3.3 Die Schrödinger-Gleichung in $L^2(\Omega,\mathbb{C})$ ($\Omega\subset\mathbb{R}^n$ offen)

3.3.1 Die "freie" Schrödinger-Gleichung $i\frac{\partial u}{\partial t}+\Delta u=0$

(bzw. $\frac{du}{dt}=i\Delta u$)

Aus unserer Diskussion zur Wärmeleitungsgleichung wissen wir, dass der Laplace-Operator

$$\Delta: L^2(\Omega,\mathbb{C})\supset D_\Delta\to L^2(\Omega,\mathbb{C})$$

mit Definitionsbereich $D_\Delta:=\{u\in H_0^1(\Omega):\Delta u\in L^2(\Omega,\mathbb{C})\}$ selbstadjungiert ist. Hieraus folgt, dass $i\Delta$ mit demselben Definitionsbereich schief-selbstadjungiert ist. Der Satz von Stone ergibt:

<u>Proposition 1</u>: Der Operator $i\Delta: L^2(\Omega,\mathbb{C})\supset D_\Delta\to L^2(\Omega,\mathbb{C})$ erzeugt eine unitäre Gruppe $(U(t))_{t\in\mathbb{R}}$ auf $L^2(\Omega,\mathbb{C})$. Das Cauchy-Problem

$$i\frac{du}{dt}+\Delta u=0,\qquad u(0)=u_0\in D_\Delta \qquad \text{(CP)}$$

für die Schrödinger-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingung $u|_{\partial\Omega}=0$ ist im klassischen Sinne wohlgestellt.

Bem.: (1) Trotz der formalen Ähnlichkeit gibt es <u>erhebliche Unterschiede</u> zur Wärmeleitungsgleichung:

(1.1) Unitäre Gruppe bedeutet u.a., dass

$U(t)^* = U(t)^{-1} = U(-t)$ bzw. $\langle U(t)x, U(t)y \rangle = \langle x,y \rangle \;\; \forall t\in\mathbb{R}, x,y\in H \; (= L^2(\Omega,\mathbb{C}))$

Insbesondere sind alle Operatoren $U(t): H \to H$ isometrisch.

Da die Lösung von (CP) gegeben ist durch $u(t) = U(t)u_0$, haben wir $\|u(t)\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$, $\|\Delta u(t)\|_{L^2} = \|\Delta u_0\|_{L^2}$ und ggf. auch $\|\Delta^k u(t)\|_{L^2} = \|\Delta^k u_0\|_{L^2}$, falls $u_0 \in D_{\Delta^k}$.

Einen time-decay der L^2- oder allgemeiner der H^{2k}-Norm, $k\in\mathbb{N}_0$, wie wir ihn für die WLG festgestellt haben, kann es also bei der Schrödinger-Gleichung nicht geben.

(1.2) Aufgrund der Gruppenstruktur (statt Halbgruppe) ist auch ein Regularisierungseffekt der Form

$$u_0 \in H \setminus D_A \implies u(t) \in D_A \quad \forall t>0$$

nicht möglich, denn dann wäre $u_0 = U(t)\underbrace{U(-t)u_0}_{\in H} \in D_A$.

(2) Schwächere Formen von "time-decay" sind auf unbeschränkten Gebieten möglich, z.B. hat man auf $\Omega = \mathbb{R}^n$ die Abschätzung

$$\|u(t)\|_\infty \lesssim |t|^{-n/2} \|u_0\|_1 ,$$

die in diesem Fall aus der expliziten Darstellung der Lösung als Faltungsintegral

$$u(t,x) = C_n |t|^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} u_0(y)\,dy$$

(nicht trivial! → Vorlesung Einführung PDE) abgelesen werden kann. Für Gebiete $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ endlichen Maßes (insbesondere also für beschränkte Gebiete) hat man hingegen

$$\|u_0\|_{L^2} = \|u(t)\|_{L^2} \leq |\Omega|^{1/2} \|u(t)\|_{L^\infty},$$

so dass ein L^∞-decay für freie Lösungen ausgeschlossen ist.

(3) Auf dem $\mathbb{R}^n$ sind auch schwache Regularisierungseffekte in gemischten L^p-Normen bekannt, z.B. hat man bei einer Raumdimension

$$\| |D_x|^{\frac{1}{2}} u \|_{L^\infty_x(L^2_t)} \lesssim \|u_0\|_{L^2_x}$$

("Kato-smoothing", $|D_x|^{\frac{1}{2}} = \mathcal{F}^{-1}|\xi|\mathcal{F}$, also eine "halbe" Ableitung.)

Auf beschränkten Gebieten sind auch solche Glättungseffekte nicht möglich (was nicht so leicht zu zeigen ist). Zum Vergleich: Für $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ ist die Lösung u von

$$\frac{du}{dt} = \Delta u, \quad u(0) = u_0$$

für jedes $t > 0$ eine C^∞-Funktion der x-Variablen.

(4) Die Gestalt der erzeugten Halbgruppen für $\Omega = \mathbb{R}^n$ und beschränkte Gebiete Ω unterscheidet sich deutlich:

(4.1) Für $\Omega = \mathbb{R}^n$ ist der Laplace-Operator via Fourier-Transformation $\mathcal{F}$ unitär äquivalent zu dem Multiplikationsoperator mit $m(\xi) = -|\xi|^2$, d.h. wir haben für $u_0 \in D_\Delta = H^2(\mathbb{R}^n)$

$$\mathcal{F} i\Delta u_0(\xi) = -i|\xi|^2 \mathcal{F}u_0(\xi)$$

und für die Lösung des Cauchy-Problems bzw. die erzeugte unitäre Gruppe gilt

$$\mathcal{F}u(t,\xi) = \mathcal{F}U(t)u_0(\xi) = e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}u_0(\xi).$$

Hier haben wir für das Spektrum des Laplace-Operators $\sigma(\Delta) = (-\infty, 0] = \sigma_c(\Delta)$, insbesondere existieren <u>keine</u> Eigenwerte.

(4.2) Betrachten wir als zweites Bsp. den Laplace-Operator auf $L^2(\mathbb{T}^n)$ bzw. die freie Schrödingergleichung mit periodischer Randbedingung:

$$L^2(\mathbb{T}^n) = \{u : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C} : u(x+2\pi k) = u(x)\ \forall k \in \mathbb{Z}^n, x \in \mathbb{R}^n, \|u\| < \infty\}$$

$$\|u\|^2 := \langle u, u\rangle \quad \text{und} \quad \langle u, v\rangle := (2\pi)^{-n} \int_{[-\pi,\pi]^n} u(x)\overline{v}(x)\,dx.$$

Bekannt ist aus der Theorie der Fourierreihen:

Für $k \in \mathbb{Z}^n$ sei $e_k(x) := e^{ikx}$ $\quad (kx = \sum k_j x_j)$.

Dann ist $(e_k)_{k\in\mathbb{Z}^n}$ eine ONB in $L^2(\mathbb{T}^n)$, d.h. für

(55)

$u \in L^2(\mathbb{T}^n)$ gilt mit Konvergenz in der oben definierten Norm

$$u = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \langle u, e_k \rangle e_k = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \hat{u}(k) e_k$$

k-ter Fourierkoeffizient von u

Für $u \in C^2(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{T}^n)$ ist dann (Rechnung haben wir in den Übungen gemacht.)

$$\widehat{\Delta u}(k) = -|k|^2 \hat{u}(k)$$

um die Analogie zu (4.1) zu betonen.

bzw. $\mathcal{F}\Delta u(k) = -|k|^2 \mathcal{F}u(k)$, $k \in \mathbb{Z}^n$.

Auch hier ist Δ unitär äquivalent zu einem Multiplikationsoperator (via $\mathcal{F}$), und zwar zu

$$M : \ell^2(\mathbb{Z}^n) \supset D_M \longrightarrow \ell^2(\mathbb{Z}^n), \ (a_k)_k \longmapsto (-|k|^2 a_k)_k$$

mit $D_M = \{(a_k)_k \in \ell^2(\mathbb{Z}^n) : \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} |k|^4 |a_k|^2 < \infty\}$.

Das können wir zur Definition des abgeschlossenen (und dann selbstadjungierten) Laplace-Operators in $L^2(\mathbb{T}^n)$ heranziehen:

Sobolev-Raum periodischer Funktionen

$$\Delta : L^2(\mathbb{T}^n) \supset H^2(\mathbb{T}^n) \longrightarrow L^2(\mathbb{T}^n), \ u \longmapsto \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} -|k|^2 \hat{u}(k) e_k$$

mit dem Definitionsbereich

$$H^2(\mathbb{T}^n) := \{u \in L^2(\mathbb{T}^n) : \underbrace{\sum_{k \in \mathbb{Z}^n} (1+|k|^2)^2 |\hat{u}(k)|^2}_{= \|u\|^2_{H^2(\mathbb{T}^n)}} < \infty\}$$

Wir sind hier also in der Situation von Problem 9 auf Blatt 9 und können die von $A = i\Delta$ erzeugte unitäre Gruppe explizit angeben:

$$U(t)u_0 = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} e^{-it|k|^2} \underbrace{\hat{u}_0(k)}_{=\langle u_0, e_k\rangle} e_k = \mathcal{F}^{-1} e^{-it|k|^2} \mathcal{F} u_0$$

Der wesentliche Unterschied zu (4.1) aus funktionalanalytischer Perspektive besteht im Spektrum des Laplace-Operators bei periodischer Randbedingung: Hier gilt: $\sigma(\Delta) = \sigma_p(\Delta) = \{-|k|^2 : k\in\mathbb{Z}^n\}$. Alle Eigenwerte haben <u>endliche</u> <u>Vielfachheit</u> und $\sigma_p(\Delta)$ hat <u>keinen Häufungspunkt.</u> Ein solches Spektrum bezeichnet man als <u>reines Punktspektrum.</u> In dieser Situation ist das Orthonormalsystem der zugehörigen Eigenvektoren <u>stets</u> vollständig, d.h. <u>eine Orthonormalbasis</u>(*), und falls eine C^0-Halbgruppe erzeugt wird, hat sie stets die Gestalt wie in Problem 9.

<u>(*) Triebel, Hans: Higher Analysis, Thm. 4.5.1</u> (nicht trivial!)

(4.3) Die freie Schrödingergleichung mit Dirichlet-Randbedingung auf $L^2(\Omega,\mathbb{C})$ für <u>beschränkte</u> Gebiete $\Omega\subset\mathbb{R}^n$.

Für selbstadjungierte positiv definite Operatoren gibt ein scharfes Kriterium dafür, ob diese ein reines Punktspektrum besitzen. Dabei hilft ein

Operator $A: H \supset D_A \to H$ <u>positiv definit</u>, wenn ein $\varepsilon_0 > 0$ existiert, so dass $\langle Ax, x\rangle \geq \varepsilon_0 \|x\|^2$. In diesem Fall wird durch

$$\|x\|_A^2 := \langle Ax, x\rangle$$

eine Norm auf D_A definiert, die sogenannte Energienorm. Sie liegt zwischen der Norm des Hilbertraumes und der Graphennorm, denn

$$\varepsilon_0 \|x\|^2 \leq \|x\|_A^2 \underset{\text{p.d}}{=} \langle Ax, x\rangle \leq \|Ax\| \|x\| \leq \frac{1}{2} \|x\|_{D_A}^2 .$$

Der Abschluss von D_A bezüglich der Energie-Norm, also

$$H_A := \overline{D_A}^{\| \|_A}$$

wird als Energy-space zum Operator A bezeichnet. Damit gilt das

<u>Kriterium von Rellich:</u> Ein selbstadjungierter, positiv definiter Operator $A: H \supset D_A \to H$ besitzt genau dann ein reines Punktspektrum, wenn der Einbettungsoperator $J: H_A \to H$, $x \mapsto J(x) = x$ kompakt ist.

(Ein linearer Operator zwischen Banachräumen heißt kompakt, wenn das Bild der Einheitskugel relativ kompakt ist. Was wiederum bedeutet, dass der Abschluss dieses Bildes kompakt ist. – Auch der Beweis des Rellichschen ~~ø~~ Kriteriums ist so umfangreich, dass ich darauf verzichten muss. Quelle: Triebel, a.a.O., Thm. 4.5.3.)

Bsp.: Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein Gebiet und

$$A_0 = \Delta : L^2(\Omega) \supset D_\Delta = \{u \in H_0^1(\Omega) : \Delta u \in L^2(\Omega)\} \longrightarrow L^2(\Omega).$$

Dann ist $A := I - \Delta : D_\Delta \to L^2(\Omega)$ selbstadjungiert und positiv definit, denn

$$\langle Au, u\rangle = \langle u,u\rangle - \langle \Delta u, u\rangle = \langle u,u\rangle + \langle \nabla u, \nabla u\rangle,$$

also $\|u\|_A = \|u\|_{H^1(\Omega)}$. Der Energie-Raum für den Laplace-Operator (mit Dirichlet-Randbed. $u|_{\partial\Omega} = 0$) ist also gerade $H_0^1(\Omega)$. Jetzt greifen wir zurück auf ein weiteres Zitat:

<u>Einbettungssatz von Rellich-Kondrachov</u>: Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein <u>beschränktes</u> Gebiet,

$$1 - \frac{n}{p} > -\frac{n}{q} \quad \text{und} \quad p \leq q < \infty.$$

Dann ist die Einbettung $W_0^{1,p}(\Omega) \longrightarrow L^q(\Omega)$ kompakt.
(Quelle: Adams, R, Sobolev spaces, Chap. 6)

Nun ist $H_0^1(\Omega) = W_0^{1,2}(\Omega)$, also die Einbettung

$$H_0^1(\Omega) = H_A \longrightarrow H = L^2(\Omega)$$

für beschränktes Ω kompakt. Damit hat $I - \Delta$ und also auch Δ ein reines Punktspektrum. statt wie bei Problem 9
Die von $i\Delta$ erzeugte unitäre Gruppe hat also die Ge-

3.3.2 Die Schrödinger-Gleichung mit einem Potential (auf $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$)

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + \Delta u = Vu \quad \text{bzw.} \quad \frac{du}{dt} = i(\Delta - V)u =: i\hat{H}u$$

mit einem reellwertigen Potential $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ und dem sog. Hamilton-Operator $\hat{H} = \Delta - V$. Ein solcher Operator mit Definitionsbereich

$$\mathcal{D}_{\hat{H}} := \{u \in H^2(\mathbb{R}^n) : Vu \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \subset L^2(\mathbb{R}^n)$$

ist offenbar symmetrisch und dicht definiert, letztres da $C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{D}_{\hat{H}}$. Die Frage nach der Wohlgestelltheit des Cauchy-Problems

$$\frac{du}{dt} = i\hat{H}u, \qquad u(0) = u_0 \in \mathcal{D}_{\hat{H}}$$

läuft darauf hinaus, zu klären, ob der Operator $\hat{H}$ selbstadjungiert oder zumindest wesentlich selbstadjungiert ist (d.h. $\overline{\hat{H}} = \hat{H}^*$). Nach den Axiomen der QM ist dies stets der Fall, wenn $\hat{H}$ eine reale physikalische Situation beschreibt. Das ist jedoch nicht für alle Potentiale $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ der Fall, wie das folgende Bsp. zeigt:

Bsp.: $(n=1)$ Der Operator $\hat{H} : L^2(\mathbb{R}) \supset \mathcal{D}_{\hat{H}} \longrightarrow L^2(\mathbb{R})$ mit $\hat{H}u(x) = u''(x) + x^4 u(x)$ und $C_0^\infty(\mathbb{R}) \subset \mathcal{D}_{\hat{H}}$ ist <u>nicht wesentlich selbstadjungiert.</u>

Zur Begründung benötigen wir die folgende

Bem.: Sei H ein Hilbertraum und $A : H \supset D_A \to H$ symmetrisch sowie $\lambda = \mu + i\delta$ mit $\mu \in \mathbb{R}$, $\delta \in \mathbb{R}\setminus\{0\}$. Dann ist

$$\|(A-\lambda I)x\| \geq |\delta|\,\|x\|.$$

Bew.: Mit A ist auch $A_\mu := A - \mu I$ symmetrisch und $\forall x \in D_A$

$$\|(A-\lambda I)x\|^2 = \langle (A_\mu - i\delta I)x, (A_\mu - i\delta I)x \rangle$$

$$= \|A_\mu x\|^2 - \underbrace{2\,\mathrm{Re}\langle i\delta x, A_\mu x\rangle}_{=0} + \delta^2\|x\|^2 \geq \delta^2\|x\|^2.$$

weitere Begründung des Bsp.: Man setzt für $\alpha \in \mathbb{R}$ mit $|\alpha| \geq 1$

$p_\alpha(x) := \sqrt{x^4 + i\alpha}$, wobei $\sqrt{\ }$ den Hauptzweig der komplexen Wurzel bedeutet, und

$$u_\alpha(x) := p_\alpha(x)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(i \int_0^x p_\alpha(t)\,dt\right).$$

Dann ist $p_\alpha(t) = t^2\sqrt{1 + i\frac{\alpha}{t^4}}$ und

$$\mathrm{Im}\, p_\alpha(t) = \frac{t^2}{2i}\cdot\left(\sqrt{1+i\frac{\alpha}{t^4}} - \sqrt{1-i\frac{\alpha}{t^4}}\right) = \frac{t^2}{2i}\,\frac{2i\frac{\alpha}{t^4}}{\sqrt{1+i\frac{\alpha}{t^4}} + \sqrt{1-i\frac{\alpha}{t^4}}}$$

$$= \frac{\alpha}{t^2}\cdot\frac{1}{2\,\mathrm{Re}\sqrt{1+i\frac{\alpha}{t^4}}} \Longrightarrow |\mathrm{Im}\, p_\alpha(t)| \leq \frac{|\alpha|}{2t^2},$$

woraus $\left|\exp\left(i\int_0^x p_\alpha(t)\,dt\right)\right| \leq C_\alpha$ für irgendeine von α abhängige Konstante C_α folgt. Daraus ergibt sich

$$|u_\alpha(x)|^4 \leq \frac{1}{|p_\alpha(x)|^2} \cdot c_\alpha{}^4 = \frac{c_\alpha{}^4}{|x^4+i\alpha|} \lesssim \frac{c_\alpha{}^4}{x^4+|\alpha|}$$

und weiter wegen $|\alpha| \geq 1$

$$|u_\alpha(x)|^2 \lesssim \frac{c_\alpha^2}{1+x^2} \implies u_\alpha \in L^2(\mathbb{R}).$$

Nun ergibt eine etwas längere Rechnung, dass

$$u_\alpha''(x) = (m_\alpha(x) - (x^4+i\alpha))\, u_\alpha(x)$$

mit einem Multiplikator

$$m_\alpha(x) = \frac{5}{4} \frac{x^6}{(x^4+i\alpha)^2} - \frac{3x^2}{(x^4+i\alpha)} .$$

Wichtig ist nicht die genaue Gestalt, sondern nur

$$m_\alpha \in L^\infty \text{ und } \|m_\alpha\|_\infty \leq C, \ \underline{C \text{ unabhängig}} \text{ von } \alpha.$$

Erinnern wir uns an die Def. des Definitionsbereiches für den adjungierten Operator

$$D_{\hat{H}^*} = \{u \in L^2(\mathbb{R}) : \varphi_u : D_{\hat{H}} \to L^2(\mathbb{R}),\ v \mapsto \varphi_u[v] := \langle \hat{H}v, u\rangle$$
$$\text{ist stetig auf } (D_{\hat{H}}, \|\ \|_{L^2})\}$$

Unsere Rechnung zeigt, dass ~~$u_\alpha \in D_{\hat{H}}$ und~~ $\hat{H}$ für u_α definiert ist und dass

$$\hat{H}u_\alpha = \left(\frac{d^2}{dx^2} + x^4\right) u_\alpha = (m_\alpha - i\alpha)\, u_\alpha ,$$ ($u_\alpha \notin D_{\hat{H}}$ ist möglich)

wegen der Symmetrie von $\hat{H}$ also

$$|\varphi_{u_\alpha}[v]| = |\langle \hat{H}v, u_\alpha\rangle| = |\langle v, \hat{H}u_\alpha\rangle| = |\langle v, (m_\alpha - i\alpha)u_\alpha\rangle|$$
$$\leq \|v\|_2 \,(\|m_\alpha\|_\infty + |\alpha|)\, \|u_\alpha\|_2 .$$

Das bedeutet: φ_{u_α} ist stetig, damit $u_\alpha \in D_{\hat{H}^*}$ und

$$\hat{H}^* u_\alpha = \hat{H} u_\alpha = (w_\alpha - i\alpha) u_\alpha .$$

Mit $\| w_\alpha \|_\infty \leq C$ folgt weiter

u.a. von α.

$$\| (\hat{H}^* + i\alpha) u_\alpha \|_2 \leq \| w_\alpha \|_\infty \| u_\alpha \|_2 \leq C \| u_\alpha \| .$$

Andererseits: Wenn wir annehmen, dass $\hat{H}$ wesentlich selbstadjungiert ist, also dass $\overline{\hat{H}} = \hat{H}^*$, so ist auch $\hat{H}^*$ symmetrisch, und nach der vorausgeschickten Bemerkung ist

$$\| (\hat{H}^* + i\alpha) u_\alpha \|_2 \geq |\alpha| \, \| u_\alpha \|_2 ,$$

was für $|\alpha| > C$ einen Widerspruch ergibt. $\square$

Bem.: Weder $x^4 u_\alpha$ noch u_α'' liegen in $L^2(\mathbb{R})$!

Es ist also eine nicht-triviale Frage, ob die Hamilton-Operatoren des Typs $\hat{H} = \Delta - V$ selbstadjungiert sind oder nicht. Um ein positives Ergebnis in dieser Hinsicht zu erzielen, beweisen wir den

Störungssatz von Kato-Rellich: Es seien H ein Hilbertraum, $A : H \supset D_A \to H$ ein selbstadjungierter und $B : H \supset D_B \to H$ ein symmetrischer linearer Operator mit $D_A \subset D_B$. Es gebe ein $\delta \in [0,1)$ und ein $C \geq 0$, so dass für alle $x \in D_A$ die Abschätzung

$$\|Bx\| \leq \delta \|Ax\| + C\|x\|$$

gilt. Dann ist $A+B : D_A \to H$ selbstadjungiert.

Bem.: (1) Der Satz gilt insbesondere auch für den Fall, dass B stetig und selbstadjungiert ist. Dann kann man nämlich $\delta = 0$ wählen.

(2) Ein Operator B wie im Störungssatz wird häufig als <u>Kato-Störung</u> (des Operators A) bezeichnet.

(3) Zum Beweis möchte ich die beiden folgenden Kriterien bezüglich des Spektrums selbstadjungierter Operatoren verwenden:

(i) Ein symmetrischer Operator A auf einem Hilbertraum H ist selbstadjungiert, wenn ein $\lambda \in \mathbb{C}$ existiert, sodass $\lambda I - A$ <u>und</u> $\bar{\lambda} I - A : D_A \to H$ surjektiv sind. (Lemma 1 in Abschnitt 3.1)

(ii) Ist $A : H \supset D_A \to H$ selbstadjungiert, so ist $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

Begründung von (ii): Zunächst haben wir allein aufgrund der Symmetrie von A für jedes $\lambda = \mu + i\delta$, $\mu, \delta \in \mathbb{R}$ mit $\delta \neq 0$, dass $\|(A \pm \lambda I)x\| \geq |\delta| \|x\|$, s. Bem. zum vorhergehenden Bsp.. Daher ist $A \pm \lambda I : D_A \to H$ injektiv und offen. Ferner ist nach Lemma 3 in Abschnitt 2.4

$$R(A - \lambda I)^{\perp} = \operatorname{Ker}(A^* - \bar{\lambda} I) = \{0\} \qquad (A = A^*),$$

also hat $A-\lambda I : D_A \to H$ ein dichtes Bild.

Nun sei $y \in H$. Dann ex. eine Folge (x_n) in D_A, sodass $y = \lim\limits_{n\to\infty} Ax_n - \lambda x_n$. Wegen $\|x_n - x_m\| \leq \frac{1}{|\varrho|}\|(A-\lambda I)(x_n - x_m)\|$ ist $(x_n)_n$ eine Cauchy-Folge in H und also konvergent. Sei $x = \lim\limits_{n\to\infty} x_n$. Da $A-\lambda I$ abgeschlossen ist, ist $x \in D_A$ und $(A-\lambda)x = y$, d.h. $y \in R(A-\lambda I)$.

Zsf.: $A-\lambda I : D_A \to H$ ist bijektiv und offen, also $(A-\lambda I)^{-1}$ stetig und damit $\lambda \in \varrho(A)$.

Bew. des Störungssatzes:

(1) Reduktion: Nach (i) reicht es zu zeigen: Ist $\varrho \in \mathbb{R}$ und $|\varrho|$ hinreichend groß, so ist

$$A + B - i\varrho I : D_A \to H$$

surjektiv. Dabei können wir nach (ii) darauf zurückgreifen, dass für $\varrho \in \mathbb{R}\setminus\{0\}$ $(A-i\varrho)^{-1} : H \to D_A$ bijektiv und stetig ist. Skizze:

$$\begin{tikzcd}
 & D_A \arrow[dr, "A+B-i\varrho I"] & \\
H \arrow[ur, "(A-i\varrho)^{-1}"] \arrow[rr, "(A+B-i\varrho I)(A-i\varrho I)^{-1}"'] & & H
\end{tikzcd}$$

Z.z. ist also: $(A+B-i\varrho I)(A-i\varrho)^{-1} = I + B(A-i\varrho)^{-1} : H \to H$ ist surjektiv. Nach dem Satz über die Neumannsche Reihe ist dafür hinreichend:

(2) Wenn $|\delta|$ hinreichend groß ist, gilt

$$B(A-i\delta I)^{-1} \in L(H) \quad \text{und} \quad \| B(A-i\delta I)^{-1} \| < 1 .$$

Nun ist nach Vor. für alle $y \in H$ $(A-i\delta I)^{-1} y \in D_A \subset D_B$ und

$$\| B(A-i\delta I)^{-1} y \| \leq \delta \, \| A(A-i\delta)^{-1} y \| + c \, \| (A-i\delta)^{-1} y \| .$$

Für $x \in D_A$ haben wir

$$\| (A-i\delta I)x \|^2 = \| Ax \|^2 + \delta^2 \|x\|^2 ,$$

also $\|Ax\| \leq \|(A-i\delta I)x\|$. Mit $x = (A-i\delta)^{-1} y$ also $\|A(A-i\delta)^{-1} y\| \leq \|y\|$ und wegen $\|(A-i\delta)^{-1} y\| \leq \frac{1}{|\delta|} \|y\|$ insgesamt

$$\| B(A-i\delta I)^{-1} y \| \leq \delta \, \|y\| + \frac{c}{|\delta|} \|y\| \leq \left(\delta + \frac{c}{|\delta|}\right) \|y\| .$$

Jetzt müssen wir nur noch $|\delta|$ so groß wählen, dass $\delta + \frac{c}{|\delta|} < 1$ wird. $\square$

Um den Störungssatz anwenden zu können, benötigen wir noch zwei Ungleichungen:

(i) Die Lyapunovsche Ungleichung: Es seien $1 \leq p_0 < p < p_1 < \infty$ und $\theta \in (0,1)$, so dass $\frac{1}{p} = \frac{1-\theta}{p_0} + \frac{\theta}{p_1}$. Dann gilt für alle $f \in L^{p_0} \cap L^{p_1}$: $\|f\|_p \leq \|f\|_{p_0}^{1-\theta} \|f\|_{p_1}^{\theta}$.

Bew.: Wir wählen r_0, r_1 so, dass $\frac{1}{r_0} = \frac{1-\theta}{p_0}$ und $\frac{1}{r_1} = \frac{\theta}{p_1}$.

Dann gilt $\frac{1}{p} = \frac{1}{r_0} + \frac{1}{r_1}$ und die Hölder-Ungleichung ergibt

$$\|f\|_p = \| |f|^{1-\theta} |f|^{\theta} \|_p \le \| |f|^{1-\theta} \|_{r_0} \, \| |f|^{\theta} \|_{r_1}$$

$$= \|f\|_{(1-\theta)r_0}^{1-\theta} \, \|f\|_{\theta r_1}^{\theta} = \|f\|_{p_0}^{1-\theta} \, \|f\|_{p_1}^{\theta}.$$

(ii) Den Sobolevschen Einbettungssatz: Es gelten mit stetigen Einbettungen

- $W^{k,p}(\mathbb{R}^n) \subset L^q(\mathbb{R}^n)$, falls $1 \le p \le q < \infty$ und $k - \frac{n}{p} \ge -\frac{n}{q}$;
- $W^{k,p}(\mathbb{R}^n) \subset C_{(0)}(\mathbb{R}^n)$, falls $k > \frac{n}{p}$.

Einen vollständigen Bew. finden Sie z.B. in: Gilbarg/Trudinger, Elliptic PDE of 2nd order, Thm. 7.10 + Cor. 7.11. Hier nur ein einfacher Bew. für den Fall $p=2$ und $k - \frac{n}{p} > -\frac{n}{q}$:

$$\|f\|_q \lesssim \|\hat{f}\|_{q'}, \quad \left(\tfrac{1}{q} + \tfrac{1}{q'} = 1,\ q \ge 2,\ \text{Hausdorff-Young, Vorl. Harm. Ana}\right)$$

$$= \| \langle \xi \rangle^{-k} (\langle \xi \rangle^{k} \hat{f}) \|_{q'}, \quad \left(\langle \xi \rangle = (1+|\xi|^2)^{\frac{1}{2}}\right)$$

$$\le \| \langle \xi \rangle^{-k} \|_r \, \| \langle \xi \rangle^{k} \hat{f} \|_2 \quad \left(\text{sofern } \tfrac{1}{q'} = \tfrac{1}{r} + \tfrac{1}{2}, \text{ Hölder}\right)$$

$$\lesssim \|f\|_{H^{k}} \lesssim \|f\|_{W^{k,2}}$$

falls $\int_{\mathbb{R}^n} \langle \xi \rangle^{-kr} d\xi = \omega_n \cdot \int_0^\infty \rho^{n-1} \langle \rho \rangle^{-kr} d\rho < \infty$ ist,

was wiederum für $n-1-kr < -1 \iff k > \frac{n}{r} = \frac{n}{q'} - \frac{n}{2} = \frac{n}{2} - \frac{n}{q}$ der Fall ist. Letzteres ist vorausgesetzt.

Damit können wir zeigen:

Lemma 1: Sei $N \in \mathbb{N}$ fest und n die Raumdimension. Für $j \in \{1, ..., N\}$ seien $p_j \in (\frac{n}{2}, \infty]$ bzw. $p_j \geq 2$ im Fall $n \leq 3$ und $V_j \in L^{p_j}(\mathbb{R}^n)$ sowie $V = \sum_{j=1}^{N} V_j$. Dann ist $\Delta - V : L^2(\mathbb{R}^n) \supset H^2(\mathbb{R}^n) \to L^2(\mathbb{R}^n)$ selbstadjungiert.

Bew.: Es reicht z.z., dass der Multiplikator mit V eine Kato-Störung von $\Delta : H^2(\mathbb{R}^n) \to L^2(\mathbb{R}^n)$ ist. Dazu sei $u \in H^2(\mathbb{R}^n)$. Dann ergibt Hölder

$$\|Vu\|_2 \leq \sum_{j=1}^{N} \|V_j u\|_2 \leq \sum_{j=1}^{N} \|V_j\|_{p_j} \|u\|_{q_j},$$

falls $\frac{1}{2} = \frac{1}{p_j} + \frac{1}{q_j}$. Die jeweils zweiten Faktoren verarbeiten wir weiter mit Lyapunov und Sobolev zu

$$\|u\|_{q_j} \leq \|u\|_2^{1-\theta_j} \|u\|_{r_j}^{\theta_j} \quad (\text{mit } r_j = q_j + \delta,\ \delta \text{ ggf. sehr klein})$$

$$\leq \varepsilon \|u\|_{r_j}^{\theta_j} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \|u\|_2^{1-\theta_j} \quad (\varepsilon > 0, \text{ wird später sehr klein gewählt})$$

$$\leq \varepsilon^{\frac{1}{\theta_j}} \|u\|_{r_j} + \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{1-\theta_j}} \|u\|_2 \quad \left(\text{Young: } ab \leq \frac{a^q}{q} + \frac{b^{q'}}{q'}\right)$$

$$\leq \varepsilon^{\frac{1}{\theta_j}} C_j \|u\|_{H^2} + \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{1-\theta_j}} \|u\|_2,$$

wobei im letzten Schritt C_j die Konstante im Sobolevschen Einbettungssatz bezeichnet. Dieser ist anwendbar, wenn

$$2 - \frac{n}{2} > -\frac{n}{r_j} \underset{\substack{\text{Wahl} \\ \text{von } \delta > 0}}{\Longleftarrow} 2 - \frac{n}{2} > -\frac{n}{q_j} \underset{\frac{1}{q_j} = \frac{1}{2} - \frac{1}{p_j}}{=} \frac{n}{p_j} - \frac{n}{2} \iff p_j > \frac{n}{2},$$

...

wie vorausgesetzt. Damit sind wir angekommen bei

$$\| Vu \|_2 \leq \left(\sum_{j=1}^{N} \| V_j \|_{p_j} \, \varepsilon^{\frac{1}{\theta_j}} C_j \right) \|u\|_{H^2} + C_\varepsilon \|u\|_2$$

Jetzt wählen wir $\varepsilon > 0$ so klein, dass

$$\delta := \sum_{j=1}^{N} \| V_j \|_{p_j} \, \varepsilon^{\frac{1}{\theta_j}} C_j < 1 .$$

Dann haben wir

$$\| Vu \|_2 \leq \delta \|u\|_{H^2} + C_\varepsilon \|u\|_2 \leq \delta \| \Delta u \|_2 + (C_\varepsilon + \delta) \|u\|_2 . \square$$

Ein konkretes Bsp.: In $n = 3$ Raumdimensionen sei

$$V(x) = -\frac{e^2}{|x - x_0|} , \text{ d.h. } \hat{H} = \Delta + \frac{e^2}{|x - x_0|} .$$

Bis auf einen positiven Faktor ist V das Coulomb-Potential einer Ladung im Punkt x_0, z.B. eines Neutrons in einem Wasserstoff-Atom, das anziehend auf ein Elektron in der Hülle wirkt. ($e > 0$ ist die Ladung des Neutrons, $-e$ die des Elektrons.) Beh.: $\hat{H} : L^2(\mathbb{R}^3) \supset H^2(\mathbb{R}^3) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ ist selbstadjungiert.

Bew.: Es reicht zu zeigen, dass V eine kato-Störung von $\Delta : L^2(\mathbb{R}^3) \supset H^2(\mathbb{R}^3) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$ ist. Dazu zerlegen wir

$$V(x) = -e^2 |x - x_0|^{-1} \left(\chi_{B_1(x_0)}(x) + \chi_{B_1(x_0)^c}(x) \right) = -e^2 (V_1(x) + V_2(x))$$

wobei $V_2(x) = |x - x_0|^{-1} \chi_{B_1(x_0)^c}(x) \Longrightarrow V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$

Andererseits ist

$$\|V_1\|_2^2 = \int_{\mathbb{R}^3 \supset B_1(x_0)} |x-x_0|^{-2} d^3x = 4\pi \int_0^1 r^{-2} \cdot r^2 dr = 4\pi < \infty,$$

also $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Lemma 1 ergibt die Beh..

Bem.: (1) Die Aussage gilt ebenso für Mehrteilchensysteme, d.h. für $V(x) = \sum_{k=1}^{N} \frac{\lambda_k}{|x-x_k|}$, unabhängig vom Vorzeichen der λ_k.

(2) Eine Kato-Störung ändert zwar nichts an der Selbstadjungiertheit, sie kann das Spektrum des Operators jedoch deutlich verändern und damit auch die Gestalt der von $i\hat{H} = i(\Delta - V)$ erzeugten unitären Gruppe. Z.B. wissen wir, dass

$$\sigma(\Delta) = (-\infty, 0],$$

für $\hat{H} = \Delta - V$, $V(x) = -\frac{e^2}{|x-x_0|}$ kommt jedoch eine ganze Folge $(\lambda_n)_n$ positiver Eigenwerte endlicher Vielfachheit hinzu, die gegen Null konvergiert. In diesem Fall enthält die von $i\hat{H}$ erzeugte unitäre Gruppe einen Anteil der Form

$$U(t)u_0 = \sum_{n=1}^{\infty} e^{it\lambda_n} \langle u_0, e_n \rangle e_n + \ldots,$$

wobei die $(e_n)_n$ ein nicht vollständiges ONS aus Eigen~~funktionen~~vektoren e_n zum EW λ_n bilden.

(Die genaue Analyse umfasst eine umfangreiche Rechnung, s. Triebel, Hans: Higher Analysis, Chap. 7.3.3/4)

(3) Es gibt eine Reihe von Untersuchungen darüber, wann für ein Potential $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ der Hamilton-Operator $\hat{H} = \Delta - V$ mit Definitionsbereich $D_{\hat{H}} \supset C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ noch (wesentlich) selbstadjungiert ist. Zu den Highlights gehört:

Katos L^2_{loc}-Theorem (Tosio Kato, 1972): Es sei $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ und $V(x) \geq 0$ λ^n-f.ü.. Dann ist

$$\hat{H} = \Delta - V : L^2(\mathbb{R}^n) \supset D_{\hat{H}} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

mit Definitionsbereich

$$D_{\hat{H}} = \{u \in L^2(\mathbb{R}^n) : (\Delta - V)u \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

$$(= \{u \in H^2(\mathbb{R}^n) : Vu \in L^2(\mathbb{R}^n)\} = D_\Delta \cap D_V)$$

selbstadjungiert.

(Zitiert nach: Barry Simon: A comprehensive Course in Analysis, Part 4: Operator Theory, pp. 611, mit Beweis)

Folgerung: Ist $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ nach unten beschränkt, so ist $\hat{H} = \Delta - V$ mit Def. $D_{\hat{H}}$ wie oben selbstadjungiert. (Folgt z.B. aus Katos Theo. und dem Störungssatz.) Das trifft z.B. zu auf

$$V(x) = |x|^{2k} + P(x) \quad (x \in \mathbb{R}^n, k \in \mathbb{N}),$$

wenn $P(x)$ ein Polynom mit $\deg(P) \leq 2k-1$ ist, insbesondere auf das sog. Oszillatorpotential

$$V(x) = |x|^2.$$

Bem.: Simon weist darauf hin, dass das Potential

$$V(x) = -|x|^{-2},$$

das für $\underline{\underline{n \geq 5}}$ in $L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ liegt, in folgendem Sinn einen Grenzfall darstellt:

- Wenn $\beta > 0$ hinreichend groß ist, ist $H = \Delta - V$ auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ nicht wesentlich selbstadjungiert;
- es gibt $\varepsilon > 0$ (klein!), so dass für alle $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ mit $V(x) \geq -\varepsilon |x|^{-2}$ die Aussage in Katos Thm. gilt.

Bsp.: Schrödingergleichung mit Oszillator-Potenzial
$V(x) = x^2$ auf $\mathbb{R}$ bzw. $L^2(\mathbb{R})$

Wir betrachten – der Einfachheit halber nur in einer Raumdimension – die Schrödinger-Gleichung

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = \hat{H} u$$

(Achtung! VZ-Wechsel gegenüber der bisherigen Darstellung!)

mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right) : L^2(\mathbb{R}) \supset \mathcal{D}_{\hat{H}} \longrightarrow L^2(\mathbb{R})$$

mit Definitionsbereich

$$\mathcal{D}_{\hat{H}} = \{ u \in L^2(\mathbb{R}) : \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right) u \in L^2(\mathbb{R}) \},$$

der nach Katos Thm. selbstadjungiert ist, was unsere nachfolgende Analyse dieses speziellen Falles ebenfalls zeigen wird. Nach dem Satz von Stone erzeugt $-i\hat{H}$ eine unitäre Gruppe $(U(t))_{t\in\mathbb{R}}$ auf $L^2(\mathbb{R})$, so dass dass Cauchy-Problem

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = \hat{H}u, \qquad u(0) = u_0 \in D_{\hat{H}}$$

eindeutig gelöst wird durch $u(t) = U(t)u_0$. In diesem Fall können wir die Gestalt von $U(t)$ (recht) genau bestimmen.

1. Beobachtung: Für die Gaussfunktion $G(x) = e^{-x^2/2}$ gilt $G'(x) = -xG(x) \Rightarrow G''(x) = (x^2-1)G(x)$

$$\Rightarrow \hat{H}G(x) = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right)G(x) = \frac{1}{2}G(x).$$

G ist ein Eigenvektor von $\hat{H}$ zum Eigenwert $\lambda_0 = \frac{1}{2}$.

2. Wir definieren die Operatoren

$$b := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right) \quad \Longrightarrow \quad b^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{d}{dx}\right) \qquad \text{und}$$

$$N := b^*b = \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(x + \frac{d}{dx}\right) = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - I\right)$$

$$= \hat{H} - \frac{1}{2}I. \quad (N = \text{"Besetzungszahloperator"})$$

Der Definitionsbereich von b möge $S(\mathbb{R})$ enthalten.

Feststellung: Genau dann ist $f \in D_{\hat{H}}$ ein Eigenvektor von N zum Eigenwert λ, wenn f ein Eigenvektor von $\hat{H}$ zum Eigenwert $\lambda + \frac{1}{2}$ ist

$$Nf = \lambda f \iff \hat{H}f = \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)f.$$

3. Nun setzt man $H_0 := \pi^{-\frac{1}{4}} G$, so dass $\| H_0 \|_2 = 1$, und rekursiv für $n \geq 1$:

$$H_n := \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot b^* H_{n-1} .$$

Auf diese Weise erhält man die Folge $(H_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ der Hermite-Funktionen. Hiervon ist bekannt

- $H_n = p_n \cdot G$ mit einem Polynom p_n vom Grad $\deg(P_n) = n$. p_n ist gerade (ungerade), wenn n gerade (ungerade) ist.
- $(H_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ ist eine ON <u>Basis</u> von $L^2(\mathbb{R})$.
- $N H_n = n H_n$ bzw. $\hat{H} H_n = (n + \frac{1}{2}) H_n$ (Induktion, $n = 0$ ist gerade unsere "1. Beobachtung".)

(vgl. Ü zur Harmonischen Analysis im SoSe 2022, Blatt 5, A16)

Aus der Vollständigkeit des ONS $(H_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ können wir für $u \in D_{\hat{H}}$ schließen, dass

$$\hat{H} u = \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} \langle u, H_n \rangle H_n = \sum_{n=0}^{\infty} \langle u, H_n \rangle \hat{H} H_n = \sum_{n=0}^{\infty} (n + \tfrac{1}{2}) \langle u, H_n \rangle H_n$$

und laut Problem 9

$$D_{\hat{H}} = \{ u \in L^2(\mathbb{R}) : \sum_{n=0}^{\infty} (n + \tfrac{1}{2})^2 \, |\langle u, H_n \rangle|^2 < \infty \}$$

Es ist $\sigma(\hat{H}) = \sigma_p(\hat{H})$, die Eigenwerte sind <u>einfach</u> und die Eigenwertfolge ist <u>diskret</u>, $\hat{H} = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right)$ besitzt also ein <u>reines Punktspektrum</u>.

Schließlich können wir die von $-i\hat{H}$ erzeugte unitäre Gruppe explizit angeben. Es ist

$$U(t)u_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-it(n+\frac{1}{2})} \langle u_0, H_n \rangle H_n .$$

Im Mehrdimensionalen ändert sich nicht viel. Betrachten wir allgemeiner

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(-\Delta + |x|^2) : L^2(\mathbb{R}^n) \supset \mathcal{D}_{\hat{H}} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

mit Definitionsbereich

$$\mathcal{D}_{\hat{H}} = \{ u \in L^2(\mathbb{R}^n) : (-\Delta + |x|^2) u \in L^2(\mathbb{R}^n) \},$$

so ist $\hat{H}$ nach Katos Thm. ebenfalls selbstadjungiert.

Mit $\quad H_{\vec{k}}(x) = H_{k_1}(x_1) \cdot \ldots \cdot H_{k_n}(x_n), \quad \vec{k} = (k_1, \ldots, k_n)$

erhält man eine ONB von $L^2(\mathbb{R}^n)$, für die

$$\hat{H} H_{\vec{k}} = (|\vec{k}| + \tfrac{1}{2}) H_{\vec{k}} \; , \quad |\vec{k}| = \sum_{j=1}^{n} k_j .$$

Die Eigenwerte $|\vec{k}| + \frac{1}{2}$ sind nicht mehr einfach ($|\vec{k}| = |\vec{e}|$ ist für $\vec{k} \neq \vec{e}$ möglich), haben aber endliche Vielfachheit. Die Eigenwertfolge ist diskret. Für $\hat{H}$ erhalten wir die Darstellung

$$\hat{H} u = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{N}_0} (|\vec{k}| + \tfrac{1}{2}) \langle u, H_{\vec{k}} \rangle H_{\vec{k}},$$

wobei das Skalarprodukt jetzt dasjenige auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist.

Für die von $-i\hat{H}$ erzeugte unitäre Gruppe $(U(t))_{t \in \mathbb{R}}$ ergibt sich

$$U(t)u_0 = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{N}_0^n} e^{-it(|\vec{k}| + \frac{1}{2})} \langle u_0, H_{\vec{k}} \rangle H_{\vec{k}} .$$

Δ

Das Beispiel des Oszillator-Potentials erweist sich als typisch für eine ganze Klasse von Potentialen:

Proposition 2: Es sei $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ stetig und $\lim_{x \to \infty} V(x) = \infty$. Dann ist der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\Delta + V : L^2(\mathbb{R}^n) \supset D_{\hat{H}} = \{u \in L^2(\mathbb{R}^n) : (-\Delta + V)u \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \to L^2(\mathbb{R}^n)$$

selbstadjungiert und besitzt ein reines Punktspektrum.

Folgerung: Die Folge $(\lambda_k)_k$ der Eigenwerte von $\hat{H}$ ist per Def. diskret, und, weil $\langle Hu, u\rangle \geq \min_{x \in \mathbb{R}^n} V(x) \|u\|_2^2$ für alle $u \in D_{\hat{H}}$ gilt, nach unten beschränkt, so dass $\lim_{k \to \infty} \lambda_k = \infty$. Nach dem bereits erwähnten Thm. 4.5.1 aus Triebels "Higher Analysis" existiert eine ONB $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$ von $L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $\hat{H} e_k = \lambda_k e_k$, so dass

$$\hat{H}u = \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \langle u, e_k \rangle e_k \quad \forall u \in D_{\hat{H}} \quad \text{und} \quad e^{-it\hat{H}} u_0 = \sum_{k \in \mathbb{N}} e^{-it\lambda_k} \langle u_0, e_k \rangle e_k .$$

Bew. der Prop.: Da V nach unten beschränkt ist, können wir o.E. $V(x) \geq 1$ $\forall x \in \mathbb{R}^n$ annehmen. (Andernfalls addieren wir λI – für ein hinreichend großes λ – zu $\hat{H}$ hinzu, was an den Behauptungen nichts ändert.) Dann ist $\hat{H}$ selbstadjungiert nach Katos Theorem und positiv definit, und für die Aussage über das Spektrum ist nach dem Rellichschen Kriterium zu zeigen, dass der Energieraum

$$H_{\hat{H}} = \{ u \in L^2(\mathbb{R}^n) : \|u\|_{H_{\hat{H}}} < \infty \} \subset L^2(\mathbb{R}^n)$$

mit einer kompakten Einbettung. Hierbei ist

$$\|u\|^2_{H_{\hat{H}}} = \int_{\mathbb{R}^n} (-\Delta u(x) + V(x)u(x))\bar{u}(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla u(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 dx.$$

Also sei eine Folge $(u_k)_{k\in\mathbb{N}}$ in $H_{\hat{H}}$ gegeben mit $\|u_k\|_{H_{\hat{H}}} \leq 1$.

Zu $N \in \mathbb{N}$ wählen wir $\chi_N \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\chi_N|_{B_N} \equiv 1$, $\chi_N|_{B^c_{N+1}} \equiv 0$ und $0 \leq \chi_N \leq 1$. (Hierbei: $B_N = B_N(0)$)

Wir definieren $u_{k,N} = \chi_N \cdot u_k$. Dann ist $u_{k,N}|_{B_{N+1}} \in H^1_0(B_{N+1})$. Die Folge $(u_{k,N}|_{B_{N+1}})_{k\in\mathbb{N}}$ besitzt also nach dem Einbettungssatz von Rellich-Kondrachov eine in $L^2(B_{N+1})$ konvergente Teilfolge. Für wachsendes N wählen wir sukzessive Teilfolgen aus:

$$(u_{k,1})_{k\in I_1} \quad \text{mit} \quad u_{k,1} \xrightarrow[I_1 \ni k \to \infty]{\text{mit Konvergenz in } L^2(\mathbb{R}^n)} V_1, \quad \operatorname{supp} V_1 \subset B_2$$

$$(u_{k,2})_{k\in I_2} \quad \text{"} \quad u_{k,2} \xrightarrow[I_2 \ni k \to \infty]{} V_2, \quad \operatorname{supp} V_2 \subset B_3$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$(u_{k,N})_{k\in I_N} \quad \text{"} \quad u_{k,N} \xrightarrow[I_N \ni k \to \infty]{} V_N, \quad \operatorname{supp} V_N \subset B_N.$$

Hierbei sei stets $I_{N+1} \subset I_N$, so dass $V_{N+1}|_{B_N} = V_N|_{B_N}$. $(*)$

Ferner sei die Auswahl der Teilfolgen so, dass man auch punktweise f.ü.-Konvergenz hat. Dann

definiert man $u(x) := V_N(x)$, falls $|x| \leq N$.
Wegen (*) ist u wohldefiniert.

Jetzt wählen wir eine Indexfolge $(k_N)_{N \in \mathbb{N}}$ mit
$k_N \in I_N$ und $\int_{B_N} |u_{k_N}(x) - V_N(x)|^2 dx \leq \frac{1}{N^2}$.
(Das ist möglich nach der letzten Zeile im Diagramm oben.) Das bedeutet aber mit unserer Def. von u:

$$\int_{B_N} |u_{k_N}(x) - u(x)|^2 dx \leq \frac{1}{N^2}.$$

Wir haben also $\lim_{N \to \infty} u_{k_N} = u$ in $L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ und punktweise fast überall.

Nun sei $\varepsilon > 0$ vorgegeben. Dann ex. $R > 0$, sodass für alle $x \in \mathbb{R}^n$ mit $|x| \geq R$: $\frac{1}{V(x)} < \varepsilon$ und daher für alle $N \geq R$

$$\int_{B_N^c} |u(x)|^2 dx \leq \sup_{N \in \mathbb{N}} \int_{B_N^c} |u_{k_N}(x)|^2 dx$$

$$\leq \varepsilon \cdot \sup_{N \in \mathbb{N}} \int_{B_N^c} V(x) |u_{k_N}(x)|^2 dx \leq \varepsilon \sup_{k \in \mathbb{N}} \|u_k\|_{H_{\hat{H}}} \leq \varepsilon.$$

Da $\int_{B_N} |u(x)|^2 dx < \infty$ ist, folgt daraus $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und

$$\|u - u_{k_N}\|_2 \leq \|(u - u_{k_N}) \chi_N\|_2 + \|(u - u_{k_N})(1 - \chi_N)\|_2$$

$$\leq \frac{1}{N} + \|u\|_{L^2(B_N^c)} + \|u_{k_N}\|_{L^2(B_N^c)} \leq \frac{1}{N} + 2\sqrt{\varepsilon}.$$

$\Rightarrow \limsup_{N \to \infty} \|u - u_{k_N}\| \leq 2\sqrt{\varepsilon}$. Gilt für alle $\varepsilon > 0$ und daher ist $\lim_{N \to \infty} u_{k_N} = u$ in $L^2(\mathbb{R}^n)$. $\square$