e^{\mp t} \langle \psi, \varphi \rangle \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R},$$

und wegen $\|U(t)\| = 1$ ist andererseits

$$|\langle \psi, U(t)\varphi \rangle| \leq \|\psi\| \|\varphi\| < \infty.$$

Also muss gelten $\langle \psi, \varphi \rangle = 0$ und H auf D ist wesentlich selbstadjungiert.

Es bleibt zu zeigen, dass der selbstadjungierte Operator \bar{H} tatsächlich die Gruppe $U(t)$ erzeugt. Dazu reicht es zu zeigen, dass $e^{-i\bar{H}t}$ und $U(t)$ auf einer dichten Teilmenge übereinstimmen. Sei also $\varphi \in D \subset \bar{D} := D(\bar{H})$. Dann ist $e^{-i\bar{H}t}\varphi \in \bar{D}$ und auch $U(t)\varphi \in D \subset \bar{D}$. Für $\psi(t) = (U(t) - e^{-i\bar{H}t})\varphi$ gilt somit

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -iHU(t)\varphi + i\bar{H}e^{i\bar{H}\psi(t)}\varphi = -i\bar{H}U(t)\varphi + i\bar{H}e^{i\bar{H}\psi(t)}\varphi = -i\bar{H}\psi(t).$$

Wegen $\psi(0) = 0$ und

$$\frac{d}{dt}\|\psi(t)\|^2 = i\langle \bar{H}\psi(t), \psi(t) \rangle - i\langle \psi(t), \bar{H}\psi(t) \rangle = 0$$

ist $\psi(t) = 0$ und $U(t) = e^{-i\bar{H}t}$ auf der dichten Teilmenge D . □

4.33 Satz. von Neumann's Ergodensatz

Sei H selbstadjungiert und λ ein Eigenwert von H mit spektraler Projektion P_λ , d.h. P_λ projiziert auf $\text{Ker}(H - \lambda)$. Dann gilt

$$P_\lambda = \text{s-lim}_{t_2-t_1 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} e^{-i(H-\lambda)t} dt.$$

Beweis. Es sei zunächst daran erinnert, dass für selbstadjungierte Operatoren aus $\text{Kern}(H^* \pm z) = \text{Bild}(H \pm \bar{z})^\perp$ folgt, dass $\text{Kern}(H \pm z) \oplus \text{Bild}(H \pm \bar{z}) = \mathcal{H}$.

Sei o.B.d.A. $\lambda = 0$, also $\mathcal{H} = \text{Kern}H \oplus \overline{\text{Bild}(H)}$.

(a) Sei $\varphi \in \text{Kern}H = P_0\mathcal{H}$. Dann ist $H\varphi = 0$ und $e^{-iHt}\varphi = \varphi$, also

$$\frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \underbrace{e^{-i(H-\lambda)t}}_{=1} \varphi dt = \varphi = P_0\varphi.$$

(b) Sei $\varphi \in \text{Bild}(H)$, also $\varphi = H\psi$ für ein $\psi \in D(H)$. Dann ist

$$e^{-iHt}\varphi = e^{-iHt}H\psi = i \frac{d}{dt} e^{-iHt}\psi$$

und damit

$$\frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} e^{-iHt}\varphi dt = \frac{i}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} e^{-iHt}\psi dt = \frac{i}{t_2 - t_1} \underbrace{(e^{-iHt_2} - e^{-iHt_1})\psi}_{\|\cdot\| \leq 2} \rightarrow 0 = P_0\varphi$$

(c) Ist schließlich $\varphi \in \overline{\text{Bild}(H)}$ und φ_n eine Folge in $\text{Bild}(H)$ mit $\varphi_n \rightarrow \varphi$, so gilt

$$\left\| \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} e^{-iHt}(\varphi - \varphi_n) dt \right\| \leq \|\varphi - \varphi_n\|$$

gleichmäßig in t_1, t_2 .

□

4.34 Satz. Trotter-Produktformel

Seien A und B selbstadjungiert und $A + B$ wesentlich selbstadjungiert auf $D(A) \cap D(B)$. Dann gilt für jedes $t \in \mathbb{R}$

$$e^{-i(A+B)t} = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} \right)^n .$$

Falls zusätzlich A und B von unten beschränkt sind, also $\langle \psi, A\psi \rangle \geq C\|\psi\|^2$ und $\langle \psi, B\psi \rangle \geq C\|\psi\|^2$ für ein $C \in \mathbb{R}$, dann gilt für jedes $t \in [0, \infty)$

$$e^{-(A+B)t} = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-A \frac{t}{n}} e^{-B \frac{t}{n}} \right)^n .$$

Beweis. Wir zeigen nur die erste Aussage unter der vereinfachenden Annahme, dass $A + B$ selbstadjungiert ist auf $D := D(A) \cap D(B)$. Das ist beispielsweise der Fall, wenn B A -beschränkt ist mit relativer Schranke kleiner eins.

Für $\psi \in D$ gilt

$$\frac{1}{s} (e^{-iAs} e^{-iBs} - 1) \psi = \frac{1}{s} (e^{-iAs} - 1) \psi + \frac{1}{s} e^{-iAs} (e^{-iBs} - 1) \psi \xrightarrow{s \rightarrow 0} -iA\psi - iB\psi$$

und

$$\frac{1}{s} \left(e^{-i(A+B)s} - 1 \right) \psi = -i(A + B)\psi ,$$

also

$$\lim_{s \rightarrow 0} K(s)\psi := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \left(e^{-iAs} e^{-iBs} - e^{-i(A+B)s} \right) \psi = 0 .$$

Offenbar gilt auch $\lim_{s \rightarrow \pm\infty} K(s)\psi = 0$. Da $s \mapsto K(s)\psi$ stetig ist, gilt $\sup_{s \in \mathbb{R}} \|K(s)\psi\| < \infty$ für jedes $\psi \in D$. Die Graphennorm $\|\cdot\|_{A+B}$ macht D zu einem Banachraum, da $A+B$ selbstadjungiert, also insbesondere abgeschlossen ist, und $K(s) : D \rightarrow \mathcal{H}$ ist ebenfalls beschränkt. Damit liefert das Prinzip der gleichmäßigen Beschränktheit (Satz von Banach-Steinhaus) aber, dass auch

$$\sup_{s \in \mathbb{R}} \|K(s)\|_{\mathcal{L}(D, \mathcal{H})} =: C < \infty$$

endlich ist. Insbesondere gilt dann $K(s)\psi \rightarrow 0$ für $s \rightarrow 0$ gleichmäßig auf jedem Kompaktum in D . Ein solches Kompaktum ist zu jedem $\psi \in D$ die Menge

$$\{e^{-is(A+B)}\psi \mid s \in [-1, 1]\} ,$$

da $s \mapsto e^{-is(A+B)} \in \mathcal{L}(D)$ stark stetig ist. Letzteres folgt aus

$$\lim_{s \rightarrow 0} \left\| \left((A + B)e^{-is(A+B)} - (A + B) \right) \psi \right\| = \lim_{s \rightarrow 0} \left\| \left(e^{-is(A+B)} - 1 \right) (A + B)\psi \right\| = 0 .$$

Insgesamt folgern wir also, dass für jedes $\psi \in D$

$$\frac{1}{t} \left(e^{-iAt} e^{-iBt} - e^{-i(A+B)t} \right) e^{-is(A+B)} \psi \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0 \tag{4.4}$$

gleichmäßig für $s \in [-1, 1]$. Damit können wir in

$$\begin{aligned} & \left(\left(e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} \right)^n - \left(e^{-i(A+B) \frac{t}{n}} \right)^n \right) \psi = \\ & = \sum_{k=0}^{n-1} \left(e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} \right)^k \left[e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} - e^{-i(A+B) \frac{t}{n}} \right] \left(e^{-i(A+B) \frac{t}{n}} \right)^{n-k-1} \psi \end{aligned}$$

die Norm der rechten Seite durch

$$|t| \max_{|s| < t} \left\| \left(\frac{t}{n} \right)^{-1} \left[e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} - e^{-i(A+B) \frac{t}{n}} \right] e^{-is(A+B)} \psi \right\|$$

beschränken. Mit (4.4) gilt also für jedes $\psi \in D$

$$\left(e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} \right)^n \psi \rightarrow e^{-i(A+B)t} \psi \quad \text{für } n \rightarrow \infty.$$

Da die Operatoren beschränkt sind und D dicht liegt, folgt die Aussage. \square

Wir erwähnen kurz zwei Beispiele, in denen die Trotter-Produktformel eine wichtige Rolle spielt.

4.35 Beispiel. Numerische Integration der Schrödingergleichung

Sei $H = H_0 + V$ auf $L^2(\mathbb{R}^d)$, dann ist ja

$$e^{-iH_0 t} = \mathcal{F}^{-1} e^{-i \frac{k^2}{2} t} \mathcal{F}$$

im Fourierraum ein Multiplikationsoperator und e^{-iVt} im Ortsraum ein Multiplikationsoperator. Die Fouriertransformation lässt sich durch die sogenannte FFT (fast Fourier transform) numerisch sehr effektiv implementieren, ebenso wie die Multiplikation mit Funktionen. Die Trotter-Produktformel liefert

$$e^{-iHt} \psi = \left(\mathcal{F}^{-1} e^{-i \frac{k^2}{2} \frac{t}{n}} \mathcal{F} e^{-iV \frac{t}{n}} \right)^n \psi + o(1) \quad \text{für } n \rightarrow \infty.$$

Für beschränktes H ist der Fehler sogar $\mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)$. Noch besser ist das sogenannte ‘‘Strang-Splitting’’, welches für beschränktes H

$$e^{-iHt} \psi = \left(e^{-iV \frac{t}{2n}} \mathcal{F}^{-1} e^{-i \frac{k^2}{2} \frac{t}{n}} \mathcal{F} e^{-iV \frac{t}{2n}} \right)^n \psi + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

liefert. Die rechte Seite lässt sich wie gesagt relativ leicht numerisch implementieren, da man immer nur abwechselnd FFT und Multiplikation mit einer Funktion anwendet. Dennoch konvergiert das Verfahren relativ schnell.

4.36 Beispiel. Das Pfadintegral in der Quantenmechanik

Sei $H = H_0 + V$ mit $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta$. Den Propagator approximieren wir wieder mit der Trotter-Produktformel gemäß

$$e^{-iHt} = \text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-iH_0 \frac{t}{n}} e^{-iV \frac{t}{n}} \right)^n.$$

Für den freien Propagator haben wir gezeigt (vgl. (2.5)), dass

$$(e^{-iH_0 t} \psi)(y_1) = \frac{1}{(2\pi i t)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i \frac{|y_1 - y_0|^2}{2t}} \psi(y_0) dy_0.$$

Also hat der Operator $\left(e^{-iH_0 \frac{t}{n}} e^{-iV \frac{t}{n}} \right)^n$ den Integralkern

$$\begin{aligned} K^{(n)}(y_0, y_n, t) &= \left(\frac{n}{2\pi i t} \right)^{\frac{nd}{2}} \int_{\mathbb{R}^d} dy_{n-1} \dots \int_{\mathbb{R}^d} dy_1 \left(e^{\frac{in}{2t} |y_n - y_{n-1}|^2} e^{-iV(y_{n-1}) \frac{t}{n}} \times \right. \\ &\quad \left. e^{\frac{in}{2t} |y_{n-1} - y_{n-2}|^2} e^{-iV(y_{n-2}) \frac{t}{n}} \dots e^{\frac{in}{2t} |y_1 - y_0|^2} e^{-iV(y_0) \frac{t}{n}} \right) \\ &=: \left(\frac{n}{2\pi i t} \right)^{\frac{nd}{2}} \int_{\mathbb{R}^{d(n-1)}} e^{iS(y_0, \dots, y_n, t)} dy_1 \dots dy_{n-1} \end{aligned}$$

4 Der Spektralsatz

mit

$$S(y_0, \dots, y_n, t) = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} |y_j - y_{j-1}|^2 \left(\frac{t}{n}\right)^{-1} - \sum_{j=1}^n V(y_{j-1}) \left(\frac{t}{n}\right).$$

Man kann nun $S(y_0, \dots, y_n, t)$ als die klassische Wirkung entlang eines polygonalen Weges auffassen: für einen glatten Weg $\gamma : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^d$ ist die klassische Wirkung $S(\gamma)$ das Funktional

$$S(\gamma) = \frac{1}{2} \int_0^t |\dot{\gamma}(s)|^2 ds - \int_0^t V(\gamma(s)) ds,$$

also $S(y_0, \dots, y_n, t)$ die Wirkung entlang des polygonalen Weges, der zur Zeit $\frac{jt}{n}$ durch den Punkt y_j geht.

Man erhält also einerseits den Integralkern $K(x, y, t)$ des vollen Propagators gemäß Trotter-Produktformel im Limes

$$K(x, y, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} K^{(n)}(x, y, t),$$

wobei die zugehörigen Operatoren stark konvergieren. Andererseits ist nun die Idee des Pfadintegrals, den Limes $n \rightarrow \infty$ als ein Integral über einen Raum Ω von stetigen Pfaden bezüglich eines geeigneten Maßes ω auf Ω zu interpretieren,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} K^{(n)}(x, y, t) \text{ "="} \int_{\Omega_{x,y,t}} e^{iS(\gamma)} d\omega(\gamma),$$

wobei $\Omega_{x,y,t}$ den Raum der stetigen Pfade $\gamma : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit $\gamma(0) = x$ und $\gamma(t) = y$ bezeichnet. Formal hat dieses Feynman'sche Pfadintegral viele Vorteile, insbesondere beim Aufstellen von Störungsreihen. Mathematisch macht der Ausdruck aber leider keinen Sinn, da ein solches Maß ω nicht existiert.

Ein auch mathematisch wohldefiniertes Pfadintegral existiert allerdings für den Integralkern $W(x, y, t)$ von e^{-tH} (ohne i im Exponenten!). In diesem Fall ist die ganz rechte Seite in

$$W(x, y, t) = \int_{\Omega_{x,y,t}} e^{-\int_0^t V(\gamma(s)) ds} \underbrace{e^{-\frac{1}{2} \int_0^t |\dot{\gamma}(s)|^2 ds}}_{:=d\mu(\gamma)} d\omega(\gamma) = \int_{\Omega_{x,y,t}} e^{-\int_0^t V(\gamma(s)) ds} d\mu(\gamma)$$

tatsächlich wohldefiniert, wobei μ das Wiener-Maß auf dem Raum der stetigen Pfade ist. Diese Formel heißt Feynmann-Kac-Formel und spielt eine wichtige Rolle z.B. in der statistischen Physik, wo man sich für $e^{-\beta H}$ mit β gleich der inversen Temperatur interessiert.

5 Spektralmaße und selbstadjungierte Operatoren in der Quantentheorie

5.1 Motivation. Wellenfunktion für N Teilchen

Wir erinnern uns, dass die Wellenfunktion für N Teilchen ohne Spin eine Funktion $\psi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C}$ auf dem Konfigurationsraum \mathbb{R}^{3N} für N Teilchen im \mathbb{R}^3 ist. Man hat also *eine* Wellenfunktion für *alle* Teilchen.

Wir wollen nun allgemein die Frage beantworten, wie man aus den “Zustandsräumen” \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 zweier getrennter Systeme den “Zustandsraum” für das gekoppelte System macht. Mathematisch gibt es verschiedene Möglichkeiten, aus zwei Hilberträumen einen neuen zu machen. Die *direkte Summe* ist der Hilbertraum $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ mit Skalarprodukt

$$\langle \varphi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2} = \langle (\varphi_1, \varphi_2), (\psi_1, \psi_2) \rangle := \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle_{\mathcal{H}_1} + \langle \varphi_2, \psi_2 \rangle_{\mathcal{H}_2}.$$

Es ist $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3)$ von der Form $\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$. Würde man die direkte Summe verwenden um Zustandsräume zusammenzuführen, so hätte man also bei zwei Teilchen dann eine Wellenfunktion pro Teilchen. Das ist wie oben erinnert falsch. Die korrekte Weise Zustandsräume zusammenzufassen liefert das *Tensorprodukt*.

5.1 Tensorprodukt und Spin

5.2 Definition. Tensorprodukt von zwei Vektoren

Für $\varphi_1 \in \mathcal{H}_1$ und $\varphi_2 \in \mathcal{H}_2$ heißt die anti-bilineare Abbildung

$$\varphi_1 \otimes \varphi_2 : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathbb{C}, \quad (\psi_1, \psi_2) \mapsto (\varphi_1 \otimes \varphi_2)(\psi_1, \psi_2) := \langle \psi_1, \varphi_1 \rangle_{\mathcal{H}_1} \cdot \langle \psi_2, \varphi_2 \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

das Tensorprodukt von φ_1 und φ_2 .

5.3 Lemma. Auf dem Raum der endlichen Linearkombinationen aller Tensorprodukte

$$\text{Span}^{\mathbb{C}}(\otimes) := \text{Span}^{\mathbb{C}}\{\varphi_1 \otimes \varphi_2 \mid \varphi_1 \in \mathcal{H}_1, \varphi_2 \in \mathcal{H}_2\}$$

wird durch

$$\left\langle \sum_j c_j \varphi_{1j} \otimes \varphi_{2j}, \sum_i d_i \psi_{1i} \otimes \psi_{2i} \right\rangle_{\otimes} := \sum_j \sum_i \bar{c}_j d_i \langle \varphi_{1j}, \psi_{1i} \rangle_{\mathcal{H}_1} \cdot \langle \varphi_{2j}, \psi_{2i} \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

ein Skalarprodukt definiert.

Beweis. Übungsaufgabe. □

5.4 Definition. Tensorprodukt von Hilberträumen

Seien \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 Hilberträume. Dann ist das Tensorprodukt $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ die Vervollständigung von $\text{Span}^{\mathbb{C}}(\otimes)$ unter der durch das Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\otimes}$ definierten Norm.

5.5 Satz. ONB auf dem Tensorprodukt

Seien (φ_k) und (ψ_l) Orthonormalbasen von \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 . Dann ist $(\varphi_k \otimes \psi_l)_{k,l \in \mathbb{N}}$ eine ONB von $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Beweis. Offenbar ist $(\varphi_k \otimes \psi_l)_{k,l \in \mathbb{N}}$ ein Orthonormalsystem. Wir zeigen nun, dass der Abschluss S von $\text{Span}^{\mathbb{C}}(\varphi_k \otimes \psi_l \mid k, l \in \mathbb{N})$ jeden Vektor $\varphi \otimes \psi$ mit $\varphi \in \mathcal{H}_1$ und $\psi \in \mathcal{H}_2$ enthält. Daraus folgt dann, dass S auch $\text{Span}^{\mathbb{C}}(\otimes)$ und somit dessen Abschluss $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ enthält.

Seien dazu

$$\varphi = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \varphi_k, \quad \psi = \sum_{l=1}^{\infty} \beta_l \psi_l,$$

und setze

$$\varphi(N) := \sum_{k=1}^N \alpha_k \varphi_k, \quad \psi(N) = \sum_{l=1}^N \beta_l \psi_l.$$

Dann ist $\varphi(N) \otimes \psi(N) = \sum_{k,l=1}^N \alpha_k \beta_l \varphi_k \otimes \psi_l \in \text{Span}^{\mathbb{C}}(\varphi_k \otimes \psi_l \mid k, l \in \mathbb{N})$ und

$$\begin{aligned} \|\varphi \otimes \psi - \varphi(N) \otimes \psi(N)\|_{\otimes}^2 &= \langle \varphi \otimes \psi - \varphi(N) \otimes \psi(N), \varphi \otimes \psi - \varphi(N) \otimes \psi(N) \rangle \\ &= \|\varphi\|^2 \|\psi\|^2 + \|\varphi(N)\|^2 \|\psi(N)\|^2 - 2\text{Re}\langle \varphi(N), \varphi \rangle \langle \psi(N), \psi \rangle \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

□

5.6 Beispiel. Es ist $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$ in natürlicher Weise isomorph zu $L^2(\mathbb{R}^{n+m})$, indem wir $\varphi \otimes \psi \in L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^m)$ mit $\varphi(x)\psi(y) \in L^2(\mathbb{R}^{n+m})$ identifizieren.

Der Hilbertraum für N -Teilchen ist also

$$L^2(\mathbb{R}^{3N}) = \bigotimes_{j=1}^N L^2(\mathbb{R}^3).$$

Beweis. Satz von Fubini. □

5.7 Beispiel. Teilchen mit Spin

Ein einzelnes Teilchen mit Spin $\frac{d-1}{2}$, wobei $d \in \mathbb{N}$ ist, wird durch eine \mathbb{C}^d -wertige Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^d$ in $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^d)$ beschrieben. Die physikalische Interpretation der Wellenfunktion ändert sich nicht: weiterhin ist

$$\|\psi(x)\|^2 = \sum_{j=1}^d |\psi_j(x)|^2$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort des Teilchens. Das Teilchen hat also keinen Spin im gleichen Sinne wie es einen Ort hat. Vielmehr wird die Ortsverteilung durch eine Spinorwertige Wellenfunktion beschrieben.

Nach Wahl einer Basis $(e_j)_{j=1, \dots, d}$ von \mathbb{C}^d können wir $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^d)$ in der Form

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_d(x) \end{pmatrix} \in \bigoplus_{j=1}^d L^2(\mathbb{R}^3)$$

schreiben. Also ist

$$L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^d) \cong \bigoplus_{j=1}^d L^2(\mathbb{R}^3).$$

Andererseits liefert für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $v \in \mathbb{C}^d$ die Zuordnung

$$\psi \otimes v \mapsto \psi(x)v$$

eine natürliche Isomorphie zwischen $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^d$ und $L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^d)$.

Schließlich hat ein System aus N Teilchen mit Spin $\frac{d-1}{2}$ eine Wellenfunktion in

$$\bigotimes_{j=1}^N L^2(\mathbb{R}^3; \mathbb{C}^d) \cong \bigotimes_{j=1}^N (L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^d) \cong \bigotimes_{j=1}^N L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \bigotimes_{j=1}^N \mathbb{C}^d \cong L^2(\mathbb{R}^{3N}) \otimes \mathbb{C}^{d^N} \cong L^2(\mathbb{R}^{3N}; \mathbb{C}^{d^N}).$$

5.2 Projektor-wertige Maße und positive-Operatoren-wertige Maße

5.8 Motivation. Modellierung eines idealisierten Experiments

Ein quantenmechanisches „System“, an dem eine „Messung“ durchgeführt werden soll, habe den Konfigurationsraum \mathbb{R}_x^n . Der „Messapparat“ und die „Umgebung“ haben den Konfigurationsraum \mathbb{R}_y^m . Typischerweise ist $n \approx 10, \dots, 100$ und $m \approx 10^{23}$. Man sagt deshalb, das System sei mikroskopisch und der Apparat makroskopisch.

Wir nehmen an, dass der Anfangszustand in $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_x^n \times \mathbb{R}_y^m)$ ein Produktzustand $\Psi_0(x, y) = \varphi_\alpha(x)\Phi_0(y)$ ist. Hier ist φ_α ein möglicher Anfangszustand des Systems und Φ_0 der Anfangszustand der Messapparatur.

Das Experiment ist nun so konzipiert, dass die unitäre Zeitentwicklung $U(t)$ des Gesamtsystems bestimmte Anfangszustände φ_α des zu messenden Systems in Endzustände Ψ_α des Gesamtsystems überführt, an denen man das „Ergebnis“ gut ablesen kann. Das heißt, der Träger von Ψ_α enthält Konfigurationen y des Apparats (z.B. eine Zeigerstellung), aus denen man einen bestimmten Messwert λ_α ablesen kann. Das Experiment ist also so gebaut, dass ein Anfangszustand φ_α zu dem Messergebnis λ_α führt:

$$\begin{array}{ccc} \text{Anfangszustand bei } t = 0 & \text{Zeitentwicklung} & \text{Endzustand bei } t = T \\ \varphi_\alpha(x)\Phi_0(y) & \xrightarrow{U(T)} & \Psi_\alpha(x, y). \end{array}$$

Starten wir mit einer allgemeinen Wellenfunktion $\varphi = \sum_\alpha c_\alpha \varphi_\alpha$ für das System, so ergibt sich aus der Linearität von $U(T)$

$$\begin{array}{ccc} \text{Anfangszustand bei } t = 0 & \text{Zeitentwicklung} & \text{Endzustand bei } t = T \\ \sum_\alpha c_\alpha \varphi_\alpha(x)\Phi_0(y) & \xrightarrow{U(T)} & \Psi_\varphi(x, y) = \sum_\alpha c_\alpha \Psi_\alpha(x, y). \end{array}$$

Wir erhalten also als Ergebnis einen Zustand, dessen y -Träger makroskopisch verschiedene Zeigerstellungen enthält. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die tatsächliche Konfiguration $Y(T)$ des Apparats erhalten wir wieder aus dem Quadrat der Wellenfunktion. Sei $\Lambda_\alpha \subset \mathbb{R}^m$ das Gebiet im Konfigurationsraum des Apparats, in welchem die Konfiguration einer makroskopischen Zeigerstellung auf den Wert λ_α entspricht. Nach Konstruktion des Experiments hat Ψ_α Träger in $\mathbb{R}^n \times \Lambda_\alpha$ und wegen $\Lambda_\alpha \cap \Lambda_\beta = \emptyset$ für $\alpha \neq \beta$ folgt $\langle \Psi_\alpha, \Psi_\beta \rangle = 0$. Die Wahrscheinlichkeit einen bestimmten Wert λ_β abzulesen ist also

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\lambda_\beta | \varphi) &:= \mathbb{P}^{\Psi_\varphi}(Y(T) \in \Lambda_\beta) = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\Lambda_\beta} |\Psi_\varphi(x, y)|^2 dy dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\Lambda_\beta} \left| \sum_\alpha c_\alpha \Psi_\alpha(x, y) \right|^2 dy dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\Lambda_\beta} |c_\beta|^2 |\Psi_\beta(x, y)|^2 dy dx = |c_\beta|^2. \end{aligned}$$

Wir haben hier natürlich vorausgesetzt, dass φ_α , Φ_0 , φ und somit auch Ψ_α jeweils in L^2 auf 1 normiert sind.

Definieren wir nun die Projektion P_β durch $P_\beta\varphi = \langle \varphi_\beta, \varphi \rangle \varphi_\beta$, so ist

$$\mathbb{P}(\lambda_\beta|\varphi) = |c_\beta|^2 = |\langle \varphi_\beta, \varphi \rangle|^2 = \|P_\beta\varphi\|^2 = \langle \varphi, P_\beta\varphi \rangle.$$

Da die Ψ_α orthogonal sind, müssen auch die φ_α orthogonal sein. Damit sind die Projektionen P_α paarweise orthogonal. Für den Erwartungswert des Messergebnisses λ ergibt sich dann

$$\mathbb{E}(\lambda|\varphi) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \mathbb{P}(\lambda_{\alpha}|\varphi) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \langle \varphi, P_{\alpha}\varphi \rangle = \left\langle \varphi, \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} P_{\alpha}\varphi \right\rangle =: \langle \varphi, A\varphi \rangle$$

mit dem linearen Operator $A := \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} P_{\alpha}$. Sind die λ_{α} reell, dann ist A ein selbstadjungierter Operator mit Spektrum $\sigma(A) = \sigma_p(A) = \{\lambda_{\alpha}\}$. Die möglichen Messwerte sind also die Eigenwerte des Operators A und der Erwartungswert des Messwertes läßt sich kompakt mit Hilfe des Operators schreiben. Man rechnet leicht nach, dass unter den beschriebenen Bedingungen sogar

$$\mathbb{E}(\lambda^n|\varphi) = \langle \varphi, A^n\varphi \rangle$$

gilt.

Wir haben gesehen, dass die Wahrscheinlichkeiten in einem idealisierten quantenmechanischen Experiment durch eine Familie von orthogonalen Projektionen P_{α} beschrieben werden. Der selbstadjungierte „Buchhalteoperator“ $A = \sum \lambda_{\alpha} P_{\alpha}$ erlaubt es weiterhin, bequem den Erwartungswert und auch die höheren Momente der Verteilung zu berechnen. Deshalb nennt man die selbstadjungierten Operatoren in der Quantenmechanik auch „Observablen“. Allerdings sollten mehrere Punkte jetzt schon klar sein: nicht jeder selbstadjungierte Operator entspricht einem tatsächlich durchführbaren Experiment; es kann verschiedene Experimente geben, die durch den selben Operator beschrieben werden; nicht jedes Experiment erfüllt die Annahmen, die zu unserem Ergebnis geführt haben.

5.9 Motivation. Modellierung eines allgemeinen quantenmechanischen Experiments

Wir wollen nun versuchen, das obige Argument zu abstrahieren und mit minimalen Annahmen, die wir präzise formulieren können, auszukommen. Sei $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ der Hilbertraum des Gesamtsystems und $\mathcal{H}_2 = L^2(C)$ der Hilbertraum des Apparats (plus Umgebung etc.), dessen Konfigurationsraum C sei. Wir machen folgende Annahmen:

- (1) Der Anfangszustand bei $t = 0$ hat die Form $\Psi(0) = \varphi \otimes \Phi_0$.
- (2) Die Zeitentwicklung $U(T)$ des Gesamtsystems ist unitär.
- (3) Die Bornsche statistische Interpretation gilt.
- (4) Das „Messergebnis“ $\lambda \in \Omega$ lässt sich aus der Konfiguration $Y(T)$ des Apparats am Ende der Messung ablesen, ist also eine messbare Funktion $f : C \rightarrow \Omega$ der Konfiguration $Y(T)$ zum Zeitpunkt $t = T$.

Hier ist Ω die Menge der möglichen Messergebnisse, wobei z.B. auch der Fall vorkommen kann, dass ein Element von Ω dafür steht, dass kein numerischer Wert herauskam und das Experiment schiefging. Die Funktion f ist eine „Vergrößerung“ (coarse graining) des Konfigurationsraums des Apparats, welche mikroskopische Konfigurationen auf makroskopisch unterscheidbare „Zeigerstellungen“ abbildet.

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Ergebnis λ in einer Menge $\Delta \subset \Omega$ liegt, ist

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\lambda \in \Delta) &= \mathbb{P}^{\Psi(T)}(Y(T) \in f^{-1}(\Delta)) = \langle \Psi(T), \chi_{f^{-1}(\Delta)} \Psi(T) \rangle_{\mathcal{H}} \\ &= \langle U(T)\Psi(0), \chi_{f^{-1}(\Delta)} U(T)\Psi(0) \rangle_{\mathcal{H}} \\ &= \langle \varphi \otimes \Phi_0, U(T)^{-1} \chi_{f^{-1}(\Delta)} U(T)(\varphi \otimes \Phi_0) \rangle_{\mathcal{H}} \\ &=: Q_{\Delta}(\varphi, \varphi). \end{aligned}$$

Es ist $Q_\Delta(\varphi, \varphi)$ offenbar eine beschränkte positive quadratische Form. Mit dem nachfolgenden Satz 5.10 gibt es einen eindeutigen positiven beschränkten Operator $E(\Delta) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$ so, dass

$$Q_\Delta(\varphi, \varphi) = \langle \varphi, E(\Delta)\varphi \rangle.$$

Die Abbildung $\Delta \mapsto E(\Delta)$ hat die Eigenschaften eines Maßes: für jedes $\varphi \in \mathcal{H}_1$ ist $\Delta \mapsto \langle \varphi, E(\Delta)\varphi \rangle$ ein Maß und deshalb nennt man $E(\Delta)$ ein positive-Operatoren-wertiges Maß (POVM). Man kann auch im allgemeinen Fall den Erwartungswert des Experiments mit Hilfe eines selbstadjungierten Operators beschreiben,

$$\mathbb{E}(\lambda|\varphi) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \langle \varphi, E(\lambda_{\alpha})\varphi \rangle = \left\langle \varphi, \underbrace{\sum \lambda_{\alpha} E(\lambda_{\alpha})}_{=:A} \varphi \right\rangle,$$

nicht aber die höheren Momente, da im Allgemeinen

$$\mathbb{E}(\lambda^n|\varphi) \neq \langle \varphi, A^n \varphi \rangle.$$

Wir werden im Folgenden zeigen, dass es eine bijektive Zuordnung zwischen Projektor-wertigen Maßen und selbstadjungierten Operatoren gibt. Dies ist eine weitere Version des Spektralsatzes und der mathematische Grund dafür, warum sich die Statistik eines idealisierten Experiments in einem einzigen selbstadjungierten Operator, der ‘‘Observable’’, kodieren läßt. Die Statistik eines allgemeinen Experiments wird durch ein positive-Operatoren-wertiges Maß gegeben, welches nicht eindeutig aus einem selbstadjungierten Operator gewonnen werden kann. Bevor wir diese Dinge nun mathematisch klären, zunächst noch ein Nachtrag.

5.10 Satz. Beschränkte Bilinearformen und die zugehörigen Operatoren

Sei $B : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ eine stetige Sesquilinearform, d.h. für alle $\varphi, \psi, \chi \in \mathcal{H}$ und $\alpha \in \mathbb{C}$ gilt:

- (i) $B(\varphi, \alpha\psi + \chi) = \alpha B(\varphi, \psi) + B(\varphi, \chi)$
- (ii) $B(\alpha\psi + \chi, \varphi) = \bar{\alpha} B(\psi, \varphi) + B(\chi, \varphi)$
- (iii) Es gibt ein $C < \infty$ mit $|B(\varphi, \psi)| \leq C \|\varphi\| \|\psi\|$.

Dann gibt es einen eindeutigen beschränkten linearen Operator $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ so, dass

$$B(\varphi, \psi) = \langle \varphi, A\psi \rangle_{\mathcal{H}} \quad \text{für alle } \varphi, \psi \in \mathcal{H}.$$

Beweis. Übungsaufgabe. Man verwende Satz 3.39. □

5.11 Definition. Positive-Operatoren-wertiges Maß (POVM)

Sei $\Lambda \subset \mathbb{R}^n$ messbar und $\mathcal{B}(\Lambda)$ die Borel- σ -Algebra. Eine Abbildung $E : \mathcal{B}(\Lambda) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt positive-Operatoren-wertiges Maß (POVM), falls es die folgenden Eigenschaften hat:

- (i) $E(A)$ ist positiv für jedes $A \in \mathcal{B}(\Lambda)$
- (ii) $E(\Lambda) = \text{id}_{\mathcal{H}}$ und $E(\emptyset) = 0$
- (iii) Für jede Folge $(A_j)_{j \in \mathbb{N}}$ paarweise disjunkter Mengen in $\mathcal{B}(\Lambda)$ gilt

$$E\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = \text{s-} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N E(A_j).$$

5.12 Bemerkung. Zur Integration von POVMs

Für $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$ liefert ein POVM E ein zugehöriges endliches Borelmaß

$$\mu_{\varphi}^E(A) := \langle \varphi, E(A)\varphi \rangle$$

und ein komplexes endliches Borelmaß

$$\mu_{\varphi,\psi}^E(A) := \langle \varphi, E(A)\psi \rangle.$$

Wegen der Polarisationsidentität 3.6 ist

$$\mu_{\varphi,\psi}^E = \frac{1}{4} (\mu_{\varphi+\psi}^E - \mu_{\varphi-\psi}^E + i\mu_{\varphi-i\psi}^E - i\mu_{\varphi+i\psi}^E)$$

und damit ist auch klar, wie man bezüglich eines komplexen bzw. signierten Maßes zu integrieren hat. Insbesondere können wir für jede beschränkte Funktion $f \in \mathfrak{B}(\Lambda)$ den Operator $\int_{\Lambda} f dE$ über

$$\left\langle \varphi, \int_{\Lambda} f dE \psi \right\rangle := \int_{\Lambda} f d\mu_{\varphi,\psi}^E$$

definieren. Die rechte Seite ist offenbar eine symmetrische Sesquilinearform. Wir zeigen, dass sie auch beschränkt ist. Gemäß Satz 5.10 definiert sie daher den zugehörigen Operator $\int_{\Lambda} f dE$.

Sei f zunächst nicht-negativ, also $f \geq 0$ und $f_n = \sum_{j=1}^n f_j^{(n)} \chi_{A_j^{(n)}}$ eine uniform beschränkte Folge einfacher Funktionen mit $A_j^{(n)} \cap A_i^{(n)} = \emptyset$ für alle $j \neq i$, die punktweise monoton gegen f konvergiert. Dann ist

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda} f d\mu_{\psi,\psi}^E &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Lambda} f_n d\mu_{\psi,\psi}^E = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n f_j^{(n)} \langle \psi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle \leq \|f\|_{\infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi, \sum_{j=1}^n E(A_j^{(n)})\psi \rangle \\ &\leq \|f\|_{\infty} \|\psi\|^2. \end{aligned}$$

Mit der Cauchy-Schwarz Ungleichung für die positiv semi-definite Sesquilinearform $\int_{\Lambda} f d\mu_{\varphi,\psi}^E$ folgt dann auch ihre Beschränktheit,

$$\left| \int_{\Lambda} f d\mu_{\varphi,\psi}^E \right| \leq \left(\int_{\Lambda} f d\mu_{\varphi,\varphi}^E \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\Lambda} f d\mu_{\psi,\psi}^E \right)^{\frac{1}{2}} \leq \|f\|_{\infty} \|\varphi\| \|\psi\|.$$

Komplexwertige Funktionen f zerlegt man wie üblich in Real- und Imaginärteil und dann jeweils weiter in Positiv- und Negativteil.

5.13 Definition. Projektor-wertiges Maß (PVM)

Ein POVM E mit der Eigenschaft, dass $E(A)$ für jedes $A \in \mathcal{B}(\Lambda)$ eine orthogonale Projektion ist, also

$$E(A)^2 = E(A)$$

erfüllt, heißt Projektor-wertiges Maß (PVM).

5.14 Bemerkung. Ein POVM E ist genau dann ein PVM, wenn für alle $A, B \in \mathcal{B}(\Lambda)$ gilt, dass

$$E(A)E(B) = E(A \cap B).$$

Insbesondere gilt also für PVMs, dass

$$\mu_{E(B)\varphi,\psi}^E(A) = \mu_{\varphi,\psi}^E(A \cap B). \quad (5.1)$$

Beweis. Übungsaufgabe. □

5.15 Beobachtung. (a) Sei E ein POVM und $f \in \mathfrak{B}(\Lambda)$ reellwertig. Dann ist der Operator $\int_{\Lambda} f dE$ selbstadjungiert, denn aus $\overline{\mu_{\varphi,\psi}^E} = \mu_{\psi,\varphi}^E$ folgt

$$\begin{aligned} \left\langle \varphi, \int_{\Lambda} f dE \psi \right\rangle &= \int_{\Lambda} f d\mu_{\varphi,\psi}^E = \overline{\int_{\Lambda} \bar{f} d\mu_{\psi,\varphi}^E} = \overline{\int_{\Lambda} f d\mu_{\psi,\varphi}^E} \\ &= \overline{\langle \psi, \int_{\Lambda} f dE \varphi \rangle} = \left\langle \int_{\Lambda} f dE \varphi, \psi \right\rangle. \end{aligned}$$

(b) Umgekehrt liefert jeder selbstadjungierte Operator H ein PVM auf $\Lambda = \sigma(H)$, indem man

$$E^H(A) := \chi_A(H)$$

setzt, also die spektrale Projektion auf $A \subset \sigma(H)$. Der Funktionalkalkül liefert sofort, dass dies tatsächlich ein PVM definiert:

- $\chi_A(H)$ ist eine orthogonale Projektion.
- $\chi_{\sigma(H)}(H) = \text{id}_{\mathcal{H}}$ und $\chi_{\emptyset}(H) = 0$
- Es gilt für paarweise disjunkte $A_j \in \mathcal{B}(\sigma(H))$, dass $\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N \chi_{A_j} = \chi_{\cup_{j=1}^{\infty} A_j}$ punktweise und monoton. Somit gilt

$$\text{s-} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N \chi_{A_j}(H) = \chi_{\cup_{j=1}^{\infty} A_j}(H).$$

5.16 Proposition. Funktionalkalkül aus PVM

Sei H selbstadjungiert und $E^H(A) = \chi_A(H)$ das zugehörige PVM. Dann liefert Integration bezüglich E^H wieder den (eindeutigen) Funktionalkalkül: für $f \in \mathfrak{B}(\sigma(H))$ gilt

$$f(H) = \int f \, dE^H.$$

Beweis. Es genügt, die Aussage für einfache Funktionen f zu zeigen, also für $f = \sum_{j=1}^N \alpha_j \chi_{A_j}$.

$$\begin{aligned} \left\langle \varphi, \int f \, dE^H \psi \right\rangle &= \int f \, d\mu_{\varphi, \psi}^{E^H} = \sum_{j=1}^N \alpha_j \mu_{\varphi, \psi}^{E^H}(A_j) \\ &= \sum_{j=1}^N \alpha_j \langle \varphi, \chi_{A_j}(H) \psi \rangle = \left\langle \varphi, \sum_{j=1}^N \alpha_j \chi_{A_j}(H) \psi \right\rangle = \langle \varphi, f(H) \psi \rangle. \end{aligned}$$

Für $f \in \mathfrak{B}(\sigma(H))$ folgt die Aussage dann durch Approximation, wobei man auf der einen Seite Eigenschaft (vi) des Funktionalkalküls verwendet und auf der anderen den Satz der dominierten Konvergenz. \square

Es liegt nun nahe, zu einem PVM auf $\Lambda \subset \mathbb{R}$ den zugehörigen Operator durch

$$H = \int_{\Lambda} \lambda \, dE^H$$

zu definieren. Ist Λ beschränkt, so haben wir in 5.15 (a) bereits gesehen, dass dies einen selbstadjungierten Operator definiert. Für unbeschränkten Λ müssen wir noch etwas arbeiten.

5.17 Satz. Spektralsatz: PVM-Version

Sei \mathcal{H} ein separabler Hilbertraum. Dann gibt es eine eins-zu-eins Korrespondenz zwischen selbstadjungierten Operatoren H auf \mathcal{H} und Projektor-wertigen Maßen $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ auf \mathcal{H} . Genauer gilt:

- (i) Sei H selbstadjungiert, dann ist $E^H(A) := \chi_A(H)$ ein PVM und es gilt für $\varphi \in D(H)$ und $\psi \in \mathcal{H}$, dass

$$\langle \psi, H\varphi \rangle = \int_{\sigma(H)} \lambda \, d\mu_{\psi, \varphi}^{E^H}.$$

(ii) Ist umgekehrt ein PVM $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ gegeben und sei

$$D(H) := \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int |\lambda|^2 d\mu_{\psi,\psi}^E < \infty \right\},$$

dann wird durch

$$\langle \psi, H\varphi \rangle := \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{\psi,\varphi}^E \quad \text{für } \varphi, \psi \in D(H), \quad (5.2)$$

ein selbstadjungierter Operator auf $D(H)$ definiert. Es gilt $\chi_A(H) = E(A)$ für alle $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Beweis. Die einzige Aussage in (i) die wir noch nicht bewiesen haben, ist $\langle \psi, H\varphi \rangle = \int_{\sigma(H)} \lambda d\mu_{\psi,\varphi}^{E^H}$. Das folgt aber, sobald wir (ii) gezeigt haben.

Zunächst zeigen wir, dass $D(H)$ ein dichter Teilraum ist. Sei dazu $f_n(\lambda) = \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(n)} \chi_{A_j^{(n)}}$ eine Folge einfacher Funktionen, die punktweise monoton gegen $f(\lambda) = \lambda$ konvergiert. Für $\psi, \varphi \in D(H)$ gilt dann mit dem Satz der monotonen Konvergenz

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_{\varphi+\psi,\varphi+\psi}^E &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} f_n^2(\lambda) d\mu_{\varphi+\psi,\varphi+\psi}^E \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n (\lambda_j^{(n)})^2 \langle \varphi + \psi, E(A_j^{(n)})(\varphi + \psi) \rangle \\ &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n (\lambda_j^{(n)})^2 \left(\langle \varphi, E(A_j^{(n)})\varphi \rangle + \langle \psi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle + 2|\langle \varphi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle| \right) \\ &\leq \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_{\varphi,\varphi}^E + \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_{\psi,\psi}^E + 2 \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n (\lambda_j^{(n)})^2 \langle \varphi, E(A_j^{(n)})\varphi \rangle^{\frac{1}{2}} \langle \psi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle^{\frac{1}{2}} \\ &< \infty, \end{aligned}$$

da mit Cauchy-Schwarz im \mathbb{R}^n

$$\begin{aligned} &\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n (\lambda_j^{(n)})^2 \langle \varphi, E(A_j^{(n)})\varphi \rangle^{\frac{1}{2}} \langle \psi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{j=1}^n (\lambda_j^{(n)})^2 \langle \varphi, E(A_j^{(n)})\varphi \rangle \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j=1}^n (\lambda_j^{(n)})^2 \langle \psi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_{\varphi,\varphi}^E \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\mu_{\psi,\psi}^E \right)^{\frac{1}{2}} < \infty. \end{aligned}$$

Also ist $\varphi + \psi \in D(H)$ und $D(H)$ ist ein Unterraum. Er ist auch dicht, da für $\psi \in \mathcal{H}$ der Vektor $\psi_n := E([-n, n])\psi$ in $D(H)$ liegt und wegen Definition 5.11 (iii) gilt $s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} E([-n, n]) = \text{id}_{\mathcal{H}}$. Um zu sehen, dass das Integral $\int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{\psi,\varphi}^E$ für $\varphi, \psi \in D(H)$ endlich ist, erinnern wir uns an die Zerlegung

$$\mu_{\psi,\varphi}^E = \frac{1}{4} (\mu_{\psi+\varphi}^E - \mu_{\psi-\varphi}^E + i\mu_{\psi-i\varphi}^E - i\mu_{\psi+i\varphi}^E)$$

und stellen fest, dass für $\phi \in \{\psi + \varphi, \psi - \varphi, \psi + i\varphi, \psi - i\varphi\}$ gilt $\phi \in D(H)$ und somit

$$\int_{\mathbb{R}} |\lambda| d\mu_{\phi,\phi}^E \leq \langle \phi, E([-1, 1])\phi \rangle + \int_{\mathbb{R}} |\lambda|^2 d\mu_{\phi,\phi}^E < \infty.$$

Schließlich liefert dominierte Konvergenz, dass

$$\begin{aligned}
 \left| \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{\psi,\varphi}^E \right| &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \int f_n d\mu_{\psi,\varphi}^E \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(n)} \underbrace{\mu_{\psi,\varphi}^E(A_j^{(n)})}_{\langle E(A_j^{(n)})\psi, E(A_j^{(n)})\varphi \rangle} \right| \\
 &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n |\lambda_j^{(n)}| \|E(A_j^{(n)})\psi\| \|E(A_j^{(n)})\varphi\| \\
 &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{j=1}^n \underbrace{\|E(A_j^{(n)})\psi\|^2}_{\langle \psi, E(A_j^{(n)})\psi \rangle} \right)^{1/2} \left(\sum_{j=1}^n |\lambda_j^{(n)}|^2 \|E(A_j^{(n)})\varphi\|^2 \right)^{1/2} \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi\| \left(\int |f_n|^2 \mu_{\varphi,\varphi}^E \right)^{1/2} = \|\psi\| \left(\int |\lambda|^2 \mu_{\varphi,\varphi}^E \right)^{1/2}.
 \end{aligned}$$

Also ist $\psi \mapsto \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{\psi,\varphi}^E$ für $\varphi \in D(H)$ ein beschränktes Funktional und durch (5.2) wird ein (mit dem selben Argument wie in 5.15) symmetrischer Operator auf $D(H)$ definiert.

Um schließlich die Selbstadjungiertheit von H zu folgern, zeigen wir $\text{Bild}(H \pm i) = \mathcal{H}$. Sei also $\psi \in \mathcal{H}$ und setze

$$\varphi := \int_{\mathbb{R}} (\lambda + i)^{-1} dE \psi.$$

Wir zeigen gleich, dass für jedes $\phi \in \mathcal{H}$

$$d\mu_{\phi,\varphi}^E = (\lambda + i)^{-1} d\mu_{\phi,\psi}^E \quad \text{und} \quad d\mu_{\varphi,\varphi}^E = (\lambda^2 + 1)^{-1} d\mu_{\psi,\psi}^E \quad (5.3)$$

gilt. Daraus folgt dann sofort, dass für jedes $\phi \in \mathcal{H}$ gilt

$$\langle \phi, (H + i)\varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} (\lambda + i) d\mu_{\phi,\varphi}^E = \int_{\mathbb{R}} d\mu_{\phi,\psi}^E = \langle \phi, \psi \rangle,$$

also $(H + i)\varphi = \psi$. Somit ist H selbstadjungiert.

Um (5.3) zu zeigen, sei $f \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$ und $f_n = \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(n)} \chi_{A_j^{(n)}}$ eine gleichmäßig beschränkte Folge einfacher Funktionen die punktweise gegen f konvergiert. Dann ist mit (5.1)

$$\langle \phi, E(A)\varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} (\lambda + i)^{-1} d\mu_{E(A)\phi,\psi}^E = \int_A (\lambda + i)^{-1} d\mu_{\phi,\psi}^E$$

also

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}} f d\mu_{\phi,\varphi}^E &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n d\mu_{\phi,\varphi}^E = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(n)} \langle \phi, E(A_j^{(n)})\varphi \rangle \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(n)} \int_{A_j^{(n)}} (\lambda + i)^{-1} d\mu_{\phi,\psi}^E = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} f_n (\lambda + i)^{-1} d\mu_{\phi,\psi}^E \\
 &= \int_{\mathbb{R}} f (\lambda + i)^{-1} d\mu_{\phi,\psi}^E.
 \end{aligned}$$

Die zweite Gleichung in (5.3) folgt analog. □

5.3 Spektralmaße und das Langzeitverhalten unitärer Gruppen

5.18 Definition. Spektralmaß

Sei H selbstadjungiert und $\psi \in \mathcal{H}$. Dann heißt $\mu_\psi^H : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow [0, \infty)$ mit

$$\mu_\psi^H(A) := \mu_{\psi, \psi}^{E^H} = \langle \psi, \chi_A(H)\psi \rangle$$

das Spektralmaß von H zu ψ .

5.19 Bemerkung. zur Klassifikation von Maßen

Seien μ und ν Maße auf (Ω, \mathcal{A}) und $P = \{x \in \Omega \mid \mu(\{x\}) \neq 0\}$. Dann heißt

$$\mu_{\text{pp}}(A) := \mu(P \cap A)$$

der Punktmaßanteil von μ und $\mu_{\text{cont}} = \mu - \mu_{\text{pp}}$ der stetige Anteil von μ .

- (i) Es heißt μ ein Punktmaß, falls $\mu = \mu_{\text{pp}}$.
- (ii) Es heißt μ absolutstetig bezüglich ν , falls es ein $f \in L^1(\Omega, \nu)$ gibt mit $\mu = f\nu$.
- (iii) Es heißt μ singulär bezüglich ν , falls es eine Menge $S \subset \Omega$ gibt mit $\mu(S) = 0$ und $\nu(\Omega \setminus S) = 0$.

5.20 Satz. Zerlegungssatz von Lebesgue

Zu zwei σ -endlichen Maßen μ und ν gibt eine eindeutige Zerlegung

$$\mu = \mu_{\text{ac}} + \mu_{\text{sing}}$$

so, dass μ_{ac} absolutstetig bezüglich ν ist und μ_{sing} singulär bezüglich ν ist.

Beweis. Siehe z.B. Bauer, Maß- und Integrationstheorie, Satz 17.13. □

5.21 Folgerung. Zerlegung von Borelmaßen auf \mathbb{R}

Da jedes Punktmaß auf \mathbb{R} offensichtlich singulär bezüglich des Lebesguemaßes ist, können wir jedes Borelmaß μ auf \mathbb{R} eindeutig zerlegen in

$$\mu = \mu_{\text{ac}} + \mu_{\text{sing}} = \mu_{\text{ac}} + \mu_{\text{pp}} + \mu_{\text{sc}},$$

wobei die erste Zerlegung bzgl. des Lebesguemaßes ist und wir den singulärstetigen Anteil durch $\mu_{\text{sc}} := \mu_{\text{sing}} - \mu_{\text{pp}}$ definieren.

5.22 Definition. Spektrale Teilräume

Sei H selbstadjungiert. Es seien

- (i) $\mathcal{H}_{\text{pp}}(H) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \mu_\psi^H \text{ ist ein Punktmaß}\}$
- (ii) $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \mu_\psi^H \text{ ist absolutstetig bezüglich des Lebesgue-Maßes}\}$
- (iii) $\mathcal{H}_{\text{sc}}(H) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \mu_\psi^H \text{ ist singulärstetig bezüglich des Lebesgue-Maßes}\}$

5.23 Satz. Spektrale Zerlegung des Hilbertraums

$\mathcal{H}_{\text{pp}}, \mathcal{H}_{\text{ac}}$ und \mathcal{H}_{sc} sind abgeschlossene unter H invariante Teilräume und es gilt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{pp}} \oplus \mathcal{H}_{\text{ac}} \oplus \mathcal{H}_{\text{sc}}.$$

Die Projektion P_{xx} auf \mathcal{H}_{xx} ist durch $\chi_{M_{\text{xx}}}(H)$ für ein geeignetes $M_{\text{xx}} \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ gegeben (wobei $\text{xx} \in \{\text{pp}, \text{ac}, \text{sc}\}$).

5.3 Spektralmaße und das Langzeitverhalten unitärer Gruppen

Beweis. Sei μ ein Maß aus Satz 4.22 auf $\sigma(H) \times \mathbb{N}$ und $\mu_n = \mu_{n,ac} + \mu_{n,pp} + \mu_{n,sc}$ die entsprechende Zerlegung von μ_n . Sei $M_{pp} := \{x \in \mathbb{R} \mid \mu_n(\{x\}) \neq 0 \text{ für ein } n \in \mathbb{N}\}$, $M_{ac} := \bigcap_{n=1}^{\infty} S_n$ und $M_{sc} := \sigma(H) \setminus (M_{pp} \cup M_{ac})$, wobei S_n die entsprechende Menge aus 5.19 (iii) zu μ_n ist. Es gilt

$$\mu_{n,xx}(A) = \mu_{n,xx}(A \cap M_{xx}) \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}$$

und mit $\mu_{xx}|_{\sigma(H) \times \{n\}} := \mu_{n,xx}$ ergibt sich

$$L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu) = L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu_{pp}) \oplus L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu_{ac}) \oplus L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu_{sc}).$$

Es bleibt zu zeigen, dass $U^{-1}L^2(\sigma(H) \times \mathbb{N}, \mu_{xx}) = \mathcal{H}_{xx}$. Sei dazu $\psi \in \mathcal{H}$, also $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(H)v_n$, dann gilt

$$\begin{aligned} \mu_{\psi}^H(A) &= \langle \psi, \chi_A(H)\psi \rangle = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} f_n(H)v_n, \chi_A(H) \sum_{n=1}^{\infty} f_n(H)v_n \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle v_n, |f_n|^2 \chi_A v_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_A |f_n|^2 d\mu_n. \end{aligned}$$

Also ist $\mu_{\psi}^H = \mu_{\psi,xx}^H$ genau dann wenn $f_n = \chi_{M_{xx}} f_n$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Offensichtlich ist \mathcal{H}_{xx} invariant unter H , da sich der Träger von f_n bei Multiplikation mit $(x-z)^{-1}$ nicht ändert. \square

5.24 Definition. Man unterteilt das Spektrum in die Teile

Punktspektrum	$\sigma_{pp}(H) = \sigma(H _{\mathcal{H}_{pp}})$
Absolutstetiges Spektrum	$\sigma_{ac}(H) = \sigma(H _{\mathcal{H}_{ac}})$
Singulärstetiges Spektrum	$\sigma_{sc}(H) = \sigma(H _{\mathcal{H}_{sc}})$

Es gilt offenbar

$$\sigma(H) = \sigma_{pp}(H) \cup \sigma_{ac}(H) \cup \sigma_{sc}(H)$$

wobei die verschiedenen Teile im Allgemeinen nicht disjunkt sind. (Jeder Teil $\sigma_{xx}(H)$ ist abgeschlossen und es gilt $\sigma_{xx}(H) = \overline{M_{xx}}$.)

Weiterhin ist

$$\sigma_{pp}(H) = \overline{\sigma_p(H)}$$

wobei $\sigma_p(H)$ die Menge der Eigenwerte von H ist (vgl. Definition 3.97) und es gilt

$$\overline{\sigma_c(H)} = \sigma_{ac}(H) \cup \sigma_{sc}(H).$$

5.25 Bemerkung. Die spektralen Unterräume spielen in der Physik eine wichtige Rolle. Zustände (d.h. Elemente) in \mathcal{H}_{pp} sind Linearkombinationen von Eigenvektoren und bleiben „lokalisiert“ und Zustände in $\mathcal{H}_c = \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sc}$ propagieren und „laufen ins Unendliche“.

5.26 Beispiel. Das Spektrum vom $-\Delta$

Das Spektrum von $H_0 = -\Delta$ ist $\sigma(H_0) = \sigma_{ac}(H_0) = [0, \infty)$, da in Fourierdarstellung $H_0 = |k|^2$ ist: für jedes $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ gilt

$$\begin{aligned} \mu_{\psi}(A) &= \langle \widehat{\psi}, \chi_A(|k|^2)\widehat{\psi} \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \chi_A(|k|^2) |\widehat{\psi}(k)|^2 d^n k \\ &= \int_{|k|^2 \in A} |k|^{n-1} d|k| \int_{S^{n-1}} |\widehat{\psi}(|k|, \omega)|^2 d\omega = \int_{A \cap [0, \infty)} d\kappa \underbrace{2\kappa^{\frac{n}{2}} \int_{S^{n-1}} |\widehat{\psi}(\sqrt{\kappa}, \omega)|^2 d\omega}_{=: f^{\psi}(\kappa) \in L^1(\mathbb{R}^n)}. \end{aligned}$$

5 Spektralmaße und selbstadjungierte Operatoren in der Quantentheorie

Also ist μ_ψ absolutstetig bezüglich des Lebesgue-Maßes.

Wir haben bereits gezeigt, dass die Lösungen der freien Schrödingergleichung „zerfließen“, also nicht lokalisiert bleiben. Eine schwache Version dieser Aussage wäre, dass für alle $\varphi, \psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$|\langle \varphi, e^{-iH_0 t} \psi \rangle| = \left| \int \bar{\hat{\varphi}}(k) e^{-i|k|^2 t} \hat{\psi}(k) d^n k \right| = \left| \int e^{-i\kappa t} f_{\varphi, \psi}(\kappa) d\kappa \right| \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0,$$

was sofort aus dem Lemma von Riemann-Lebesgue folgt.

5.27 Bemerkung. Für allgemeines selbstadjungiertes H gilt

$$\langle \varphi, e^{-iHt} \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} d\mu_{\varphi, \psi}^H =: \hat{\mu}_{\varphi, \psi}^H(t).$$

Die rechte Seite ist die Fouriertransformierte des komplexen Maßes $\mu_{\varphi, \psi}^H$. Die Idee ist nun, analog zu Riemann-Lebesgue für stetige Maße den Abfall der Fouriertransformierten zu zeigen.

5.28 Satz. Satz von Wiener

Sei μ ein endliches komplexes Borel-Maß auf \mathbb{R} und

$$\hat{\mu}(t) := \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} d\mu(\lambda)$$

die Fouriertransformierte von μ . Dann hat das Cesaro-Zeitmittel von $|\hat{\mu}(t)|^2$ den Limes

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\hat{\mu}(t)|^2 dt = \sum_{\lambda \in \mathbb{R}} |\mu(\{\lambda\})|^2$$

wobei die Summe endlich oder abzählbar ist.

Beweis. Mit dem Satz von Fubini gilt

$$\frac{1}{T} \int_0^T |\hat{\mu}(t)|^2 dt = \frac{1}{T} \int_0^T \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} e^{-it(x-y)} d\mu(x) d\bar{\mu}(y) dt = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \underbrace{\frac{1}{T} \int_0^T e^{-it(x-y)} dt}_{\rightarrow \chi_{\{0\}}(x-y)} d\mu(x) d\bar{\mu}(y).$$

Mit dem Satz der dominierten Konvergenz folgt also

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\hat{\mu}(t)|^2 dt &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \chi_{\{0\}}(x-y) d\mu(x) d\bar{\mu}(y) = \int_{\mathbb{R}} \mu(\{y\}) d\bar{\mu}(y) = \int_P \mu(\{y\}) d\bar{\mu}(y) \\ &= \sum_{y \in P} \mu(\{y\}) \bar{\mu}(\{y\}) = \sum_{y \in \mathbb{R}} |\mu(\{x\})|^2 \end{aligned}$$

wobei $P = \{x \in \mathbb{R} \mid \mu(\{x\}) \neq 0\}$. □

5.29 Korollar. Sei H selbstadjungiert und $\psi \in \mathcal{H}_c(H) := \mathcal{H}_{ac}(H) \oplus \mathcal{H}_{sc}(H) = \mathcal{H}_{pp}(H)^\perp$. Dann gilt für jedes $\varphi \in \mathcal{H}$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\langle \varphi, e^{-iHt} \psi \rangle|^2 dt = 0,$$

es „geht also $e^{-iHt} \psi$ im Zeitmittel schwach gegen 0“.

Beweis. Da

$$|\langle \varphi, e^{-iHt}\psi \rangle|^2 = |\widehat{\mu}_{\varphi,\psi}(t)|^2$$

ist, müssen wir zeigen, dass $\mu_{\varphi,\psi}$ ein stetiges Maß ist, also $\mu(\{x\}) = 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$. Dazu stellen wir zunächst fest, dass für $\psi \in \mathcal{H}_{xx}$ und $\varphi \in \mathcal{H}$ gilt

$$\begin{aligned} \mu_{\varphi,\psi}(A) &= \langle \varphi, \chi_A(H)\psi \rangle = \langle \varphi, \chi_A(H)\chi_{M_{xx}}(H)\psi \rangle = \langle \varphi, \chi_{M_{xx}}(H)\chi_A(H)\psi \rangle \\ &= \langle \chi_{M_{xx}}(H)\varphi, \chi_A(H)\psi \rangle = \mu_{P_{xx}\varphi,\psi}(A). \end{aligned}$$

Wir können also o.B.d.A. annehmen, dass auch $\varphi \in \mathcal{H}_c$ gilt. Mit der Polarisationsidentität

$$\mu_{\varphi,\psi}(A) = \frac{1}{4} (\mu_{\varphi+\psi}(A) - \mu_{\varphi-\psi}(A) + i\mu_{\varphi-i\psi}(A) - i\mu_{\varphi+i\psi}(A))$$

folgt dann, dass $\mu_{\varphi,\psi}$ stetig ist. □

Sei $F \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ vom endlichem Rang n und $(\varphi_j)_{j=1}^n$ eine ONB von $\text{Bild}(F)$, dann ist

$$F\psi = \sum_{j=1}^n \langle \varphi_j, F\psi \rangle \varphi_j = \sum_{j=1}^n \langle \psi_j, \psi \rangle \varphi_j$$

wobei $\psi_j = F^*\varphi_j$ ist. Damit gilt für $\psi \in \mathcal{H}_c$ auch

$$\frac{1}{T} \int_0^T \|Fe^{-iHt}\psi\|^2 dt = \sum_{j=1}^n \frac{1}{T} \int_0^T |\langle \psi_j, e^{-iHt}\psi \rangle|^2 dt \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0.$$

Falls wir schließlich einen Operator $K \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ durch eine Folge (F_n) von Operatoren mit endlichem Rang approximieren können (also z.B. $\|F_n - K\| \leq \frac{1}{n}$), so gilt wieder für $\psi \in \mathcal{H}_c$ und jedes $\varepsilon > 0$, dass

$$\frac{1}{T} \int_0^T \|Ke^{-iHt}\psi\|^2 dt \leq \frac{1}{T} \int_0^T \|F_n e^{-iHt}\psi\|^2 dt + \underbrace{\frac{1}{T} \int_0^T \overbrace{\|F_n - K\|^2}^{\leq \frac{1}{n}} \|\psi\|^2 dt}_{< \varepsilon/2 \text{ für } n \text{ groß genug}} < \varepsilon$$

für T groß genug, also

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|Ke^{-iHt}\psi\|^2 dt = 0.$$

5.30 Definition. Kompakter Operator

Ein Operator $T \in \mathcal{L}(V, W)$ zwischen normierten Räumen V und W heißt *kompakt*, falls er beschränkte Mengen auf relativ kompakte Mengen (also Mengen deren Abschluss kompakt ist) abbildet.

Die Menge aller kompakten Operatoren bezeichnen wir mit $\mathcal{K}(V, W)$.

5.31 Bemerkung. Ist $T \in \mathcal{K}(V)$ und $S \in \mathcal{L}(V)$, so sind ST und TS wieder kompakt, da beschränkte Operatoren sowohl kompakte Mengen auf kompakte Mengen, als auch beschränkte Mengen auf beschränkte Mengen abbilden.

5.32 Beispiel. Die linearen Operatoren von endlichem Rang, also mit endlich-dimensionalem Bild, sind kompakt. Denn beschränkte Mengen in endlich-dimensionalen normierten Räumen sind nach dem Satz von Heine-Borel relativ-kompakt.

5.33 Satz. über den Raum der kompakten Operatoren

Für Banachräume V, W ist $\mathcal{K}(V, W)$ ein abgeschlossener Teilraum von $\mathcal{L}(V, W)$ und damit selbst ein Banachraum.

In separablen *Hilberträumen* gilt

$$\mathcal{K}(\mathcal{H}) = \overline{\mathcal{F}(\mathcal{H})}^{\|\cdot\|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})}}$$

wobei $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ den Raum der Operatoren mit endlichem Rang bezeichnet.

5.34 Definition. Relativ-kompakte Operatoren

Sei $(H, D(H))$ selbstadjungiert auf \mathcal{H} . Dann heißt ein Operator $(A, D(A))$ mit $D(H) \subset D(A)$ relativ-kompakt bezüglich H oder kurz H -kompakt, wenn es ein $z \in \rho(H)$ gibt so, dass $A(H-z)^{-1}$ kompakt ist.

5.35 Bemerkung. Mit der Resolventenformel und Bemerkung 5.31 folgt, dass für einen H -kompakten Operator A der Operator $A(H-z)^{-1}$ für alle $z \in \rho(H)$ kompakt ist.

Weiterhin ist ein H -kompakter symmetrischer Operator A auch infinitesimal H -beschränkt.

5.36 Satz. Sei H selbstadjungiert und K relativ kompakt bezüglich H . Dann gilt für jedes $\psi \in D(H)$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|Ke^{-iHt}P_c\psi\|^2 dt = 0$$

und

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \|Ke^{-iHt}P_{ac}\psi\| = 0.$$

Ist K beschränkt, so gelten die Aussagen für alle $\psi \in \mathcal{H}$.

Beweis. Für $\psi \in D(H)$ ist $P_c\psi \in D(H) \cap \mathcal{H}_c$ und für $\varphi := (H+i)\psi \in \mathcal{H}_c$ folgt aus der Kompaktheit von $K(H+i)^{-1}$ und den vorausgegangenen Ergebnissen, dass

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|K(H+i)^{-1}e^{-iHt}\varphi\|^2 dt = 0.$$

Ist K beschränkt, so approximieren wir $\psi \in \mathcal{H}$ durch eine Folge ψ_n in $D(H)$ mit $\|\psi - \psi_n\| \leq \frac{1}{n}$ und verwenden

$$\|Ke^{-iHt}\psi\| \leq \|Ke^{-iHt}\psi_n\| + \frac{1}{n}\|K\|.$$

Die zweite Aussage folgt analog aus

$$\langle \varphi, e^{-iHt}P_{ac}\psi \rangle = \int e^{-i\lambda t} d\mu_{\varphi, P_{ac}\psi}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} f_{\varphi, \psi}(\lambda) d\lambda \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$$

mit Hilfe des Riemann-Lebesgue-Lemmas. □

5.37 Proposition. Seien $f, g \in C_\infty(\mathbb{R}^n)$ und $f(x)$ die Multiplikation mit f auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ und $g(p) = \mathcal{F}^{-1}g\mathcal{F}$. Dann sind die Operatoren $g(p)f(x)$ und $f(x)g(p)$ kompakt.

Beweis. Für $f, g \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist

$$(f(x)g(p)\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int \underbrace{f(x)\check{g}(x-y)}_{=:K(x,y)} \psi(y) dy.$$

5.3 Spektralmaße und das Langzeitverhalten unitärer Gruppen

Es ist $K(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n) = L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^n)$ und lässt sich somit bezüglich jeder ONB $\psi_j \otimes \varphi_i$ darstellen als

$$K(x, y) = \lim_{N \rightarrow \infty} \underbrace{\sum_{i,j=1}^N \alpha_{ij} \psi_j(x) \otimes \varphi_i(y)}_{=: K_N(x, y)},$$

wobei hier Konvergenz in L^2 gemeint ist. Es ist $K_N(x, y)$ der Kern eines Operators mit endlichem Rang,

$$K_N \psi = \sum_{i,j=1}^N \alpha_{ij} \langle \varphi_i, \psi \rangle \psi_j.$$

Nun liefert die L^2 -Konvergenz der Integralkerne die Konvergenz der Operatoren in der Operatornorm, denn mit Cauchy-Schwarz gilt

$$\begin{aligned} \|K\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 &= \int \left| \int K(x, y) \psi(y) dy \right|^2 dx \leq \int \left(\int |K(x, y) \psi(y)| dy \right)^2 dx \\ &\leq \int \|K(x, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 dx = \|K\|_{L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)}^2 \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2. \end{aligned}$$

Für $f, g \in C_\infty(\mathbb{R}^n)$ approximieren wir f und g gleichmäßig durch

$$f_n := \chi_{B_n(0)} f \quad \text{und} \quad g_n := \chi_{B_n(0)} g.$$

Dann gilt

$$\|f(x)g(p) - f_n(x)g_n(p)\| \leq \|f\|_\infty \|g(p) - g_n(p)\| + \|g\|_\infty \|f(x) - f_n(x)\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Da $\mathcal{K}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$ abgeschlossen ist, ist $f(x)g(p)$ ebenfalls kompakt. \square

5.38 Bemerkung. Hilbert-Schmidt-Operatoren

Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ mit Integralkern $K(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ heißen Hilbert-Schmidt-Operatoren und sind wie oben gezeigt immer kompakt.

5.39 Beispiel. Sei $f \in C_\infty(\mathbb{R}^n)$, dann ist f als Multiplikationsoperator auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ relativkompakt bezüglich $H_0 = -\Delta$, da $(H_0 + i)^{-1} = \frac{1}{p^2 + i}$ gilt.

Für die freie Zeitentwicklung $e^{-iH_0 t}$ gilt also

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|f(x) e^{-iH_0 t} \psi\| = 0 \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_{ac} \text{ und } f \in C_\infty(\mathbb{R}^n),$$

d.h. die Lösungen der freien Schrödingergleichung verlassen jedes beschränkte Gebiet. Hier verwenden wir allerdings nur noch die H_0 -Kompaktheit von $f(x)$ und nicht mehr die explizite Kenntnis von $e^{-iH_0 t}$. Deshalb liegt es nahe, diese Aussage auf Schrödingeroperatoren mit Potential zu verallgemeinern.

5.40 Proposition. Zweite Resolventenformel

Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ als Multiplikationsoperator H_0 -beschränkt mit relativer Schranke kleiner 1 und $H = H_0 + V$ die nach Kato-Rellich auf $D(H) = D(H_0)$ selbstadjungierte Operatorsumme. Dann gilt für $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ die zweite Resolventenformel,

$$(H_0 - z)^{-1} - (H - z)^{-1} = (H_0 - z)^{-1} V (H - z)^{-1},$$

und für jedes $f \in C_\infty(\mathbb{R}^n)$ ist $f(x)$ relativkompakt bezüglich H .

5 Spektralmaße und selbstadjungierte Operatoren in der Quantentheorie

Beweis. Die zweite Resolventenformel rechnet man direkt nach. Für $f \in C_\infty$ gilt daher

$$f(H - z)^{-1} = \underbrace{f(H_0 - z)^{-1}}_{\text{kompakt}} - \underbrace{f(H_0 - z)^{-1}}_{\text{kompakt}} \underbrace{V(H - z)^{-1}}_{\text{beschränkt}}$$

und mit Bemerkung 5.31 ist auch $f(H - z)^{-1}$ kompakt. \square

5.41 Bemerkung. Insgesamt gilt also für $H = H_0 + V$ mit H_0 -beschränktem V mit relativer Schranke kleiner 1, dass für jedes $f \in C_\infty$ und $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|f(x)e^{iHt} P_c \psi\|^2 dt = 0$$

und

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|f(x)e^{-iHt} P_{ac} \psi\| = 0.$$

Auch in diesem allgemeineren Fall verlassen also Zustände aus dem stetigen Spektrum zumindest im Zeitmittel jedes beschränkte Gebiet.

Der folgende Satz zeigt, dass man die spektralen Teilräume ganz allgemein über das Langzeitverhalten der Gruppen charakterisieren kann.

5.42 Satz. RAGE-Theorem

Sei H selbstadjungiert und sei K_n eine gleichmäßig beschränkte Folge H -kompakter Operatoren mit

$$s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} K_n = \text{id}_{\mathcal{H}}.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_c &= \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|K_n e^{-iHt} \psi\| dt = 0 \right\} \\ \mathcal{H}_{pp} &= \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in \mathbb{R}} \|(\text{id} - K_n) e^{-iHt} \psi\| = 0 \right\}. \end{aligned}$$

Beweis. Sei $\psi(t) = e^{-iHt} \psi$. Für $\psi \in \mathcal{H}_c$ ist mit Cauchy-Schwarz

$$\frac{1}{T} \int_0^T \|K_n \psi(t)\| dt \leq \left(\frac{1}{T} \int_0^T \|K_n \psi(t)\|^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0.$$

Da sich $\psi \in \mathcal{H}_{pp}$ durch normierte Eigenvektoren φ_j , also $H\varphi_j = \lambda_j \varphi_j$, darstellen läßt,

$$\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \varphi_j,$$

und somit

$$\psi(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j e^{-i\lambda_j t} \varphi_j,$$

gilt in diesem Fall

$$\begin{aligned} \|(K_n - \text{id})\psi(t)\| &\leq \left\| (K_n - \text{id}) \sum_{j=1}^N \alpha_j e^{-i\lambda_j t} \varphi_j \right\| + \left\| (K_n - \text{id}) \sum_{j=N+1}^{\infty} \alpha_j e^{-i\lambda_j t} \varphi_j \right\| \\ &\leq \underbrace{\sum_{j=1}^N |\alpha_j| \|(K_n - \text{id})\varphi_j\|}_{< \varepsilon/2 \text{ für } n \text{ groß genug}} + \underbrace{\|(K_n - \text{id})\| \left(\sum_{j=N+1}^{\infty} |\alpha_j|^2 \right)^{\frac{1}{2}}}_{< \varepsilon/2 \text{ für } N \text{ groß genug}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

5.3 Spektralmaße und das Langzeitverhalten unitärer Gruppen

Hier wählt man natürlich zuerst N und dann n . Führen wir die Bezeichnungen

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_c &:= \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|K_n e^{-iHt} \psi\| dt = 0 \right\} \\ \mathcal{U}_{pp} &:= \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in \mathbb{R}} \|(\text{id} - K_n) e^{-iHt} \psi\| = 0 \right\}\end{aligned}$$

ein, so haben wir jetzt $\mathcal{H}_c \subset \mathcal{U}_c$ und $\mathcal{H}_{pp} \subset \mathcal{U}_{pp}$ gezeigt. Es sind \mathcal{U}_c und \mathcal{U}_{pp} Unterräume und für $\psi \in \mathcal{U}_{pp}$ mit $\psi \neq 0$ gilt offenbar

$$\|K_n e^{-iHt} \psi\| \geq \frac{1}{2} \|\psi\|$$

für n groß genug, also $\psi \notin \mathcal{U}_c$. Daher ist $\mathcal{U}_c \cap \mathcal{U}_{pp} = \{0\}$. Daraus folgt schon $\mathcal{H}_{pp} = \mathcal{U}_{pp}$ und $\mathcal{H}_c = \mathcal{U}_c$: Angenommen es gibt ein $\psi \in \mathcal{U}_{pp} \setminus \mathcal{H}_{pp}$, dann wäre in der eindeutigen Aufspaltung $\psi = \psi_{pp} + \psi_c$ bezüglich $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{pp} \oplus \mathcal{H}_c$ also $\psi_c \in \mathcal{U}_{pp}$, im Widerspruch zu $\mathcal{H}_c \cap \mathcal{U}_{pp} \subset \mathcal{U}_c \cap \mathcal{U}_{pp} = \{0\}$. \square

6 Streutheorie

In der Streutheorie untersucht man das Langzeitverhalten unitärer Gruppen e^{-iHt} genauer. Insbesondere möchte man verstehen, inwieweit die Zeitentwicklung für große Zeiten durch eine einfachere “freie” Vergleichsdynamik e^{-iH_0t} approximiert werden kann.

Als einfachstes physikalisches Beispiel sollte man dabei immer die Potentialstreuung im Kopf haben: dann ist $H_0 = -\Delta$ auf $L^2(\mathbb{R}^d)$ und $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ein Potential welches im Unendlichen verschwindet, also $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |V(x)| = 0$ erfüllt. Wir haben bereits gezeigt, dass in diesem Fall für $\psi \in \mathcal{H}_{ac}$ gilt, dass

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|f(x)e^{-iHt}\psi\| = 0,$$

die Lösung also jedes beschränkte Gebiet verläßt. Es liegt also nahe zu vermuten, dass $e^{-iHt}\psi$ für große Zeiten durch eine Lösung der freien Schrödingergleichung approximiert werden kann. Man sagt dann, dass die Dynamik asymptotisch frei ist.

Die Frage ist also, für welche $\psi \in \mathcal{H}$ es jeweils $\psi_+ \in \mathcal{H}$ und $\psi_- \in \mathcal{H}$ gibt so, dass

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|e^{-iHt}\psi - e^{-iH_0t}\psi_{\pm}\| = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\psi - e^{iHt}e^{-iH_0t}\psi_{\pm}\| = 0.$$

6.1 Wellenoperatoren und Streumatrix

6.1 Definition. Wellenoperator

Seien H_0 und H selbstadjungiert. Dann sind die *Wellenoperatoren* Ω_{\pm} auf

$$D(\Omega_{\pm}) := \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}\psi \text{ existiert} \right\}$$

durch

$$\Omega_{\pm}\psi = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}\psi$$

definiert.

Es ist $D(\Omega_{\pm})$ die Menge der aus- bzw. einlaufenden Asymptoten und das Bild der Wellenoperatoren ist die Menge derjenigen Vektoren, die sich asymptotisch gemäß e^{-iH_0t} in die jeweilige Zeitrichtung entwickeln.

Vektoren die freie Asymptoten in beiden Zeitrichtungen besitzen, also in $\text{Bild}(\Omega_-) \cap \text{Bild}(\Omega_+)$ liegen, nennt man *Streuzustände*.

Ein Hauptziel der mathematischen Streutheorie ist es zu zeigen, dass alle Zustände in $\mathcal{H}_{pp}(H)^{\perp}$ Streuzustände sind.

6.2 Lemma. Die Räume $D(\Omega_{\pm})$ und $\text{Bild}(\Omega_{\pm})$ sind abgeschlossen und die Abbildungen

$$\Omega_{\pm} : D(\Omega_{\pm}) \rightarrow \text{Bild}(\Omega_{\pm})$$

sind unitär.

6 Streutheorie

Beweis. Für $\psi \in D(\Omega_{\pm})$ gilt

$$\|\Omega_{\pm}\psi\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{iHt}e^{-iH_0t}\psi\| = \|\psi\|,$$

womit Ω_{\pm} isometrisch ist. Damit ist Ω_{\pm} insbesondere beschränkt und eindeutig auf $\overline{D(\Omega_{\pm})}$ zu $\overline{\Omega_{\pm}}$ fortsetzbar. Sei nun $\psi \in \overline{D(\Omega_{\pm})}$ und (ψ_n) eine Folge in $D(\Omega_{\pm})$ mit $\psi_n \rightarrow \psi$. Dann gilt mit $e(t) := e^{iHt}e^{-iH_0t}$, dass

$$\begin{aligned} \|e(t)\psi - \overline{\Omega_{\pm}}\psi\| &\leq \|e(t)\psi - e(t)\psi_n\| + \|e(t)\psi_n - \Omega_{\pm}\psi_n\| + \|\Omega_{\pm}\psi_n - \overline{\Omega_{\pm}}\psi\| \\ &= \underbrace{\|\psi - \psi_n\|}_{< \frac{\varepsilon}{3} \text{ für } n \text{ groß genug}} + \underbrace{\|e(t)\psi_n - \Omega_{\pm}\psi_n\|}_{< \frac{\varepsilon}{3} \text{ für } t \text{ groß genug}} + \underbrace{\|\Omega_{\pm}\psi_n - \overline{\Omega_{\pm}}\psi\|}_{< \frac{\varepsilon}{3} \text{ für } n \text{ groß genug}} < \varepsilon. \end{aligned}$$

Also gilt $\psi \in D(\Omega_{\pm})$ und somit ist $D(\Omega_{\pm})$ abgeschlossen. Die Isometrieeigenschaft von Ω_{\pm} impliziert, dass auch $\text{Bild}\Omega_{\pm}$ abgeschlossen ist. \square

6.3 Bemerkung. Die “intertwining relation”

Wegen

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}(e^{-iH_0s}\psi) = e^{-iHs} \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iH(s+t)}e^{-iH_0(s+t)}\psi$$

gilt die *intertwining relation*

$$\Omega_{\pm}e^{-iH_0s}\psi = e^{-iHs}\Omega_{\pm}\psi \quad \text{für alle } \psi \in D(\Omega_{\pm}).$$

Insbesondere sind damit $D(\Omega_{\pm})$ und $D(\Omega_{\pm})^{\perp}$ invariant unter der freien Zeitentwicklung e^{-iH_0t} , und $\text{Bild}(\Omega_{\pm})$ und $\text{Bild}(\Omega_{\pm})^{\perp}$ sind invariant unter der vollen Zeitentwicklung e^{-iHt} .

Differenziert man die intertwining relation, so ergibt sich

$$\Omega_{\pm}H_0 = H\Omega_{\pm} \quad \text{auf } D(H_0) \cap D(\Omega_{\pm}).$$

Damit sind die Operatoren

$$\left(H_0 \Big|_{D(\Omega_{\pm})}, D(\Omega_{\pm}) \cap D(H_0)\right) \quad \text{und} \quad \left(H \Big|_{\text{Bild}(\Omega_{\pm})}, D(H) \cap \text{Bild}(\Omega_{\pm})\right)$$

unitär äquivalent.

6.4 Beispiel. Ist $H_0 = -\Delta$ und $H = H_0 + V$, dann wissen wir, dass H_0 rein absolut-stetiges Spektrum hat. Damit ist $\text{Bild}(\Omega_{\pm}) \subset \mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$. Die Streuzustände liegen also auf jeden Fall in $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$.

6.5 Definition. Streuoperator oder die Streumatrix

Die Streumatrix bzw. der Streuoperator S ist auf

$$D(S) = \{\psi \in D(\Omega_-) \mid \Omega_- \psi \in \text{Bild}(\Omega_+)\}$$

gegeben durch

$$S := \Omega_+^{-1}\Omega_-.$$

Die Streumatrix bildet also einlaufende auf auslaufende Asymptoten ab.

Es gilt offenbar, dass $D(S) = D(\Omega_-)$ genau dann wenn $\text{Bild}(\Omega_-) \subset \text{Bild}(\Omega_+)$ und $\text{Bild}(S) = D(\Omega_+)$ genau dann wenn $\text{Bild}(\Omega_+) \subset \text{Bild}(\Omega_-)$. Weiterhin ist

$$S : D(S) \rightarrow \text{Bild}(S)$$

unitär und es gilt

$$H_0S\psi = SH_0\psi \quad \text{auf } D(H_0) \cap D(S).$$

Wir kommen nun zu einem einfachen Argument, mit dessen Hilfe man oft die Existenz der Wellenoperatoren zeigen kann. Unter der Existenz der Wellenoperatoren versteht man im allgemeinen, dass $\mathcal{H}_{ac}(H_0) \subset D(\Omega_{\pm})$ gilt.

6.6 Lemma. von Cook

Sei $D(H_0) \subset D(H)$ und $\psi \in D(H_0)$. Falls

$$\int_0^{\infty} \|(H - H_0)e^{\mp itH_0}\psi\| dt < \infty$$

gilt, so ist $\psi \in D(\Omega_{\pm})$ und es gilt

$$\|(\Omega_{\pm} - \text{id})\psi\| \leq \int_0^{\infty} \|(H - H_0)e^{\mp iH_0t}\psi\| dt.$$

Beweis. Mit dem Hauptsatz gilt für $\psi \in D(H_0)$, dass

$$e^{iHt}e^{-iH_0t}\psi = \psi + i \int_0^t e^{iHs}(H - H_0)e^{-iH_0s}\psi ds.$$

Daraus folgen beide Behauptungen ganz leicht. □

6.7 Satz. Existenz der Wellenoperatoren für die Potentialstreuung

Sei $H_0 = -\Delta$ und $H = H_0 + V$ mit $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Dann existieren die Wellenoperatoren auf $D(\Omega_{\pm}) = L^2(\mathbb{R}^3)$.

Beweis. Nach dem Satz von Kato-Rellich ist H auf $D(H) = D(H_0)$ selbstadjungiert. Weiterhin gilt

$$\|Ve^{\mp iH_0t}\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |V(x)(e^{\mp iH_0t}\psi)(x)|^2 d^3x.$$

Um Cooks Lemma anwenden zu können, müssen wir zeigen, dass dieser Ausdruck für $\psi \in D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^3)$ über das Zeitintervall $[0, \infty)$ integrierbar ist.

Für $\psi \in L^1(\mathbb{R}^3)$ hatten wir

$$\|e^{\mp iH_0t}\psi\|_{\infty} \leq \frac{1}{(2\pi t)^{\frac{3}{2}}} \|\psi\|_{L^1}$$

gezeigt, also

$$\|V\psi(s)\| \leq \|\psi(s)\|_{\infty} \|V\|_{L^2} \leq \frac{1}{(2\pi t)^{\frac{3}{2}}} \|\psi\|_{L^1} \|V\|_{L^2}.$$

Also ist $L^1 \cap H^2 \subset D(\Omega_{\pm})$. Da aber $L^1 \cap H^2$ dicht in L^2 liegt und $D(\Omega_{\pm})$ abgeschlossen ist, folgt damit, dass $D(\Omega_{\pm}) = L^2(\mathbb{R}^3)$ ist. □

6.8 Bemerkung. Für das Coulomb-Potential $V = \frac{c}{|x|}$ für $c \in \mathbb{R}$ existieren die Wellenoperatoren bezüglich H_0 nicht, da es bei Unendlich zu langsam verschwindet.

6.9 Definition. Eigenschaften der Wellenoperatoren

Wir sagen, die Wellenoperatoren

- (1) existieren, falls $\mathcal{H}_{ac}(H_0) \subset D(\Omega_{\pm})$,
- (2) sind *vollständig*, falls sie existieren und $\mathcal{H}_{ac}(H) \subset \text{Bild}(\Omega_{\pm})$ gilt,
- (3) sind *asymptotisch vollständig*, falls sie existieren und $\mathcal{H}_{ac}(H) = \text{Bild}(\Omega_{\pm})$ und $\mathcal{H}_{sc}(H) = \emptyset$ gilt.

6.10 Bemerkung. Für $H_0 = -\Delta$ ist Existenz gleichbedeutend mit $D(\Omega_{\pm}) = L^2(\mathbb{R}^d)$ und Vollständigkeit gleichbedeutend mit $\mathcal{H}_{ac}(H) = \text{Bild}(\Omega_{\pm})$.

Falls die Wellenoperatoren vollständig sind, gilt in diesem Fall, dass $\Omega_{\pm} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_{ac}(H)$ unitär sind, und, dass der Streuoperator

$$S : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d), \quad S = \Omega_+^{-1}\Omega_-$$

unitär ist. Daran sieht man beispielsweise, dass sich die Energie bei der Streuung nicht ändert, also eine elastische Streuung vorliegt:

$$\langle \psi_-, H_0 \psi_- \rangle = \langle S \psi_-, S H_0 \psi_- \rangle = \langle \psi_+, H_0 \psi_+ \rangle.$$

Von nun an betrachten wir Schrödinger-Operatoren $H = H_0 + V$ mit $H_0 = -\Delta$. Unser Ziel ist es, zumindest für kurzreichweitige Potentiale asymptotische Vollständigkeit der Wellenoperatoren zu zeigen.

Im ersten Schritt zerlegen wir den Hilbertraum in Unterräume aus ein- bzw. auslaufenden Zuständen.

6.11 Idee. Wir nennen eine Zustand $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ aus- bzw. einlaufend, wenn für $\psi(t) = e^{-iH_0 t} \psi$

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t), x^2 \psi(t) \rangle = \langle \psi(t), i[H_0, x^2] \psi(t) \rangle = 2 \langle \psi(t), D \psi(t) \rangle > 0 \text{ bzw. } < 0 \text{ ist,}$$

wobei der *Dilatationsoperator* durch

$$D = -\frac{i}{2}(x \cdot \nabla_x + \nabla_x \cdot x) = -ix \cdot \nabla - \frac{in}{2}$$

gegeben ist. Schreiben wir für den Impulsoperator $p := -i\nabla_x$, so ist

$$D = \frac{1}{2}(x \cdot p + p \cdot x).$$

Man überlegt sich leicht, dass D auf seiner maximalen Domäne selbstadjungiert ist und die Gruppe der Dilatationen erzeugt,

$$(e^{-iDt} \psi)(x) = e^{-\frac{nt}{2}} \psi(e^{-t}x).$$

In Kugelkoordinaten $(r, \omega) = (e^\varrho, \omega)$ hat die Dilatationsgruppe die Form

$$(e^{-iDt} \psi)(e^\varrho \omega) = e^{-\frac{nt}{2}} \psi(e^{\varrho-t} \omega).$$

Also ist e^{-iDt} ein Shift in ϱ und es gilt $D = -i\nabla_\varrho$. Die Fouriertransformation macht D dann zu einem Multiplikationsoperator.

6.12 Definition. Mellintransformation

Seien

$$S : L^2(\mathbb{R}^n, d^n x) \rightarrow L^2([0, \infty), r^{n-1} dr) \otimes L^2(S^{n-1}, d\omega), \quad \psi(x) \mapsto (S\psi)(r, \omega) := \psi(r\omega)$$

und

$$R : L^2([0, \infty), r^{n-1} dr) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\varrho), \quad f(r) \mapsto (Rf)(\varrho) := e^{\frac{n}{2}\varrho} f(e^\varrho).$$

Es sind S und R unitär und mit der Fouriertransformation

$$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}, d\varrho) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\lambda)$$

definieren schließlich die *Mellintransformation* durch

$$\mathcal{M} : L^2(\mathbb{R}^n, d^n x) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\lambda) \otimes L^2(S^{n-1}, d\omega), \quad \mathcal{M} := (\mathcal{F} \otimes \text{id})(R \otimes \text{id})S.$$

Also ist

$$(\mathcal{M}\psi)(\lambda, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\varrho\lambda} \psi(e^\varrho \omega) e^{\frac{n}{2}\varrho} d\varrho = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} r^{-i\lambda} \psi(r\omega) r^{\frac{n}{2}-1} dr.$$

6.13 Proposition. Die Mellintransformierte \mathcal{M} ist unitär und es gilt

$$\mathcal{M}e^{-iDt}\mathcal{M}^{-1} = e^{-it\lambda}$$

und daher $\mathcal{M}D\mathcal{M}^{-1} = \lambda$. Insbesondere gilt somit

$$\sigma(D) = \sigma_{\text{ac}}(D) = \mathbb{R} \quad \text{und} \quad \text{id} = P_+ + P_- .$$

Beweis. Die Unitarität folgt aus der Definition, da \mathcal{M} Verknüpfung unitärer Abbildungen ist. Die zweite Behauptung folgt durch Nachrechnen oder dem oben gesagten. Die Aussage über das Spektrum des Multiplikationsoperators λ ist bekannt. \square

Es liegt nun nahe, die Projektionen auf die ein- bzw. auslaufenden Zustände durch die spektralen Projektionen

$$P_{\pm} = \chi_{(0, \pm\infty)}(D)$$

zu definieren.

Betrachten wir zusätzlich noch Zustände mit kinetischer Energie im Intervall $[a^2, b^2]$, also mit Geschwindigkeiten im Intervall $[a, b]$, so erwarten wir, dass $e^{\mp iH_0 t} \chi_{[a^2, b^2]}(H_0) P_{\pm} \psi$ sich mindestens mit Geschwindigkeit a vom Ursprung wegbewegt, also außerhalb einer Kugel mit Radius $a \cdot t$ lokalisiert ist.

6.14 Lemma. Sei $f \in C_0^\infty$ mit $\text{supp} f \subset (a^2, b^2)$, für $a, b > 0$. Für jedes $R \in \mathbb{R}$ und $N \in \mathbb{N}$ gibt es eine Konstante $C > \infty$ so, dass für $t \geq 0$

$$\left\| \chi_{\{|x| < a|t|\}}(x) e^{\mp iH_0 t} f(H_0) \chi_{(\pm R, \pm\infty)}(D) \right\| \leq \frac{C}{(1 + |t|)^N} .$$

Beweis. Der Beweis ist eine längliche Rechnung, welche die explizite Diagonalisierbarkeit von D durch die Mellintransformation und von H_0 durch die Fouriertransformation ausnützt. Aus Zeitgründen überspringen wir diese. \square

6.15 Korollar. Es gilt für jedes $R \in \mathbb{R}$, dass

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \chi_{(\pm R, \pm\infty)}(D) e^{-iH_0 t} = 0 .$$

Beweis. Sei $f \in C_0^\infty(0, \infty)$. Wir zeigen zunächst, dass

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \chi_{(\pm R, \pm\infty)}(D) f(H_0) e^{-iH_0 t} = 0 .$$

Mit den Abkürzungen $P_D = \chi_{(\pm R, \pm\infty)}(D)$ und $\chi = \chi_{\{|x| < a|t|\}}(x)$ ist

$$\|P_D f(H_0) e^{-iH_0 t} \psi\| \leq \|\chi e^{iH_0 t} f(H_0)^* P_D\| \|\psi\| + \|f(H_0)\| \|(\text{id} - \chi)\psi\| .$$

Der erste Term geht für $t \rightarrow \mp\infty$ gegen Null wegen Lemma 6.14. Der zweite verschwindet wegen $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \chi = \text{id}$. Da die Vektoren von der Form $f(H_0)\psi$ dicht liegen und da $\chi_{(\pm R, \pm\infty)}(D) e^{-iH_0 t}$ gleichmäßig beschränkt ist, bekommen wir die Behauptung mit dem üblichen $\frac{\varepsilon}{3}$ -Argument. \square

6.2 Asymptotische Vollständigkeit für kurzreichweitige Potentiale

6.16 Definition. Kurzreichweitige Potentiale

Ein Potential $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *kurzreichweitig*, falls es H_0 -beschränkt mit relativer Schranke kleiner eins ist und falls

$$h_1(r) = \|V(H_0 - z)^{-1}\chi_{\{|x| \geq r\}}(x)\|$$

oder

$$h_2(r) = \|\chi_{\{|x| \geq r\}}(x)V(H_0 - z)^{-1}\|$$

für ein $z \in \varrho(H_0)$ integrierbar ist.

In diesem Fall sind beide Funktionen für alle $z \in \varrho(H_0)$ integrierbar. (Auf den nicht ganz offensichtlichen Beweis verzichten wir wieder.)

6.17 Bemerkung. Hinreichendes Kriterium für Kurzreichweitigkeit

Falls $|V(x)| \leq \frac{c}{|x|^\alpha}$, dann ist $\|\chi_{\{|x| \geq r\}}V\| \leq \frac{c}{r^\alpha}$. Also ist V kurzreichweitig, falls $\alpha > 1$ ist (und es H_0 -beschränkt ist mit relativer Schranke kleiner eins), d.h. das Coulomb-Potential ist genau der Grenzfall.

6.18 Lemma. Für kurzreichweitige Potentiale ist die Differenz der Resolventen

$$(H - z)^{-1} - (H_0 - z)^{-1}$$

kompakt.

Beweis. Der Operator

$$(H - z)^{-1}V(\text{id} - \chi_{\{|x| \geq r\}})(H_0 - z)^{-1}$$

ist kompakt, da $(\text{id} - \chi_{\{|x| \geq r\}})(H_0 - z)^{-1}$ kompakt und $(H - z)^{-1}V$ beschränkt ist. Die Kurzreichweitigkeit impliziert, dass dieser Operator zumindest entlang einer geeigneten Folge r_j von Radien in der Norm gegen

$$(H - z)^{-1}V(H_0 - z)^{-1} = (H - z)^{-1} - (H_0 - z)^{-1}$$

konvergiert. □

6.19 Korollar. Für $f \in C_\infty$ ist $f(H) - f(H_0)$ kompakt.

Beweis. Folgt zum Beispiel aus der Helffer-Sjöstrand Formel. □

6.20 Bemerkung. Das *essentielle Spektrum* ist durch

$$\sigma_{\text{ess}}(A) := \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \dim(\text{Bild}(\chi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A))) = \infty \text{ für alle } \varepsilon > 0\}$$

definiert. Es gilt (Beweis in den Übungen!)

$$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(H) \iff \text{es gibt eine ONF } \psi_n \text{ mit } \lim_{n \rightarrow \infty} \|H\psi_n - \lambda\psi_n\| = 0.$$

6.21 Satz. Weyls Theorem

Seien A und B selbstadjungierte Operatoren. Falls

$$(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$$

für ein $z \in \varrho(A) \cap \varrho(B)$ kompakt ist, so gilt

$$\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ess}}(B).$$

6.2 Asymptotische Vollständigkeit für kurzreichweitige Potentiale

Beweis. Sei $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$. Dann gibt es eine ONF (ψ_n) mit $\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)\psi_n\| = 0$. Dann gilt aber auch

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|((A - z)^{-1} - (\lambda - z)^{-1})\psi_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - z)^{-1}(\lambda - z)^{-1}(A - \lambda)\psi_n\| = 0.$$

Damit folgt wiederum

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \|((B - z)^{-1} - (\lambda - z)^{-1})\psi_n\| &= \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \|((A - z)^{-1} - (\lambda - z)^{-1})\psi_n\| + \lim_{n \rightarrow \infty} \|((B - z)^{-1} - (A - z)^{-1})\psi_n\| &= 0, \end{aligned}$$

wobei der zweite Term verschwindet, da (ψ_n) schwach gegen Null konvergiert und die Differenz der Resolventen kompakt ist. Also ist für $\psi_n := (B - z)^{-1}\psi_n$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(B - \lambda)\tilde{\psi}_n\| = |\lambda - z| \lim_{n \rightarrow \infty} \|(\lambda - z)^{-1}(B - \lambda)(B - z)^{-1}\psi_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|((B - z)^{-1} - (\lambda - z)^{-1})\psi_n\| = 0.$$

Nun ist $\tilde{\psi}_n$ zwar noch keine ONF, man kann aus $\tilde{\psi}_n$ aber wegen

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\tilde{\psi}_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(B - z)^{-1}\psi_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - z)^{-1}\psi_n\| = \frac{1}{|\lambda - z|} > 0$$

und der Invertierbarkeit von $(B - z)^{-1}$ mit dem Gram-Schmidtschen Verfahren eine ONF φ_n konstruieren, die ebenfalls $\lim_{n \rightarrow \infty} \|(B - \lambda)\varphi_n\| = 0$ erfüllt. Damit ist $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(B)$. \square

6.22 Korollar. Sei V kurzreichweitig, dann gilt

$$\sigma_{\text{ess}}(H) = \sigma_{\text{ess}}(H_0) = [0, \infty).$$

6.23 Proposition. Für kurzreichweitige Potentiale existieren die Wellenoperatoren und es gilt $\sigma_{\text{ac}}(H) = [0, \infty)$.

Beweis. Mit dem Kriterium von Cook müssen wir zeigen, dass

$$\begin{aligned} \|Ve^{\mp iH_0 t}\psi\| &\leq \|V(H_0 + 1)^{-1}\| \|(\text{id} - \chi_{a|t|})e^{\mp iH_0 t}(H_0 + \text{id})\psi\| \\ &\quad + \|V(H_0 + 1)^{-1}\chi_{a|t|}\| \|(H_0 + \text{id})\psi\| \end{aligned}$$

für ψ aus einer dichten Teilmenge integrierbar ist. Der zweite Term ist wegen der Annahme der Kurzreichweitigkeit integrierbar. Der erste Term ist mit Lemma 6.14 zumindest für $\psi = f(H_0)\chi_{(\pm R, \pm \infty)}(D)\varphi$ integrierbar. Da solche ψ dicht liegen, folgt die Existenz der Wellenoperatoren. Damit haben wir $[0, \infty) = \sigma_{\text{ac}}(H_0) \subset \sigma_{\text{ac}}(H)$. Andererseits ist $\sigma_{\text{ac}}(H) \subset \sigma_{\text{ess}}(H) = [0, \infty)$, womit auch die Aussage über das absolutstetige Spektrum von H gezeigt ist. \square

6.24 Lemma. Sei $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, dann sind die Operatoren $(\text{id} - \Omega_\pm)f(H_0)P_\pm$ kompakt.

Beweis. Wie im Beweis von Lemma 6.6 schreibt man

$$\begin{aligned} (H - z)^{-1}(\text{id} - \Omega_\pm)f(H_0)P_\pm &= \lim_{t \rightarrow \infty} i(H - z)^{-1} \int_0^t e^{iHs} V e^{-iH_0 s} f(H_0) P_\pm ds \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} i \int_0^t e^{iHs} \underbrace{(H - z)^{-1} V (H_0 - z)^{-1}}_{\text{kompakt}} e^{-iH_0 s} \underbrace{(H_0 - z) f(H_0) P_\pm}_{\text{beschränkt}} ds \end{aligned}$$

Mit der Zerlegung aus dem Beweis von Proposition 6.23 und Lemma 6.14 sieht man leicht, dass das Integral in der Norm konvergiert. Damit ist $(H - z)^{-1}(\text{id} - \Omega_\pm)f(H_0)P_\pm$ als normkonvergenter Limes kompakter Operatoren ebenfalls kompakt. Schließlich gilt für $\tilde{f}(\lambda) := (\lambda - z)f(\lambda)$, dass

$$\begin{aligned} (\text{id} - \Omega_\pm)f(H_0)P_\pm &= (H - z)^{-1}(\text{id} - \Omega_\pm)\tilde{f}(H_0)P_\pm \\ &\quad + ((H_0 - z)^{-1} - (H - z)^{-1})\tilde{f}(H_0)P_\pm. \end{aligned}$$

Der erste Summand ist nach dem zuvor Gesagten kompakt und der zweite mit Lemma 6.18. \square

6.25 Satz. Sei V kurzreichweitig, dann ist $\sigma_{\text{sc}}(H) = \emptyset$. Weiterhin haben alle Eigenwerte ungleich Null endliche Vielfachheit und $\sigma_{\text{pp}}(H)$ hat keine Häufungspunkte in $(0, \infty)$.

Beweis. Sei $P = P_H^{\text{sc}}\chi_{(a,b)}(H)$ die Projektion auf den singulärstetigen Teil von H mit $0 < a < b$. Wegen

$$\text{Bild}(\Omega_{\pm}) \subset \mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$$

ist $P\Omega_{\pm} = 0$. Also ist für $f \in C_{\infty}$

$$Pf(H_0) = Pf(H_0)(P_+ + P_-) = P(\text{id} - \Omega_+)f(H_0)P_+ + P(\text{id} - \Omega_-)f(H_0)P_-$$

mit Lemma 6.24 kompakt. Da $f(H) - f(H_0)$ kompakt ist, ist damit auch $Pf(H)$ kompakt. Für $f(\lambda) = 1$ auf (a, b) ist $P = Pf$, also muss P kompakt sein. Da P eine Projektion ist, also $P|_{\text{Bild}(P)} = \text{id}$, muss das Bild von P endlichdimensional sein. Es besteht $\sigma_{\text{sc}}(H) \cap (a, b)$ somit aus endlich vielen Punkten. Stetiges Spektrum kann aber per Definition nicht auf endlich vielen Punkten getragen werden, womit

$$\sigma_{\text{sc}}(H) \cap (a, b) = \emptyset$$

folgt. Da wir a und b beliebig wählen können, ergibt sich

$$\sigma_{\text{sc}}(H) \cap (0, \infty) = \emptyset,$$

und wegen $\sigma_{\text{sc}}(H) \subset \sigma_{\text{ess}}(H) = [0, \infty)$ muss $\sigma_{\text{sc}}(H) = \emptyset$ sein. Die Aussage über das Punktspektrum folgt analog, indem man P_H^{sc} durch P_H^{pp} ersetzt. \square

6.26 Satz. von Enß

Sei V kurzreichweitig. Dann sind die Wellenoperatoren asymptotisch vollständig.

Beweis. Es bleibt zu zeigen, dass jedes $\psi \in \mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$ auch in $\text{Bild}\Omega_{\pm}$ liegt. Sei also $\psi \in \mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$ mit $\psi = f(H)\psi$ für ein $f \in C_0^{\infty}((0, \infty))$. Solche ψ liegen dicht in $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H)$. Nach Satz 5.36 geht $\psi(t) := e^{-iHt}\psi$ für $t \rightarrow \pm\infty$ schwach gegen 0. Für

$$\varphi_{\pm}(t) := f(H_0)P_{\pm}\psi(t)$$

gilt also wegen

$$\psi(t) = \varphi_+ + \varphi_- + (f(H) - f(H_0))\psi(t),$$

dass

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\psi(t) - \varphi_+(t) - \varphi_-(t)\| = 0.$$

Mit Lemma 6.24 gilt weiterhin

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|(\text{id} - \Omega_+)\varphi_+(t)\| = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|(\text{id} - \Omega_-)\varphi_-(t)\| = 0.$$

Angenommen, $\psi \in \text{Bild}(\Omega_+)^{\perp}$ ($\psi \in \text{Bild}(\Omega_-)^{\perp}$ geht analog), dann gilt

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t), \psi(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t), \varphi_+(t) + \varphi_-(t) \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t), \Omega_+\varphi_+(t) + \Omega_-\varphi_-(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t), \Omega_-\varphi_-(t) \rangle, \end{aligned}$$

da $\text{Bild}(\Omega_{\pm})^{\perp}$ invariant unter H ist. Schließlich folgt mit Korollar 6.15

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t), \Omega_-\varphi_-(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle P_-f(H_0)^*\Omega_-^*\psi(t), \psi(t) \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle P_-f(H_0)^*e^{-iH_0t}\Omega_-^*\psi, \psi(t) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Also ist $\mathcal{H}_{\text{ac}}(H) = \text{Bild}\Omega_+$. \square