

Prof. Dr. M. Griesemer, Universität Stuttgart

Mathematische Methoden der Quantenmechanik

Vorlesungsmitschrieb von Jan-Cornelius Molnar

Stuttgart, Sommersemester 2010

Version: 10. Oktober 2010 19:03

Für Hinweise auf Druckfehler und Kommentare jeder Art bin ich dankbar. Viel Spaß!¹

¹Prof. Dr. M. Griesemer, Universität Stuttgart, marcel.griesemer@mathematik.uni-stuttgart.de;
Jan-Cornelius Molnar, jan.molnar@studentpartners.de

Inhaltsverzeichnis

1	Eigenschaften von Wellenfunktionen	5
2	Exponentieller Abfall von Eigenfunktionen	13
3	Spektrum und Resolvente	19
■	Grundlegende Definitionen	19
4	Symmetrische und selbstadjungierte Operatoren	27
■	Der adjungierte Operator	27
■	Symmetrie und Selbstadjungiertheit	29
■	Wesentliche Selbstadjungiertheit	32
5	Multiplikations- und Schrödingeroperator	37
■	Multiplikationsoperatoren	37
■	Schrödingeroperatoren	39
6	Funktionalkalkül und Spektralsatz	41
6-A	Messbarer Funktionalkalkül	41
6-B	Spektralmaß	43
6-C	Spektralsatz	48
7	Kompakte Operatoren und Stabilität des wesentlichen Spektrums	53

1 Eigenschaften von Wellenfunktionen

1.1 **Lemma von Riemann-Lebesgue** Sei $u \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann ist $\hat{u} \in L^\infty(\mathbb{R}^n) \cap C(\mathbb{R}^n)$, $\|\hat{u}\|_\infty \leq (2\pi)^{-n/2} \|u\|_1$ und

$$\hat{u}(p) \rightarrow 0, \quad |p| \rightarrow \infty. \quad \times$$

» *Beschränktheit.* Sei $u \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann ist

$$\begin{aligned} \hat{u}(p) &= (2\pi)^{-n/2} \int e^{-ipx} u(x) \, dx, \\ \Rightarrow |\hat{u}(p)| &\leq (2\pi)^{-n/2} \int |u(x)| \, dx = (2\pi)^{-n/2} \|u\|_1. \end{aligned}$$

Stetigkeit. Anwendung des Satz von Lebesgue ergibt für $|h| \rightarrow 0$

$$\hat{u}(p+h) - \hat{u}(p) = (2\pi)^{-n/2} \int e^{-ipx} \underbrace{(e^{-ihx} - 1)}_{-0} u(x) \, dx \rightarrow 0,$$

denn $|\text{Integrand}| \leq 2|u| \in L^1(\mathbb{R}^n)$.

Sei $\varepsilon > 0$. Da $S(\mathbb{R}^n)$ dicht in $L^1(\mathbb{R}^n)$ liegt, gibt es ein $v \in S(\mathbb{R}^n)$, so dass $\|u - v\|_1 < \frac{\varepsilon}{2}$. Da $\hat{v} \in S(\mathbb{R}^n)$ gibt es außerdem ein $R > 0$ mit

$$|\hat{v}(p)| < \frac{\varepsilon}{2}, \quad |p| \geq R.$$

Also gilt für $|p| \geq R$,

$$|\hat{u}(p)| \leq |\hat{u}(p) - \hat{v}(p)| + |\hat{v}(p)| \leq (2\pi)^{-n/2} \|u - v\|_1 + |\hat{v}(p)| < \varepsilon. \quad \ll$$

1.2 **Korollar** Sei $u \in L^1(\mathbb{R}^n)$ und $|x|^k u \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann ist $\hat{u} \in C^k(\mathbb{R}^n)$ und für $|\alpha| \leq k$ gilt

$$\partial^\alpha \hat{u}(p) = \widehat{(-ix)^\alpha u} \rightarrow 0, \quad |p| \rightarrow \infty. \quad \times$$

» *Induktion über $|\alpha|$* . Der Fall $|\alpha| = 0$ ist klar.

Sei $j \in \{1, \dots, n\}$ und $e_j = (0, \dots, 1, \dots, 0)$ der j -te Basisvektor. Dann ist

$$\frac{1}{h} \left(\hat{u}(p + he_j) - \hat{u}(p) \right) = (2\pi)^{-n/2} \int e^{-ipx} \underbrace{\frac{1}{h} (e^{-ihx_j} - 1)}_{\rightarrow -ix_j} u(x) dx,$$

wobei $|\text{Integrand}| \leq 2|u| |x_j| \in L^1(\mathbb{R}^n)$ und daher nach Lemma 1.1 und dem Satz von Lebesgue

$$\partial_j \hat{u}(p) = (-ix_j) \hat{u}(p) \rightarrow 0, \quad |p| \rightarrow \infty.$$

Damit ist der Induktionsschritt von $|\alpha| \leq k-1$ nach $|\alpha| \leq k$ beweisen. (Induktionsannahme auf $\partial^{\alpha-e_j} u$ anwenden). «

Folgerung. Falls $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $\hat{u} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $|p|^k \hat{u} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, dann ist $u \in C^k(\mathbb{R}^n)$ und es gilt

$$\partial^\alpha u = \mathcal{F}^{-1}(ip)^\alpha \mathcal{F}u. \quad \rightarrow$$

Bemerkung. Insbesondere gilt diese Identität für alle $u \in S(\mathbb{R}^n)$. Die rechte Seite ist aber auch dann sinnvoll (wohldefiniert), wenn $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $|p|^{|\alpha|} \hat{u} \in L^2(\mathbb{R}^n)$.
→

Dies motiviert die folgende

Definition Für jedes $s \geq 0$ definieren wir einen Innenproduktraum

$$H^s(\mathbb{R}^n) := \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^n) : \hat{u}(p) |p|^s \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\},$$

$$\langle u, v \rangle_s := \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\hat{u}(p)} \hat{v}(p) (1 + p^2)^s dp.$$

$H^s(\mathbb{R}^m)$ heißt *Sobolevraum*. ✕

Aus der Plancherel-Gleichung folgt unmittelbar, dass $H^0(\mathbb{R}^n) = L^2(\mathbb{R}^n)$ und weiterhin gilt

$$s > t \geq 0 \Rightarrow H^s(\mathbb{R}^n) \subset H^t(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n).$$

1.3 **Satz** Für jedes $s \geq 0$ ist $H^s(\mathbb{R}^n)$ ein Hilbertraum und $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ ist dicht in $H^s(\mathbb{R}^n)$. ✕

» Einen Beweis findet man z.B. in [Fun07]. «

1.4 **Theorem (Sobolev-Lemma)** Sei $u \in H^s(\mathbb{R}^n)$ und $k \in \mathbb{N}_0$ mit $k < s - n/2$. Dann gelten

$$1) u \in C^k(\mathbb{R}^n) \text{ und } \partial^\alpha u(x) = \mathcal{F}^{-1}((ip)^\alpha \hat{u})(x) \rightarrow 0 \text{ f\u00fcr } |x| \rightarrow \infty, |\alpha| \leq k.$$

$$2) \|\partial^\alpha u\|_\infty = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |\partial^\alpha u(x)| \leq C_{s,k,n} \|u\|_s \text{ f\u00fcr } |\alpha| \leq k. \quad \times$$

» Sei $u \in H^s$ und $s > n/2 + k$. "1)": Wir wenden die Folgerung aus Korollar 1.2 auf u an.

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{u}(p)| \, dp, \int_{\mathbb{R}^n} |p|^k |\hat{u}(p)| \, dp \leq \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |p|^2)^{k/2} |\hat{u}(p)| \, dp \\ & = \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{u}(p)| (1 + |p|^2)^{s/2} (1 + |p|^2)^{k/2-s/2} \, dp \\ & \stackrel{\text{CSB}}{\leq} \|u\|_s \left(\int_{\mathbb{R}^n} (1 + |p|^2)^{k-s} \, dp \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Das Integral ist endlich f\u00fcr $s > n/2 + k$, denn

$$\int_{\mathbb{R}^n} (1 + |p|^2)^{k-s} \, dp = |\mathbb{S}^{n-1}| \int_0^\infty \frac{1}{(1+t^2)^{s-k}} t^{n-1} \, dt$$

wobei $2(s-k) - (n-1) > 1 \Leftrightarrow 2(s-k) > n \Leftrightarrow s-k > n/2$. Mit Korollar 1.2 folgt nun 1) und au\u00dferdem:

"2)": Da $\partial^\alpha u(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ipx} (ip)^\alpha \hat{u}(p) \, dp$ ist folglich

$$|\partial^\alpha u(x)| \leq (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} |p^\alpha| |\hat{u}(p)| \, dp \leq C_{s,p,k} \|u\|_s. \quad \ll$$

Folgerungen. A. $\bigcap_{s \geq 0} H^s(\mathbb{R}^n) \subset C^\infty(\mathbb{R}^n)$.

B. Der maximale Definitionsbereich des Laplace-Operators im \mathbb{R}^3 ist $H^2(\mathbb{R}^3)$. F\u00fcr $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^3)$ gilt folglich $\varphi \in C(\mathbb{R}^n)$ und $\varphi(x) \rightarrow 0$ f\u00fcr $|x| \rightarrow \infty$.

Ist $\varphi \in H^2(\mathbb{R})$, so gilt sogar $\varphi \in C^1(\mathbb{R})$ und $\varphi, \varphi' \rightarrow 0$ f\u00fcr $|x| \rightarrow \infty$.

Ist $\varphi \in H^1(\mathbb{R})$, d.h. $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ und die "kinetische Energie" ist endlich

$$\int_{\mathbb{R}^n} |p|^2 |\hat{\varphi}(p)|^2 \, dp < \infty,$$

so ist $\varphi \in C(\mathbb{R})$ und $\varphi(x) \rightarrow 0$ f\u00fcr $|x| \rightarrow \infty$.

c. Sei $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ und $n \leq 3$. Nach dem Sobolev-Lemma ist dann $\varphi \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ und somit

$$\int_{\mathbb{R}^n} |V\varphi(x)|^2 dx \leq \underbrace{\sup_{x \in \mathbb{R}^n} |\varphi(x)|^2}_{< \infty} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^n} |V(x)|^2 dx}_{< \infty} < \infty,$$

d.h. $V\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

Dies gilt auch für $V \in L^2(\mathbb{R}^n) \oplus L^\infty(\mathbb{R}^n)$, d.h. $V = V_2 + V_\infty$, denn

$$V\varphi = \underbrace{V_2\varphi}_{\in L^2} + \underbrace{V_\infty\varphi}_{\in L^2}.$$

Das Coulomb-Potential $V(x) = -\frac{1}{|x|}$ ist genau von dieser Form:

$$-\frac{1}{|x|} = -\underbrace{\frac{1}{|x|}\chi_{|x| \leq 1}}_{\in L^2} - \underbrace{\frac{1}{|x|}\chi_{|x| > 1}}_{\in L^\infty} \in L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^\infty(\mathbb{R}^3).$$

Somit ist $-\frac{1}{|x|}\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^3)$. \rightarrow

Zur Behandlung des Wasserstoffatoms benötigen wir jedoch noch weitere Ergebnisse.

1.5 **Lemma** Sei $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\varepsilon > 0$. Dann gibt es eine Zerlegung des Potentials

$$V = V_2 + V_\infty, \quad V_2 \in L^2(\mathbb{R}^n), \quad V_\infty \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$$

mit $\|V_2\|_2 < \varepsilon$. \times

» Sei χ_N die charakteristische Funktion der Menge

$$\{x \in \mathbb{R}^n : |V(x)| \leq N\},$$

dann gilt $V = V(1 - \chi_N) + V\chi_N$, wobei $V\chi_N \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ und

$$\|V(1 - \chi_N)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^n} |V(x)|^2 \underbrace{(1 - \chi_N(x))}_{\rightarrow 0} dx \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty$$

für fast alle x nach dem Satz von Lebesgue, denn

$$|V(x)|^2 (1 - \chi_N) \leq |V(x)|^2 \in L^1(\mathbb{R}^n).$$

Wähle nun N so groß, dass $\|V(1 - \chi_N)\| < \varepsilon$ und setze $V_2 := V(1 - \chi_N)$ und $V_\infty := V\chi_N$. \ll

1.6 **Theorem** Sei $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $n \leq 3$. Für jedes $\varepsilon > 0$ gibt es ein $C_\varepsilon \in \mathbb{R}$, so dass

$$\|V\varphi\| \leq \varepsilon \|\Delta\varphi\| + C_\varepsilon \|\varphi\|, \quad \forall \varphi \in H^2(\mathbb{R}^n). \quad \times$$

» Sei $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\varepsilon > 0$ und

$$V = V_2 + V_\infty$$

die Zerlegung nach Lemma 1.5. Dann gilt für $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$

$$\begin{aligned} \|V\varphi\| &= \|V_2\varphi + V_\infty\varphi\| \leq \|V_2\varphi\| + \|V_\infty\varphi\| \leq \|V_2\| \|\varphi\|_\infty + \|V_\infty\|_\infty \|\varphi\| \\ &< \varepsilon \|\varphi\|_\infty + \|V_\infty\|_\infty \|\varphi\|. \end{aligned}$$

Wobei eine leichte Anwendung des Sobolev-Lemmas zeigt

$$\|\varphi\|_\infty \leq c \|\varphi\|_{H^2} \leq C (\|\Delta\varphi\| + \|\varphi\|).$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \|V\varphi\| &\leq \varepsilon (C \|\Delta\varphi\| + C \|\varphi\|) + \|V_\infty\|_\infty \|\varphi\| \\ &= \varepsilon C \|\Delta\varphi\| + (\varepsilon C + \|V_\infty\|_\infty) \|\varphi\|. \quad \ll \end{aligned}$$

Definition Für $u \in H^s(\mathbb{R}^n)$ und $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ mit $|\alpha| \leq s$ definiert man nun

$$\partial^\alpha u := \mathcal{F}^{-1}((i\rho)^\alpha \hat{u}).$$

$\partial^\alpha u$ heißt *schwache Ableitung* von u . \times

Wenn $|\alpha| < s - n/2$, stimmt nach Theorem 1.4 die schwache Ableitung mit der partiellen Ableitung ∂^α überein.

1.7 **Lemma** Sei $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$ mit $|\alpha| \leq s$. Für $u \in H^s(\mathbb{R}^n)$ gilt $\partial^\alpha u \in H^{s-|\alpha|}(\mathbb{R}^n)$ und

$$\|\partial^\alpha u\|_{s-|\alpha|} \leq \|u\|_s. \quad \times$$

» Blatt 1. «

$\partial^\alpha : H^s(\mathbb{R}^n) \rightarrow H^{s-|\alpha|}(\mathbb{R}^n)$ ist somit eine beschränkte lineare Abbildung.

1.8 **Lemma** Sei $f \in C^m(\mathbb{R}^n)$ beschränkt mit beschränkten partiellen Ableitungen bis zu Ordnung m . Dann ist $f\varphi \in H^m(\mathbb{R}^n)$ für alle $\varphi \in H^m(\mathbb{R}^n)$, $\|f\varphi\|_m \leq C_f \|\varphi\|_m$ und die partiellen Ableitungen von $f\varphi$ lassen sich mit der Leibniz-Regel berechnen

$$\partial^\alpha(f\varphi) = \sum_{\beta \leq \alpha} \partial^\beta f \partial^{\alpha-\beta} \varphi. \quad \times$$

» Wir setzen für diesen Beweis

$$\|\varphi\|_m := \sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha \varphi\|_{L^2}.$$

Diese Norm ist äquivalent zur $\|\cdot\|_s$ -Norm.

Sei zuerst $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Dann ist $f\varphi \in C_0^m(\mathbb{R}^n) \subset H^m(\mathbb{R}^n)$ und

$$\partial^\alpha(f\varphi) = \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \partial^\beta f \partial^{\alpha-\beta} \varphi.$$

Daraus folgt

$$\|\partial^\alpha(f\varphi)\|_{L^2} \leq \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} \underbrace{\|\partial^\beta f\|_{L^2}}_{< \infty} \underbrace{\|\partial^{\alpha-\beta} \varphi\|_{L^2}}_{\leq \|\varphi\|_m} \leq C_{\alpha,f} \|\varphi\|_m$$

und somit

$$\|f\varphi\|_m = \sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha(f\varphi)\|_{L^2} \leq \sum_{|\alpha| \leq m} C_{\alpha,f} \|\varphi\|_m \stackrel{*}{\leq} C_f \|\varphi\|_m.$$

Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ dicht in $H^m(\mathbb{R}^n)$, existiert zu jedem $\varphi \in H^m(\mathbb{R}^n)$ eine Folge $(\varphi_n) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\|\varphi_n - \varphi\|_m \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. Mit (*) folgt nun

$$\|f(\varphi_k - \varphi_l)\| \leq C_f \|\varphi_k - \varphi_l\|_m \rightarrow 0, \quad k, l \rightarrow \infty,$$

also ist $(f\varphi_k)$ eine Cauchyfolge in $H^m(\mathbb{R}^n)$. Da $H^m(\mathbb{R}^n)$ vollständig, existiert ein $\psi \in H^m(\mathbb{R}^n)$ mit

$$\|f\varphi_k - \psi\|_m \rightarrow 0.$$

Andererseits gilt $\varphi_k \rightarrow \varphi$ in $L^2(\mathbb{R}^n)$ und $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ also

$$f\varphi_k \rightarrow f\varphi, \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^n).$$

Folglich ist $\psi = f\varphi$ in $L^2(\mathbb{R}^n)$ und damit insbesondere in $H^m(\mathbb{R}^n)$, d.h.

$$f\varphi_k \rightarrow f\varphi, \quad \text{in } H^m(\mathbb{R}^n).$$

Somit lässt sich (*) auf $H^m(\mathbb{R}^n)$ übertragen.

Die Produktregel folgt nun aus

$$\partial^\alpha(f \cdot \varphi_n) = \sum_{\beta \leq \alpha} \partial^\beta f \partial^{\alpha-\beta} \varphi_n$$

im Limes für $n \rightarrow \infty$, wegen der Stetigkeit der Multiplikation mit f und der Differentiation (Lemma 1.7). «

1.9 **Theorem** Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ messbar, $E \in \mathbb{C}$ und $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ mit

$$-\Delta\varphi + V\varphi = E\varphi.$$

Ist Ω offen und $V|_\Omega \in C^m(\Omega)$ dann ist

$$\varphi|_\Omega \in C^k(\Omega), \quad \text{für } k < m + 2 - n/2. \quad \times$$

» Zu jedem Punkt $x \in \Omega$ existiert ein $\gamma \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\text{supp}(\gamma) \subset \Omega$ und $\gamma = 1$ in einer Umgebung von x .

Es genügt also zu zeigen, dass $\gamma\varphi \in C^k(\mathbb{R}^n)$ für alle $\gamma \in C_0^\infty(\Omega)$. Nach dem Sobolev-Lemma genügt es dazu, zu zeigen, dass

$$\gamma\varphi \in H^{m+2}(\mathbb{R}^n), \quad \gamma \in C_0^\infty(\Omega).$$

Induktion über m . “ $m = 0$ ”: Wegen $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ ist $\gamma\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $\gamma \in C_0^\infty(\Omega)$.

Wir nehmen an, dass $\gamma\varphi \in H^{m+1}(\mathbb{R}^n)$ für alle $\gamma \in C_0^\infty(\Omega)$ und zeigen, dass $\gamma\varphi \in H^{m+2}(\mathbb{R}^n)$ für alle $\gamma \in C_0^\infty(\Omega)$. Es gilt

$$\begin{aligned} \Delta(\gamma\varphi) &= (\Delta\gamma)\varphi + 2\nabla\gamma\nabla\varphi + \gamma\Delta\varphi \\ &= (\Delta\gamma)\varphi + 2\text{div}((\nabla\gamma)\varphi) - 2(\Delta\gamma)\varphi + \gamma\Delta\varphi \\ &= -(\Delta\gamma)\varphi + 2\text{div}((\nabla\gamma)\varphi) + (V - E)\gamma\varphi \end{aligned}$$

Nach Induktionsannahme gilt

$$(\Delta\gamma)\varphi, (\nabla\gamma)\varphi, \gamma\varphi \in H^{m+1}(\mathbb{R}^n).$$

Nach Annahme über V und nach Satz 1.8 ist $(V - E)\gamma\varphi \in H^m(\mathbb{R}^n)$ und auch $\operatorname{div}((\nabla\gamma)\varphi) \in H^m(\mathbb{R}^n)$. Also auch $\Delta(\gamma\varphi) \in H^m(\mathbb{R}^n)$. Daraus folgt, dass $\gamma\varphi \in H^{m+2}(\mathbb{R}^n)$, denn

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} |\widehat{\gamma\varphi}(p)|^2 (1 + p^2)^{m+2} dp &= \int_{\mathbb{R}^n} |\widehat{\gamma\varphi}(p)|^2 (1 + p^2)^m \underbrace{(1 + p^2)^2}_{\leq 2 + 2(p^2)^2} dp \\ &\leq 2 \|\gamma\varphi\|_m^2 + 2 \int_{\mathbb{R}^n} |p^2 \widehat{\gamma\varphi}(p)|^2 (1 + p^2)^m dp \\ &< \infty. \quad \ll \end{aligned}$$

1.10 **Korollar** Sei $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ messbar, $E \in \mathbb{C}$ und $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ mit

$$-\varphi'' + V\varphi = E\varphi.$$

Ist $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall und $V|_I \in C^m(I)$, dann ist $\varphi|_I \in C^{m+2}(I)$. \times

» Nach Theorem 1.9 ist $\varphi|_I \in C^{m+1}(I)$. Wegen

$$\varphi'' = (V - E)\varphi \in C^m(I)$$

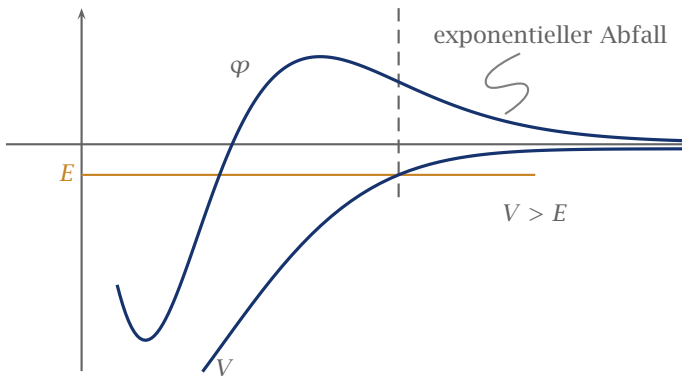
ist $\varphi \in C^{m+1}(I)$. Details für $m = 0$ siehe Übungsaufgabe 2.4. \ll

2 Exponentieller Abfall von Eigenfunktionen

Sei $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ eine C^2 -Lösung der Schrödingergleichung

$$-\varphi'' + V\varphi = E\varphi,$$

wobei $V(x) > E$ für $x > R$.



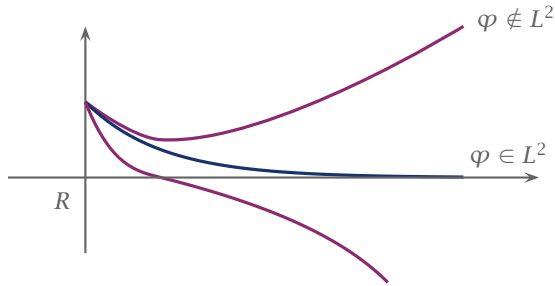
2.1 $-\varphi'' + V\varphi = E\varphi$ mit $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$

Es gilt

$V(x) < E \Rightarrow \varphi''(x), \varphi(x)$ haben verschiedenes Vorzeichen,

$V(x) > E \Rightarrow \varphi''(x), \varphi(x)$ haben gleiches Vorzeichen.

Im Bereich $x > R$ ist $V(x) > E$, also muss φ dort strikt konvex sein wenn $\varphi(x) > 0$, und strikt konkav wenn $\varphi(x) < 0$. Wegen $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ kommt nur der (exponentielle) Abfall $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \varphi(x) = 0$ in Frage. Wir beweisen ein analoges Resultat im \mathbb{R}^n .



2.2 Möglicher Verlauf von φ für $x > R$.

2.1 **IMS-Formel** Sei $H = -\Delta : H^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow H^2(\mathbb{R}^n)$ aufgefasst als linearer Operator und $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R})$ mit $\partial^\alpha f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ für $|\alpha| \leq 2$. Dann gilt

$$fHf = \frac{1}{2} (f^2H + Hf^2) + |\nabla f|^2.$$

auf $H^2(\mathbb{R}^n)$, wobei f , f^2 und $|\nabla f|^2$ als Multiplikationsoperatoren aufzufassen sind.

×

Bemerkung. Der Satz gilt unverändert auch für

$$H = -\Delta + V, \quad V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C},$$

wenn $V : H^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$. \rightarrow

» Nach Satz 1.8 ist $H^2(\mathbb{R}^n)$ invariant unter f und f^2 und somit gilt auf $H^2(\mathbb{R}^n)$,

$$fHf = f^2H + f[H, f] \tag{1}$$

$$fHf = Hf^2 - [H, f]f \tag{2}$$

wobei für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$\begin{aligned} [H, f]\varphi &= (Hf - fH)\varphi \\ &= -\Delta(f\varphi) + f\Delta\varphi \\ &= (-\Delta f)\varphi - 2(\nabla f) \cdot \nabla\varphi. \end{aligned}$$

Also ist

$$\begin{aligned} [H, f]f\varphi &= (-\Delta f)f\varphi - 2(\nabla f) \cdot \nabla(f\varphi) \\ &= (-\Delta f)f\varphi - 2f(\nabla f) \cdot \nabla\varphi - 2|\nabla f|^2\varphi \\ &= f[H, f]\varphi - 2|\nabla f|^2\varphi. \end{aligned} \quad (3)$$

Nach (3) gilt

$$f[H, f] - [H, f]f = 2|\nabla f|^2. \quad (4)$$

Aus (1), (2) und (4) folgt nun die Behauptung nach Addition von (1) und (2). «

Definition Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ messbar mit $V\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$. Wir definieren die **Ionisierungsschwelle** $\Sigma \leq \infty$ von $H = -\Delta + V$ durch

$$\begin{aligned} \Sigma &= \lim_{R \rightarrow \infty} \Sigma_R, \\ \Sigma_R &= \inf \left\{ \langle \varphi, H\varphi \rangle : \varphi \in H^2(\mathbb{R}^n), \|\varphi\| = 1, \varphi(x) = 0 \text{ für } |x| < R \right\}. \quad \times \end{aligned}$$

Anschaulich beschreibt die Ionisierungsschwelle die kleinste Energie des Atoms mit einem Elektron weniger. In den einfachsten Fällen ist $\Sigma = \lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x)$, beim Potential $V = x^2$ ist beispielsweise $\Sigma = \infty$.

2.2 **Theorem** Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ messbar mit $V\varphi \in C^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$. Ist $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ und $H\varphi = E\varphi$, wobei $E < \Sigma$, dann ist $e^{\beta|x|}\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $\beta \in \mathbb{R}$, so dass $E + \beta^2 < \Sigma$. \times

» Sei $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n \rightarrow [0, 1])$ mit

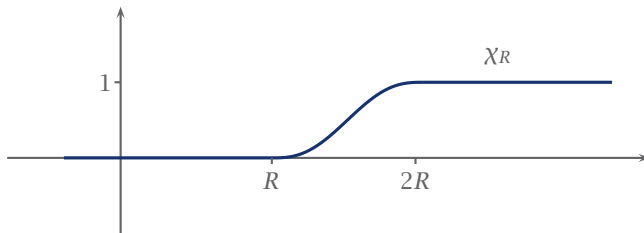
$$\chi(x) = \begin{cases} 1, & |x| \geq 2, \\ 0, & |x| \leq 1 \end{cases}$$

und sei $\chi_R(x) := \chi(R^{-1}x)$ für $R > 0$.

Für $0 < \varepsilon < 1$ definieren wir

$$f(x) = \frac{\beta|x|}{1 + \varepsilon|x|}.$$

Dann gilt $|f| \leq \varepsilon^{-1}\beta$ und $|\nabla f| \leq \beta$ für $|x| > 0$. Sei $G = \chi_R e^f$, dann ist $G \in L^\infty \cap C^\infty(\mathbb{R}^n)$ und $\partial^\alpha G \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ für $|\alpha| \leq 2$.



2.3 Zur Abschneidefunktion.

Aus der IMS-Formel folgt nun

$$\begin{aligned} \langle G\varphi, (H - E)G\varphi \rangle &= \langle \varphi, G(H - E)G\varphi \rangle = \frac{1}{2} \langle \varphi, G^2(H - E)\varphi \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \langle \varphi, (H - E)G^2\varphi \rangle + \langle \varphi, |\nabla G|^2 \varphi \rangle \end{aligned}$$

Da $(H - E)$ ein symmetrischer Operator auf L^2 ist, verschwinden die ersten beiden Terme. Zum dritten Term betrachte

$$\begin{aligned} \nabla G &= \nabla \chi_R e^f + \chi_R e^f \nabla f = \nabla \chi_R e^f + Gf, \\ \Rightarrow |\nabla G| &= \nabla \chi_R^2 e^{2f} + 2\nabla \chi_R \nabla f e^f G + G^2 |\nabla f|^2. \end{aligned}$$

Die ersten beiden Terme sind in der L^∞ -Norm durch eine von ε unabhängige Konstante C_R beschränkt, denn $\nabla \chi_R$ hat kompakten Träger. Es folgt

$$\langle G\varphi, (H - E - |\nabla f|^2)G\varphi \rangle \leq C_R \|\varphi\|^2, \quad (1)$$

und andererseits

$$\begin{aligned} \langle G\varphi, (H - E - |\nabla f|^2)G\varphi \rangle &\geq \langle G\varphi, (H - E - \beta^2)G\varphi \rangle \\ &\geq (\Sigma_R - E - \beta^2) \|G\varphi\|^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Da $\Sigma_R \rightarrow \Sigma > E + \beta^2$ existiert ein $R > 0$, so dass $\Sigma_R > E + \beta^2$. Für dieses R folgt aus (1) und (2), dass

$$\|G\varphi\|^2 \leq \frac{C_R}{\Sigma_R - E - \beta^2} \|\varphi\|^2.$$

Also gilt

$$\begin{aligned} \int_{\{x \geq 2R\}} e^{2\beta|x|} |\varphi(x)|^2 dx &= \int_{\{x \geq 2R\}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} e^{2f(x)} |\varphi(x)|^2 dx \\ &\stackrel{\text{mon.konv.}}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\{x \geq 2R\}} e^{2f(x)} |\varphi(x)|^2 dx \\ &\leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|G\varphi\| \leq \frac{C_R}{\Sigma_R - E - \beta^2} \|\varphi\|^2 < \infty. \end{aligned}$$

Andererseits ist auch

$$\int_{\{x < 2R\}} e^{2\beta|x|} |\varphi(x)|^2 dx \leq e^{4\beta R} \|\varphi\|^2 < \infty. \quad \ll$$

2.3 **Satz** Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ messbar mit $V\varphi \in C^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ und $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ mit $H\varphi = E\varphi$. Sei

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^n} \int_{|y-x| \leq 1} |V_-(x)|^p dy < \infty,$$

für ein $p > \frac{n}{2}$ und $n \geq 2$. Dann gilt für alle $x \in \mathbb{R}^n$

$$\text{esssup}_{y: |y-x| \leq \frac{1}{2}} |\varphi(y)| \leq C \|\varphi\|_{L^2(B_1(x))}. \quad \times$$

» Siehe Übungsblatt 3. «

2.4 **Korollar** Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ messbar mit $V\varphi \in C^2(\mathbb{R}^n)$ für alle $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ und $\varphi \in H^2(\mathbb{R}^n)$ mit $H\varphi = E\varphi$. Dann gibt es zu jedem $\beta \in \mathbb{R}$ mit $E + \beta^2 < \Sigma$ ein $C_\beta \in \mathbb{R}$, so dass

$$|\varphi(x)| \leq C_\beta e^{-\beta|x|} \quad \text{f.ü.} \quad \times$$

» Für jedes $x \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$\begin{aligned} \text{esssup}_{y: |x-y| \leq \frac{1}{2}} e^{\beta|y|} |\varphi(y)| &\leq e^{\beta|x|} e^{\beta/2} \text{esssup}_{y: |x-y| \leq \frac{1}{2}} \varphi(y) \leq e^{\beta|x|} e^{\beta/2} C \|\varphi\|_{L^2(B_1(x))} \\ &\leq C \left\| e^{\beta|\cdot|} \varphi \right\|_{L^2(B_1(x))} e^{3/2\beta} \leq C \left\| e^{\beta|\cdot|} \varphi \right\| e^{3/2\beta} < \infty. \quad \ll \end{aligned}$$

Bemerkung. A. Mit den Methoden des Beweises von Theorem 2.2 lassen sich für n -Teilchensysteme verbesserte, anisotrope Schranken herleiten.

- B. Solche Schranken existieren nicht nur für Schrödinger-Operatoren, sondern auch für Operatoren die ein Teilchen in einem quantisierten Strahlungsfeld beschreiben,

$$H = (-i\nabla_x + A(x))^2 + H_f + V,$$

wobei $A(x)$ das quantisierte Vektorpotential darstellt und H_f die Feldenergie.

→

3 Spektrum und Resolvente

Wir haben bisher Lösungen der Eigenwertgleichung des Operators

$$H = -\Delta + V : H^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow H^2(\mathbb{R}^n)$$

untersucht aber nicht geklärt, ob diese Lösungen überhaupt existieren. Um dies zu klären, wollen wir die Spektraltheorie für unbeschränkte Operatoren auf Hilberträumen entwickeln. Dazu betrachten wir allgemein Operatoren

$$A : D \subset X \rightarrow X$$

und interessieren uns für deren Spektrum, dessen Approximation und Verhalten unter Störungen.

■ Grundlegende Definitionen

Sei X ein komplexer Banachraum und $D \subset X$ ein linearer Teilraum.

Definition (a) Ein *linearer Operator* in X ,

$$A : D \subset X \rightarrow X,$$

ist eine lineare Abbildung $A : D \rightarrow X$. D heißt *Definitionsbereich* von A (schreibe $D = D_A = D(A)$) und

$$\text{ran}(A) := AD = \{Ax : x \in D\}$$

heißt *Wertebereich* von A (range of A).

(b) Man sagt, A sei *dicht definiert*, falls $\overline{D} = X$.

(c) A heißt *abgeschlossen*, falls der Graph von A

$$\Gamma_A := \{(x, y) : x \in D, y = Ax\}$$

abgeschlossen ist in $X \oplus X$. ✕

Lemma Der Operator A ist genau dann abgeschlossen, wenn

$$\left. \begin{array}{l} x_n \in D, x_n \rightarrow x \in X \\ Ax_n \rightarrow y \end{array} \right\} \Rightarrow x \in D(A) \text{ und } Ax = y. \quad \times$$

Definition Ein zweiter Operator, $B : D(B) \subset X \rightarrow X$ heißt *Erweiterung* von A , falls $D(A) \subset D(B)$ und $Ax = Bx$ für alle $x \in D(A)$. Man schreibt dafür $A \subset B$. Zwei Operatoren sind gleich, $A = B$, falls $D(A) = D(B)$ und $Ax = Bx$ für alle $x \in D(A)$.
 \times

Den Identitätsoperator $\text{Id} : X \rightarrow X, x \mapsto x$ lassen wir meist weg. Zum Beispiel:

$$\lambda - A := \lambda \text{Id} - A \text{ für } \lambda \in \mathbb{C}.$$

Definition (a) Die *Resolventenmenge* von A ist die Menge

$$\rho(A) := \left\{ \lambda \in \mathbb{C} : \begin{array}{l} (\lambda - A) : D(A) \rightarrow X \text{ ist bijektiv und} \\ (\lambda - A)^{-1} \text{ beschränkt} \end{array} \right\}.$$

(b) Die Abbildung

$$R(A) : \rho(A) \rightarrow \mathcal{L}(X), \quad \lambda \mapsto (\lambda - A)^{-1}$$

heißt *Resolvente* von A . $R_\lambda(A)$ ist die Resolvente von A an der Stelle λ .

(c) Das Komplement der Resolventenmenge:

$$\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A)$$

heißt *Spektrum* von A . Die Menge

$$\sigma_p(A) := \{ \lambda \in \mathbb{C} : \lambda \text{ ist Eigenwert von } A \} \subset \sigma(A)$$

heißt *Punktspektrum* von A . \times

Bemerkung. Wenn A abgeschlossen und $(A - \lambda) : D \rightarrow X$ bijektiv ist, dann ist auch $(A - \lambda)^{-1} : X \rightarrow D$ abgeschlossen und somit nach dem Graphensatz beschränkt (FA Satz 4.3.5 [Fun07]). Das heißt, wenn A abgeschlossen ist, dann gilt

$$\rho(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} : (\lambda - A) : D(A) \rightarrow X \text{ ist bijektiv} \}.$$

Wenn A nicht abgeschlossen ist, dann gilt $\rho(A) = \emptyset$ und $\sigma(A) = \mathbb{C}$. \rightarrow

BSP a.) Sei $X = \mathbb{C}^n$ und $A \in \mathcal{L}(X)$, dann gilt: $\sigma(A) = \sigma_p(A) \neq \emptyset$ (Eigenwerte der Matrix bezüglich einer Basis von X).

b.) Sei $X = L^2(\mathbb{R})$, $D = \{f \in L^2(\mathbb{R}) : \int |xf(x)| dx < \infty\}$ und

$$Af(x) := xf(x).$$

Dann gilt: $\sigma(A) = \mathbb{R}$, $\sigma_p(A) = \emptyset$ und $\rho(A) = \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$.

c.) Sei $X = C(I)$, $I = [0, 1]$, $\|f\| = \sup_{x \in I} |f(x)|$, und sei

$$A_k : D_k \subset X \rightarrow X, \quad (A_k f)(x) = \frac{d}{dx} f(x)$$

wobei $k \in \{1, \dots, 4\}$ und

$$D_1 = C^1(I)$$

$$D_2 = \{f \in D_1 : f(0) = 0\}$$

$$D_3 = \{f \in D_1 : f(0) = f(1)\} \quad (\text{Periodische Randbedingung})$$

$$D_4 = \{f \in D_1 : f(0) = 0 = f(1)\} \quad (\text{Dirichlet Randbedingung})$$

Alle A_k sind abgeschlossen und es gilt:

$$\sigma(A_1) = \sigma_p(A_1) = \mathbb{C}, \quad \rho(A_1) = \emptyset,$$

$$\sigma(A_2) = \sigma_p(A_2) = \emptyset, \quad \rho(A_2) = \mathbb{C},$$

$$\sigma(A_3) = \sigma_p(A_3) = 2\pi i\mathbb{Z},$$

$$\sigma(A_4) = \mathbb{C}, \quad \sigma_p(A_4) = \emptyset, \quad \rho(A_4) = \emptyset.$$

» A ist abgeschlossen. Sei $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset D_1$ mit $\varphi_n \rightarrow \varphi$ und $\varphi'_n \rightarrow \psi$ in X . Dann gilt $\varphi_n \rightarrow \varphi$ gleichmäßig, $\varphi'_n \rightarrow \psi'$ gleichmäßig. Also ist $\varphi \in C^1(I) = D_1$ und $\varphi' = \psi$ (Analysis). Falls $\varphi_n \in D_k$, dann ist auch $\varphi \in D_k$ für $k = 2, 3, 4$. Also ist A_k abgeschlossen für $k \in \{1, \dots, 4\}$.

« $\sigma(A_1) = \sigma_p(A_1) = \mathbb{C}$ ». Sei $\lambda \in \mathbb{C}$, dann ist $x \mapsto e^{\lambda x}$ in D_1 und

$$\frac{d}{dx} e^{\lambda x} = \lambda e^{\lambda x}.$$

Also ist λ Eigenwert und daher $\sigma(A_1) = \sigma_p(A_1) = \mathbb{C}$.

“ $\sigma(A_2) = \emptyset$ ”. Wir lösen $(A_2 - \lambda)f = g$ für gegebenes $g \in X$ nach $f \in D_2$ auf. Das heißt, wir suchen $f \in C^1(I)$ mit

$$f' - \lambda f = g, \quad f(0) = 0.$$

Die eindeutige Lösung dieses Anfangswertproblems ist

$$f(x) = \int_0^x e^{\lambda(x-t)} g(t) dt =: (Sg)(x).$$

Somit ist $(A_2 - \lambda) : D_2 \rightarrow X$ bijektiv mit Rechtsinverser S . S ist außerdem beschränkt, denn

$$|(Sg)(x)| \leq \int_0^1 |e^{\lambda(x-t)} g(t)| dt \leq c \int_0^1 |g(t)| dt \leq c \|g\|.$$

Es bleibt noch zu zeigen, dass $(A_2 - \lambda)g = g$ für $g \in D_2$. Sei also $g \in D_2$, dann

$$\begin{aligned} S(A_2 - \lambda)g(x) &= \int_0^x e^{\lambda(x-t)} (g'(t) - \lambda g(t)) dt \\ &= e^{\lambda(x-t)} g(t) \Big|_0^x + \int_0^x \lambda e^{\lambda(x-t)} g(t) dt \\ &\quad - \int_0^x e^{\lambda(x-t)} \lambda g(t) dt \\ &= g(x). \end{aligned}$$

Also $S = R_\lambda(A_2)$. ■

3.1 **Satz** Sei $A : D \subset X \rightarrow X$ ein linearer Operator und seien $\lambda, \mu \in \rho(A)$. Dann gilt:

1) $R_\lambda(A) - R_\mu(A) = (\mu - \lambda)R_\lambda(A)R_\mu(A)$,

2) $R_\lambda(A)R_\mu(A) = R_\mu(A)R_\lambda(A)$,

3) $R_\lambda(A)A \subset AR_\lambda(A)$,

4) $AR_\lambda(A) = -\text{Id} + R_\lambda(A)$. ✕

» “1”»: Mit $\lambda, \mu \in \rho(A)$ gilt,

$$\begin{aligned} R_\lambda(A) - R_\mu(A) &= (\lambda - A)^{-1} - (\mu - A)^{-1} \\ &= (\lambda - A)^{-1} [(\mu - A) - (\lambda - A)] (\mu - A)^{-1} \\ &= (\lambda - A)^{-1} (\mu - \lambda) (\mu - A)^{-1} \\ &= (\mu - \lambda) R_\lambda(A) R_\mu(A) \end{aligned}$$

“2)”: folgt aus 1).

“3), 4)”: Für $x \in D$ gilt

$$\begin{aligned} R_\lambda(A)Ax &= (\lambda - A)^{-1}Ax = (\lambda - A)^{-1}(A - \lambda) + \lambda(\lambda - A)^{-1} \\ &= (-\text{Id} + \lambda R_\lambda(A))x. \end{aligned}$$

Außerdem gilt für alle $x \in X$,

$$\begin{aligned} AR_\lambda(A)x &= A(\lambda - A)^{-1}x = (A - \lambda)(\lambda - A)^{-1}x + \lambda R_\lambda(A)x \\ &= (-\text{Id} + R_\lambda(A))x. \end{aligned}$$

Daraus folgen 3) und 4). «

3.2 **Theorem** Sei $A : D \subset X \rightarrow X$ ein linearer Operator. Dann ist die Resolventenmenge $\rho(A)$ offen, das Spektrum $\sigma(A)$ abgeschlossen und die Resolvente $z \mapsto (A - z)^{-1}$ ist analytisch auf $\rho(A)$.

Falls $z_0 \in \rho(A)$, dann ist

$$B(z_0, \|R_{z_0}(A)\|^{-1}) \subset \rho(A)$$

und für alle z aus dieser Kreisscheibe gilt

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

Insbesondere gilt $\|R_{z_0}(A)\| \geq \frac{1}{\text{dist}(z_0, \sigma(A))}$. ✕

» Sei $z_0 \in \rho(A)$ und $z \in \mathbb{C}$. Dann gilt

$$z - A = (z_0 - A) + (z - z_0) = (\text{Id} + (z - z_0)R_{z_0}(A))(z_0 - A),$$

wobei $(z_0 - A) : D \rightarrow X$ bijektiv mit $(z_0 - A)^{-1} \in \mathcal{L}(X)$. Falls $|z - z_0| \cdot \|R_{z_0}(A)\| < 1$, dann ist auch

$$\text{Id} + (z - z_0)R_{z_0}(A) : X \rightarrow X \tag{1}$$

bijektiv mit stetiger Inversen (FA Thm 3.3.6 [Fun07]).

Also ist $z \in \rho(A)$, falls $|z - z_0| < \|R_{z_0}(A)\|^{-1}$. Die Inverse von (1) ist dann gegeben durch die Neumannreihe

$$\sum_{n \geq 0} (-1)^n R_{z_0}(A)^n (z - z_0)^n$$

und folglich

$$\sum_{n \geq 0} (-1)^n R_{z_0}(A)^{n+1} (z - z_0)^n.$$

Wenn $z \in \sigma(A)$, dann ist zwingend $|z - z_0| \|R_{z_0}(A)\| \geq 1$, d.h. $|z - z_0| \geq \|R_{z_0}(A)\|^{-1}$ und folglich

$$\text{dist}(z_0, \sigma(A)) = \inf \{|z - z_0| : z \in \sigma(A)\} \geq \frac{1}{\|R_{z_0}(A)\|}. \quad \ll$$

3.3 **Korollar** Sei $A \in \mathcal{L}(X)$. Dann ist $\sigma(A)$ kompakt und nichtleer. \times

» $\sigma(A)$ ist kompakt. Sei $z \in \mathbb{C}$ mit $|z| \geq \|A\|$, dann ist $(z - A) = z(\text{Id} - z^{-1}A)$ und $\|z^{-1}A\| < 1$. Somit besitzt $(z - A)$ eine beschränkte Inverse (Neumannreihe)

$$(z - A)^{-1} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{z^n} A^n$$

und daher ist $z \in \rho(A)$. Insbesondere gilt

$$\|(z - A)^{-1}\| \leq \frac{1}{|z|} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{|z|^n} \|A\|^n = \frac{1}{|z|} \frac{1}{1 - |z|^{-1} \|A\|} = \frac{1}{|z| - \|A\|}$$

und $\sigma(A) \subset \{z \in \mathbb{C} : |z| \leq \|A\|\}$.

$\sigma(A)$ ist nicht leer. Angenommen $\sigma(A) = \emptyset$, dann ist $F_{l,x} : z \mapsto l(R_z(A)x)$ für alle $x \in X$ und $l \in X^*$ eine ganze Funktion und

$$|F_{l,x}(z)| \leq \|l\| \|R_z(A)\| \|x\| \leq \|l\| \|x\| \frac{1}{|z| - \|A\|} \rightarrow 0, \quad |z| \rightarrow \infty, \quad (*)$$

also auch beschränkt. Nach dem Satz von Liouville (Funktionentheorie) ist $F_{l,x}$ konstant und wegen (*) gilt sogar $F_{l,x} \equiv 0$. Somit ist $l(R_z(A)x) \equiv 0$ für alle $x \in X$ und $l \in X^*$ und daher ist $R_z(A) = 0$ für alle $z \in \mathbb{C}$ im Widerspruch zu $(z - A)R_z(A) = \text{Id}$. \ll

Der Beweis lässt sich mit Funktionentheorie über Funktionen $f : \mathbb{C} \rightarrow X$ mit X einem komplexen Banachraum deutlich abkürzen. Die Spektraltheorie befasst sich im Wesentlichen mit solchen Abbildungen.

Bemerkung. Für einen unbeschränkten Operator $A : D \subset X \rightarrow X$ ist sowohl $\sigma(A) = \emptyset$ als auch $\sigma(A) = \mathbb{C}$ möglich. \circ

Im Folgenden wollen wir untersuchen, ob wir einen nichtabgeschlossenen Operator durch Vergrößerung seines Definitionsbereichs abschließen können.

Definition Ein Operator $A : D \subset X \rightarrow X$ heißt *abschließbar*, falls ein abgeschlossener Operator $B \supset A$ existiert. Die kleinste abgeschlossene Erweiterung eines abschließbaren Operators A heißt *Abschluss* von A und wird mit \bar{A} bezeichnet.

Die Existenz von \bar{A} folgt aus folgendem

3.4 **Satz** Sei $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ ein linearer Operator. Dann sind äquivalent:

- (i) A ist abschließbar.
- (ii) $\bar{\Gamma}_A$ ist der Graph eines linearen Operators.
- (iii) Aus $x_n \rightarrow 0$ und $Ax_n \rightarrow y$ folgt $y = 0$. \times

» “(i) \Rightarrow (iii)”: Sei $A \subset B$, B abschließbar und x_n Folge in D mit $x_n \rightarrow 0$ und $Ax_n \rightarrow y$. Dann gilt $Bx_n \rightarrow y$ und da B abgeschlossen ist $y = \lim_{n \rightarrow \infty} Bx_n = B0 = 0$.

“(iii) \Rightarrow (ii)”: Seien $(x, y_1), (x, y_2) \in \bar{\Gamma}_A$. Dann ist $(0, y_1 - y_2) = (x, y_1) - (x, y_2) \in \bar{\Gamma}_A$. Also existiert eine Folge (x_n, Ax_n) in $\bar{\Gamma}_A$ mit $x_n \rightarrow 0$ und $Ax_n \rightarrow y_1 - y_2$. Nach (iii) gilt $y_1 = y_2$. Wir können somit einen Operator $B : D(B) \subset X \rightarrow X$ definieren durch

$$x \in D(B) \Leftrightarrow \text{Es existiert } y \in Y \text{ mit } (x, y) \in \bar{\Gamma}_A.$$

und $Bx = y$ wenn $(x, y) \in \bar{\Gamma}_A$. Nach dem eben gezeigten, ist B wohldefiniert, linear, denn $\bar{\Gamma}_A$ ist ein linearer Raum, und $\Gamma_B = \bar{\Gamma}_A$.

“(ii) \Rightarrow (i)”: Aus $\Gamma_B = \bar{\Gamma}_A$ folgt $B \supset A$ und B ist abgeschlossen, da Γ_B abgeschlossen. Somit ist A abschließbar. \ll

Bemerkung. Nach Satz 3.4 können wir einen linearen Operator \bar{A} definieren durch $\Gamma_{\bar{A}} = \bar{\Gamma}_A$. \bar{A} ist abgeschlossen und für jeden abgeschlossenen Operator $B \supset A$ gilt $B \supset \bar{A}$ (folgt aus $A \subset B \Leftrightarrow \Gamma_A \subset \Gamma_B$). Offenbar gilt:

$$x \in D(\bar{A}) \Leftrightarrow \begin{cases} \text{Es existiert eine Folge } (x_n)_{n \in \mathbb{N}} \text{ in } D(A) \\ \text{mit } x_n \rightarrow x \text{ und } (Ax_n)_{n \in \mathbb{N}} \text{ ist eine Cauchyfolge.} \end{cases}$$

Es ist dann $\bar{A}x = \lim_{n \rightarrow \infty} Ax_n$. \rightarrow

BSP Sei $H = L^2(\mathbb{R})$ und $g \in H$ mit $\|g\| = 1$. Der Operator $A : D \subset H \rightarrow H$ definiert durch

$$D = C_0^\infty(\mathbb{R}), \quad Af = f(0)g,$$

ist nicht abschließbar.

» Sei $f \in D$ mit $f(0) = 1$ und sei $f_n(x) := f(nx)$. Dann ist $\|f_n\| = n^{-1/2}\|f\| \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$ aber $Af_n = g$ für alle n , wobei $g \neq 0$. « ■

4 Symmetrische und selbstadjungierte Operatoren

■ Der adjungierte Operator

Definition Sei \mathcal{H} ein komplexer Hilbertraum und sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ linear und dicht definiert ($\overline{D} = \mathcal{H}$). Der zu A **adjungierte Operator** $A^* : D(A^*) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist wie folgt definiert: Falls zu gegebenem $\varphi \in \mathcal{H}$ ein $\varphi^* \in \mathcal{H}$ existiert, so dass

$$\langle \varphi, A\eta \rangle = \langle \varphi^*, \eta \rangle, \quad \text{für alle } \eta \in D(A),$$

dann ist $\varphi \in D(A^*)$ und $A^*\varphi := \varphi^*$. \times

Da $D(A)$ dicht ist in \mathcal{H} , ist φ^* durch φ eindeutig bestimmt, und die Abbildung $\varphi \mapsto \varphi^*$ ist linear. Nach dem Lemma von Fréchet-Riesz (FA Thm 3.4.9 [Fun07]) gilt:

$$D(A^*) = \{ \varphi \in \mathcal{H} : \eta \mapsto \langle \varphi, A\eta \rangle \text{ ist stetig auf } D(A) \}.$$

» Aus $\langle \varphi, A\eta \rangle = \langle \varphi^*, \eta \rangle$ für alle $\eta \in D(A)$ folgt unmittelbar die Stetigkeit von $\eta \mapsto \langle \varphi, A\eta \rangle$. Falls umgekehrt $\eta \mapsto \langle \varphi, A\eta \rangle$ stetig ist, dann gibt es wegen $\overline{D(A)} = \mathcal{H}$ ein eindeutiges $F \in \mathcal{H}^*$ mit $F(\eta) = \langle \varphi, A\eta \rangle$ für $\eta \in D(A)$ (FA Satz 3.3.8 [Fun07]). Nach Fréchet-Riesz gilt $F(\eta) = \langle \varphi^*, \eta \rangle$ für ein $\varphi^* \in \mathcal{H}$. «

Bemerkung. Aus $A \subset B$ folgt $A^* \supset B^*$.

Man beachte, dass A^* nur existiert, wenn A dicht definiert ist. Damit $(A^*)^*$ existiert muss also A^* wieder dicht definiert sein, was im Allgemeinen nicht der Fall ist. \rightarrow

BSP a.) Sei $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ und $g \in \mathcal{H}$ mit $\|g\| = 1$. Wir definieren $A : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ durch

$$D = C_0^\infty(\mathbb{R}), \quad Af = f(0)g.$$

Dann ist $D(A^*) = \{ \varphi \in \mathcal{H} : \varphi \perp g \}$ und $A^* = 0$ auf $D(A^*)$.

» Sei $\langle \varphi, g \rangle = 0$. Dann ist $\langle \varphi, Af \rangle = 0$ für alle $f \in D(A)$. Also $\varphi \in D(A^*)$ und $A^*\varphi = 0$. Sei $\langle \varphi, g \rangle \neq 0$ und sei (f_n) eine Folge in D mit $\|f_n\| \rightarrow 0$ und $f_n(0) = 1$. Dann gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \varphi, Af_n \rangle = \langle \varphi, g \rangle \neq 0$. Somit ist $f \mapsto \langle \varphi, Af \rangle$ nicht stetig, also $\varphi \notin D(A^*)$. «

b.) Sei $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ und $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{R})$. Der Operator $A: D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ sei definiert durch $D = C_0^\infty(\mathbb{R})$ und

$$Af = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)e_n,$$

wobei die Reihe konvergiert wegen $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Dann gilt $D(A^*) = (0)$.

» Übung. «

4.1 **Satz** Sei \mathcal{H} ein komplexer Hilbertraum und $A: D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ dicht definiert. Dann gelten

1) A^* ist abgeschlossen.

2) A ist genau dann abschließbar, wenn $D(A^*)$ dicht ist und dann gilt $\overline{A} = (A^*)^*$.

3) Falls A abschließbar ist, gilt $(\overline{A})^* = A^*$.

» 1) Sei $\varphi_n \in D(A^*)$ mit $\varphi_n \rightarrow \varphi \in \mathcal{H}$ und $A^*\varphi_n \rightarrow \psi$. Für alle $\eta \in D(A)$ gilt

$$\langle \varphi, A\eta \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \varphi_n, A\eta \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle A^*\varphi_n, \eta \rangle = \langle \psi, \eta \rangle.$$

Somit ist $\varphi \in D(A^*)$ und $A^*\varphi = \psi$.

2) “ \Leftarrow ”: Sei $D(A^*) \subset \mathcal{H}$ dicht und sei $\varphi_n \rightarrow 0$ mit $A\varphi_n \rightarrow \psi$. Zu zeigen ist, dass $\psi = 0$. Nach Voraussetzung gilt für alle $\eta \in D(A^*)$,

$$\langle \eta, \psi \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \eta, A\varphi_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle A^*\eta, \varphi_n \rangle = 0.$$

Also ist $\psi \in D(A^*)^\perp = (0)$.

“ \Rightarrow ”: Siehe (Thm. VII.1, [RSa]).

3) Aus $\bar{A} \supset A$ folgt $(\bar{A})^* \subset A^*$. Es bleibt noch zu zeigen, dass $(\bar{A})^* \supset A^*$. Sei also $\varphi \in D(A^*)$ und $\varphi^* = A^* \varphi$, so gilt

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

Ist $\eta \in D(\bar{A})$, dann gibt es eine Folge (η_n) in $D(A)$ mit $\eta_n \rightarrow \eta$ und $A\eta_n \rightarrow \bar{A}\eta$. Mit (*) folgt somit

$$\langle \varphi, \bar{A}\eta \rangle = \langle \varphi^*, \eta \rangle \quad \text{für alle } \eta \in D(\bar{A}).$$

Folglich ist $\varphi \in D((\bar{A})^*)$ und $(\bar{A})^* \varphi = \varphi^*$. Also ist $(\bar{A})^* \supset A^*$. «

Definition Der *Kern* eines linearen Operators $B : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist definiert durch

$$\ker(B) := \{\varphi \in D : B\varphi = 0\}. \quad \times$$

4.2 **Satz** Sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ dicht definiert. Dann gilt

$$\ker(A^*) = \text{ran}(A)^\perp.$$

Insbesondere ist $\text{ran}(A)^\perp \subset D(A^*)$ und aus $\ker(A^*) = (0)$ folgt $\overline{\text{ran}(A)} = \mathcal{H}$. \times

» Es folgt leicht

$$\begin{aligned} \varphi \in \ker(A^*) &\Leftrightarrow \langle A^* \varphi, \eta \rangle = 0 \quad \forall \eta \in D(A) \\ &\Leftrightarrow \langle \varphi, A\eta \rangle = 0 \quad \forall \eta \in D(A) \\ &\Leftrightarrow \varphi \in \text{ran}(A)^\perp. \end{aligned}$$

Außerdem folgt für $\ker(A^*) = (0)$ nach (FA Kor 3.8, [Fun07]),

$$\mathcal{H} = (0)^\perp = \ker(A^*)^\perp = (\text{ran}(A)^\perp)^\perp = \overline{\text{ran}(A)}. \quad \ll$$

■ Symmetrie und Selbstadjungiertheit

Definition / Lemma Ein dicht definierter Operator $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt *symmetrisch*, falls $A \subset A^*$. Der Operator A heißt *selbstadjungiert*, falls $A = A^*$.

A ist genau dann symmetrisch, wenn

$$\langle A\varphi, \eta \rangle = \langle \varphi, A\eta \rangle, \quad \text{für alle } \varphi, \eta \in D(A). \quad (*)$$

A ist genau dann selbstadjungiert, wenn (*) und zusätzlich $D(A) = D(A^*)$ gilt. \times

Bemerkungen. A. Für $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ sind Symmetrie und Selbstadjungiertheit äquivalent.

B. Ein selbstadjungierter Operator A hat keine symmetrische Erweiterung $B \supset A$ mit $B \neq A$.

» Aus $A \subset B \subset B^*$ und $A = A^*$ folgt $A = A^* \supset B^* \supset B \supset A$ und somit $A = B$. «

C. Falls $A \subset A^*$ und B eine selbstadjungierte Erweiterung von A , dann gilt $A \subset B \subset A^*$. \rightarrow

Bsp Sei $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, $D = S(\mathbb{R})$ und $A : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ definiert durch $f = -if'$. Dann ist A symmetrisch aber $A \neq A^*$. Es gilt $D(A^*) = H^1(\mathbb{R})$ und

$$A^* f = \mathcal{F}^{-1} p \mathcal{F} f, \quad f \in H^1(\mathbb{R}).$$

A^* ist selbstadjungiert, d.h. $(A^*)^* = A^*$.

» Wir zeigen hier nur die Symmetrie. Die übrigen Eigenschaften weisen wir später nach. Für alle $f, g \in S(\mathbb{R})$ gilt

$$\begin{aligned} \langle f, Ag \rangle &= -i \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)} g'(x) dx = \lim_{R \rightarrow \infty} -i \int_{-R}^R \overline{f(x)} g'(x) dx \\ &= -\overline{f(x)} g(x) \Big|_{-R}^R + i \int_{-R}^R \overline{f'(x)} g(x) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{-if'(x)} g(x) dx = \langle Af, g \rangle. \end{aligned}$$

Somit ist $A \subset A^*$. « ■

Wir suchen nun nach handlichen Kriterien, um zu zeigen, dass ein Operator selbstadjungiert ist. Dabei wird sich folgender Satz als äußerst nützlich erweisen.

Notation. $\mathbb{C}_+ := \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Im} z > 0\}$, $\mathbb{C}_- = \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Im} z < 0\}$. \rightarrow

4.3 **Satz** Sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch.

1) Für alle $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ und alle $\varphi \in D(A)$ gilt

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

2) Falls $\operatorname{ran}(A - z) = \mathcal{H}$ für ein $z \in \mathbb{C}_{\pm}$, so ist $\mathbb{C}_{\pm} \subset \rho(A)$. \times

» 1) Sei $B = A - \lambda$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \|(B - i\mu)\varphi\|^2 &= \langle (B - i\mu)\varphi, (B - i\mu)\varphi \rangle \\ &= \langle B\varphi, B\varphi \rangle - i\mu \langle \varphi, B\varphi \rangle - i\mu \langle B\varphi, \varphi \rangle \\ &\quad + (\overline{-i})(-i)\mu^2 \langle \varphi, \varphi \rangle \\ &= \|B\varphi\|^2 + \mu^2 \|\varphi\|^2 + \underbrace{i\mu \langle \varphi, B\varphi \rangle - i\mu \langle B\varphi, \varphi \rangle}_{=0}. \end{aligned}$$

2) Sei $z \in \mathbb{C}_\pm$ und $\text{ran}(A - z) = \mathcal{H}$. Nach Teil 1) gilt für alle $\varphi \in D(A)$,

$$\|(A - z)\varphi\| \geq \underbrace{|\text{Im } z|}_{>0} \|\varphi\|. \quad (*)$$

D.h. $(A - z) : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist injektiv, also nach Voraussetzung an z sogar bijektiv. Mit der Wahl $\varphi = (A - z)^{-1}\psi$ folgt aus (*)

$$\|(A - z)^{-1}\| \leq \frac{1}{|\text{Im } z|}.$$

Somit ist $z \in \rho(A)$ und nach Theorem 3.2 gilt außerdem $B(z, |\text{Im } z|) \subset \rho(A)$.

Für jedes $z_1 \in B(z, |\text{Im } z|)$ folgt aus dem Gezeigten, dass $B(z_1, |\text{Im } z|) \subset \rho(A)$. Durch Iteration dieses Arguments schließen wir $\mathbb{C}_\pm \subset \rho(A)$. «

4.4 **Theorem** Sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch. Dann sind äquivalent

- 1) $A = A^*$.
- 2) $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.
- 3) $\text{ran}(A - z_\pm) = \mathcal{H}$ für ein $z_+ \in \mathbb{C}_+$ und ein $z_- \in \mathbb{C}_-$.
- 4) A ist abgeschlossen und $\ker(A^* - z_\pm) = (0)$ für ein $z_+ \in \mathbb{C}_+$ und ein $z_- \in \mathbb{C}_-$.

×

Bemerkung. $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ allein impliziert *nicht*, dass A selbstadjungiert ist.

Ein einfaches Gegenbeispiel ist $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, denn A hat nur den Eigenwert $0 \in \mathbb{R}$, ist aber offensichtlich nicht hermitesch. →

» “1)⇒4)”: Aus $A = A^*$ und Satz 4.1 folgt, dass A abgeschlossen ist. Außerdem gilt

$$\ker(A^* \pm i) = \ker(A \mp i) = (0)$$

nach dem eben bewiesenen Satz 4.3.

“4)⇒3)”: Aus $\ker(A - z_{\pm}) = (0)$ und Satz 4.2 folgt $\text{ran}(A - \overline{z_{\pm}}) \subset \mathcal{H}$ ist dicht. Wir zeigen $\text{ran}(A - \overline{z_{\pm}}) = \mathcal{H}$ mit Hilfe der Abgeschlossenheit von A . Sei $\psi \in \mathcal{H}$, so existiert aufgrund der Dichtheit eine Folge (φ_n) in $D(A)$ mit

$$(A - \overline{z_{\pm}})\varphi_n \rightarrow \psi.$$

Nach Satz 4.3 gilt

$$\|(A - \overline{z_{\pm}})(\varphi_n - \varphi_m)\| \geq |\varphi_n - \varphi_m| \underbrace{\|\text{Im } z_{\pm}\|}_{>0}.$$

Also ist (φ_n) Cauchyfolge in \mathcal{H} . Sei $\varphi = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n$, so folgt, da $A - \overline{z_{\pm}}$ abgeschlossen, dass $\varphi \in D(A)$ und $(A - \overline{z_{\pm}})\varphi = \psi$.

“3)⇒2)”: Folgt direkt aus Satz 4.3.

“2)⇒1)”: Da $A \subset A^*$ bleibt nur $D(A^*) \subset D(A)$ zu zeigen. Sei also $\varphi \in D(A^*)$. Da $(A + i) : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ nach Voraussetzung surjektiv ist, existiert ein $\eta \in D(A)$ mit $(A^* + i)\varphi = (A + i)\eta = (A^* + i)\eta$. Also ist $(A^* + i)(\varphi - \eta) = 0$ und $\ker(A^* + i) = \text{ran}(A - i)^{\perp} = (0)$, da $i \in \rho(A)$. Das heißt $\varphi = \eta \in D(A)$. «

■ Wesentliche Selbstadjungiertheit

Sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein symmetrischer Operator, so ist $A \subset A^*$. Da A^* abgeschlossen, ist A abschließbar mit $\overline{A} \subset A^*$. Falls \overline{A} selbst-adjungiert ist, dann ist \overline{A} die einzige selbstadjungierte Erweiterung von A (vgl. obige Bemerkung). Dies motiviert folgende

Definition Ist der Abschluss eines Operators $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ selbstadjungiert, dann heißt A *wesentlich selbstadjungiert*. Sei A abgeschlossen, so heißt jeder Teilraum $D \subset D(A)$ mit $\overline{A|_D} = A$ *definierender Bereich (core)* von A . \times

4.5 **Theorem** Sei $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein symmetrischer Operator. Dann sind äquivalent:

- 1) A ist wesentlich selbstadjungiert.

2) $\text{ran}(A \pm i) \subset \mathcal{H}$ ist dicht.

3) $\ker(A^* \pm i) = (0)$. \times

» “1) \Rightarrow 3)”: Nach Voraussetzung ist \overline{A} selbstadjungiert und $(\overline{A})^* = A^*$ nach Satz 4.1. Also ist $\ker(A^* \pm i) = \ker((\overline{A})^* \pm i) = (0)$ nach Theorem 4.4.

“3) \Rightarrow 2)”: Folgt direkt aus Satz 4.2.

“2) \Rightarrow 1)”: Wir zeigen $\text{ran}(\overline{A} \pm i) = \mathcal{H}$, dann folgt die Selbstadjungiertheit aus Theorem 4.4. Sei also $\psi \in \mathcal{H}$. Da $\overline{\text{ran}(A - i)} = \mathcal{H}$ gibt es eine Folge (φ_n) in $D(A)$ mit $(A - i)\varphi_n \rightarrow \psi$. Nach Satz 4.3 ist (φ_n) eine Cauchyfolge in \mathcal{H} . (Siehe Beweis von Theorem 4.4) Sei $\varphi = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n$, dann gilt $A\varphi_n \rightarrow \psi + i\varphi$. Es folgt $\varphi \in D(\overline{A})$ und $\overline{A}\varphi = \psi + i\varphi$, d.h. $(\overline{A} - i)\varphi = \psi$. Analog zeigt man $\text{ran}(\overline{A} + i) = \mathcal{H}$. \ll

Als Anwendung beweisen wir einen wichtigen Störungssatz.

4.6 **Theorem von Kato-Rellich** Sei A wesentlich selbstadjungiert und B symmetrisch mit $D(B) \supset D(A)$. Gilt weiterhin

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

für alle $\varphi \in D(A)$, wobei $a, b \in \mathbb{R}$ und $a < 1$, so ist

$$A + B : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

wesentlich selbstadjungiert und $D(\overline{A + B}) = D(\overline{A})$. \times

Wir werden später sehen, dass $-\Delta$ auf $S(\mathbb{R})$ wesentlich selbstadjungiert ist und $|\mathbf{x}|^{-1}$ die obige Abschätzung erfüllt, folglich ist der Hamilton des Wasserstoffatoms wesentlich selbstadjungiert.

Bemerkung. Ist $A = A^*$ und $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ symmetrisch, dann ist

$$A + B : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

selbstadjungiert nach Theorem 4.6. (Wähle dazu $a = 0$ und $b = \|B\|$). Beschränkte Störungen sind daher weitgehend uninteressant. \rightarrow

» 1) Wir betrachten zuerst den Fall, dass A selbstadjungiert ist. Nach Voraussetzung ist auch der Operator $A + B : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch. Es genügt

daher nach Theorem 4.4 zu zeigen, dass $(A + B - i\mu)D(A) = \mathcal{H}$ für $|\mu|$ hinreichend groß.

Nach Satz 4.3 gilt

$$\|(A - i\mu)\psi\|^2 = \|A\psi\|^2 + \mu^2 \|\psi\|^2, \quad \psi \in D(A).$$

Setzen wir $\psi = (A - i\mu)^{-1}\varphi$ für ein $\mu \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, so folgt

$$\|\varphi\| \geq \|A(A - i\mu)^{-1}\varphi\|, \quad \|\varphi\| \geq |\mu| \|(A - i\mu)^{-1}\varphi\| \quad (*)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{H}$. Sei $\mu \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, so gilt weiterhin

$$(A + B - i\mu) = (1 + B(A - i\mu)^{-1})(A - i\mu), \quad (**)$$

wobei $(A - i\mu) : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ bijektiv ist. Ferner gilt nach Voraussetzung und (*)

$$\begin{aligned} \|B(A - i\mu)^{-1}\varphi\| &\leq a \|A(A - i\mu)^{-1}\varphi\| + b \|(A - i\mu)^{-1}\varphi\| \\ &\leq \left(a + \frac{b}{|\mu|}\right) \|\varphi\|. \end{aligned}$$

Somit ist $\|B(A - i\mu)^{-1}\| \leq a + \frac{b}{|\mu|} < 1$ für $|\mu|$ hinreichend groß. Für solche μ ist

$$(1 + B(A - i\mu)^{-1}) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

bijektiv ([Fun07], Thm 3.3.6), folglich ist nach (**) auch $A + B - i\mu$ bijektiv.

- 2) Sei nun A lediglich wesentlich selbstadjungiert. Sei $\varphi \in D(\overline{A})$ und $(\varphi_n)_n$ eine Folge in $D(A)$ mit $\varphi_n \rightarrow \varphi$ und $A\varphi_n \rightarrow \overline{A}\varphi$. Dann ist auch $B\varphi_n$ Cauchyfolge, denn

$$\|B(\varphi_n - \varphi_m)\| \leq a \|A(\varphi_n - \varphi_m)\| + b \|\varphi_n - \varphi_m\|$$

Also ist $\varphi \in D(\overline{B})$ und $\varphi \in D(\overline{A + B})$, denn $((A + B)\varphi_n)$ ist ebenfalls Cauchyfolge. Außerdem gilt durch Grenzwertübergang

$$\|\overline{B}\varphi\| \leq a \|\overline{A}\varphi\| + b \|\varphi\|, \quad \varphi \in D(\overline{A}).$$

Somit ist $\overline{A} + \overline{B}$ nach dem 1. Teil selbstadjungiert und insbesondere abgeschlossen. Also gilt

$$\overline{A} + \overline{B} \subset \overline{A + B},$$

weil wir eben außerdem gezeigt haben, dass $D(\overline{A}) \subset D(\overline{A + B})$ folgt $D(\overline{A + B}) = D(\overline{A})$ und $\overline{A + B} = \overline{A} + \overline{B}$. «

Die (reinen) Zustände eines quantenmechanischen Systems werden durch normierte Vektoren eines komplexen Hilbertraums \mathcal{H} beschrieben. Die Zeitevolution eines Zustandes, gegeben durch $u \in \mathcal{H}$, ist bestimmt durch das Anfangswertproblem für eine Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} \varphi_t = H \varphi_t, \quad \varphi_0 = u, \quad (S)$$

wobei $H : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ im Allgemeinen unbeschränkt ist.

Wir nehmen im Folgenden an, dass $\overline{D} = \mathcal{H}$. Eine Lösung von (S) ist eine differenzierbare¹ Funktion $\varphi : I \rightarrow \mathcal{H}$, $I \subset \mathbb{R}$ ein nichtentartetes Intervall mit $0 \in I$, so dass

(i) $\varphi_t \in D(H)$ für alle $t \in I$.

(ii) $\varphi_0 = u$.

(iii) $\frac{d}{dt} \varphi_t = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\varphi_{t+h} - \varphi_t}{h} = -iH\varphi_t$ für alle $t \in I$.

Lemma Falls (S) für jedes $u \in D$ eine Lösung φ besitzt mit $\|\varphi_t\| = \|u\|$ für alle $t \in I$, dann ist notwendigerweise $H \subset H^*$. Umgekehrt folgt aus $H \subset H^*$, dass $\|\varphi_t\|$ erhalten und die Lösung von (S) eindeutig ist. \times

» Sei $u \in D$ und φ_t eine Lösung von (S) mit $\|\varphi_t\| = \|u\|$. Dann gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \|\varphi_t\|^2 \Big|_{t=0} = \langle \dot{\varphi}_t, \varphi_t \rangle + \langle \varphi_t, \dot{\varphi}_t \rangle \Big|_{t=0} = \langle -iHu, u \rangle + \langle u, -iHu \rangle \\ &= i \left[\underbrace{\langle Hu, u \rangle - \langle u, Hu \rangle}_{=0} \right] \end{aligned}$$

Aus $\langle Hu, u \rangle = \langle u, Hu \rangle$ für alle $u \in D$ folgt $H \subset H^*$.

Sind $\varphi_t, \psi_t : I \rightarrow \mathcal{H}$ Lösungen von (S) und ist $\Phi_t = \varphi_t - \psi_t$, dann gilt

$$i \frac{d}{dt} \Phi_t = H\Phi_t, \quad \Phi_0 = 0.$$

Also folgt wegen $H \subset H^*$, dass $\|\Phi_t\| = \|\Phi_0\| = 0$ für alle $t \in I$. «

4.7 **Satz** Sei $H : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ symmetrisch. Falls (S) für jedes $u \in D$ eine globale Lösung $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$ besitzt, ist H wesentlich selbstadjungiert. \times

¹differenzierbar im Sinne von (iii)

» Nach Theorem 4.5 genügt es zu zeigen, dass $\ker(H^* \pm i) = \{0\}$. Sei also $u \in D$ und φ_t die Lösung von (S) zu u und für ein $w \in D(H^*)$, $(H^* + i)w = 0$. Dann gilt

$$\frac{d}{dt} \langle w, \varphi_t \rangle = \langle w, -iH\varphi_t \rangle = \langle H^*w, -i\varphi_t \rangle = \langle -iw, -i\varphi_t \rangle = \langle w, \varphi_t \rangle.$$

Also gilt $\langle w, \varphi_t \rangle = \langle w, u \rangle e^t$ und wegen

$$|\langle w, \varphi_t \rangle| \leq \|w\| \|\varphi_t\| = \|w\| \|u\|$$

ist $\langle w, u \rangle = 0$ für alle $u \in D$ und da $\overline{D} = H$ folgt $w = 0$. Analog zeigt man, dass $\ker(H^* - i) = \{0\}$. «

Bemerkungen A. Wir werden sehen, dass $H = H^*$ auch hinreichend ist für die Existenz einer globalen Lösung

$$\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$$

von (S). Falls $H = H^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, ist

$$\varphi_t = e^{-iHt} \varphi_0, \quad e^{-iHt} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-iHt)^n \varphi_0.$$

B. Nicht jeder symmetrische Operator H hat eine selbstadjungierte Erweiterung. Notwendig und hinreichend für die Existenz einer selbstadjungierten Erweiterung ist, dass die **Defektindizes**

$$h_+ := \dim \ker(H^* - i) = \dim \operatorname{ran}(H^* + i)^\perp,$$

$$h_- := \dim \ker(H^* + i) = \dim \operatorname{ran}(H^* - i)^\perp,$$

übereinstimmen. ([?], Kap. X) \rightarrow

5 Multiplikations- und Schrödingeroperator

■ Multiplikationsoperatoren

Ein Schrödingeroperator $-\Delta + V$ wird im einfachsten Fall ($V = 0$) zu $-\Delta$. Unter Fouriertransformation geht $-\Delta$ über in einen Multiplikationsoperator.

Definition Eine messbare Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ definiert einen *Multiplikationsoperator* $M_f : D_f \subset L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ durch

$$D_f := \left\{ \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) : f\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}, \quad (M_f\varphi)(x) = f(x)\varphi(x). \quad \times$$

Man sieht leicht ein, dass $D_f \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ dicht ist.

5.1 **Satz** Das Spektrum von M_f ist der *wesentliche Wertebereich* von f . D.h.

$$\sigma(M_f) := \left\{ z \in \mathbb{C} : \forall \varepsilon > 0 : \left| f^{-1}(B_\varepsilon(z)) \right| > 0 \right\},$$

wobei $|\cdot|$ das Lebesgue-Maß bezeichnet. Ist f reellwertig, dann ist M_f selbstadjungiert. \times

Ist f stetig, dann entspricht der wesentliche Wertebereich dem Wertebereich.

» Sei W_f der wesentliche Wertebereich von f und $z \in W_f$. Wir zeigen, dass $z \in \sigma(M_f)$. Zu jedem $k \in \mathbb{N}$ existiert eine messbare Menge $E_k \subset \mathbb{R}^n$ mit

$$E_k \subset f^{-1}(B_k(z)), \quad 0 < |E_k| < \infty.$$

Wähle $E_k = f^{-1}(B_{1/k}(z))$, falls $|f^{-1}(B_{1/k}(z))| < \infty$, sonst wähle eine messbare Teilmenge von $f^{-1}(B_{1/k}(z))$. Sei

$$\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{|E_k|}} \chi_{E_k}.$$

Dann ist $\varphi_k \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $\|\varphi_k\| = 1$ und $f\varphi_k \in L^2$, denn $|f|_{E_k} - z| < \frac{1}{k}$ und

$$\begin{aligned} \|(z - M_f)\varphi_k\| &= \left(\int |(z - f(x))\varphi_k(x)|^2 dx \right)^{1/2} \\ &= \sqrt{|E_k|}^{-1} \left(\int_{E_k} |z - f(x)|^2 dx \right)^{1/2} \leq \frac{1}{k} \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Somit ist $z \in \sigma(M_f)$ (vgl. Aufgabe 4.4).

Ist andererseits $z \notin W_f$, dann existiert ein $\varepsilon > 0$, so dass

$$|f^{-1}(B_\varepsilon(z))| = 0.$$

Definiere nun

$$g(x) = \begin{cases} (z - f(x))^{-1}, & |z - f(x)| \geq \varepsilon, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dann ist $g \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$, also M_g ein beschränkter Operator und $(z - f(x))g(x) = 1$ fast überall. Also $f g \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ und somit $M_g L^2(\mathbb{R}^n) \subset D_f$. Es folgt

$$\begin{aligned} \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) &\Rightarrow (z - M_f)M_g\varphi = (z - f)g\varphi = \varphi \text{ f.ü.}, \\ \varphi \in D_f &\Rightarrow M_g(z - M_f)\varphi = g(z - f)\varphi = \varphi \text{ f.ü.} \end{aligned}$$

Somit ist $z \in \rho(M_f)$ und $M_g = (z - M_f)^{-1}$.

Falls f reellwertig ist, so ist M_f symmetrisch (Übung) und $\sigma(M_f) = W_f \subset \mathbb{R}$, also ist M_f nach Theorem 4.4 selbstadjungiert. «

5.2 **BSP** a.) Der Operator $-i \frac{d}{dx} : H^1(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ definiert durch

$$-i \frac{d}{dx} = \mathcal{F}^{-1} M_f \mathcal{F}, \quad f(p) = p,$$

ist selbstadjungiert auf H^1 , da M_f selbstadjungiert. Auf $C_0^\infty(\mathbb{R})$ ist $-i \frac{d}{dx}$ wesentlich selbstadjungiert und $\sigma(-i \frac{d}{dx}) = \sigma(M_f) = \mathbb{R}$.

b.) Der Operator $-\Delta : H^2(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ definiert durch

$$-\Delta := \mathcal{F}^{-1} M_f \mathcal{F}, \quad f(p) = p^2 = \sum_{k=1}^n p_k^2$$

ist selbstadjungiert und wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ und $\sigma(-\Delta) = [0, \infty)$. Der Beweis erfolgt mit Satz 1.3, Satz 5.1 und den Resultaten aus den Übungen. ■

■ Schrödingeroperatoren

Definition *Schrödingeroperatoren sind Operatoren der Form*

$$-\Delta + V : D \subset L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n), \quad (*)$$

wobei $V = M_V$ ein Multiplikationsoperator ist. \times

5.3 **Theorem** Sei $V \in L^2(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)$ reellwertig und $n \leq 3$. Dann ist (*) selbstadjungiert auf $D = H^2(\mathbb{R}^n)$ und wesentlich selbstadjungiert auf $D = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. \times

» Da V reellwertig ist, ist M_V ein symmetrischer Multiplikationsoperator und $-\Delta$ ist selbstadjungiert auf $H^2(\mathbb{R}^n)$ und wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Nach Theorem 1.6 existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $C_\varepsilon \in \mathbb{R}$, so dass

$$\|V\varphi\| \leq \varepsilon \|\Delta\varphi\| + C_\varepsilon \|\varphi\|, \quad \varphi \in H^2(\mathbb{R}^n).$$

Aus dem Satz von Kato-Rellich folgt schließlich, dass (*) selbstadjungiert auf $H^2(\mathbb{R}^n)$ und wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ ist. \ll

Mit denselben Methoden (vgl. [RSb]) beweist man das folgende

5.4 **Theorem von Kato (1951)** Seien $V_k, V_{ik} \in L^2(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)$ für $1 \leq i, k \leq N$ reellwertig und $n \leq 3$. Dann ist der Operator

$$-\Delta + \sum_{k=1}^N V_k(x_k) + \sum_{i < k} V_{ik}(x_i - x_k) : D \subset L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

selbstadjungiert auf $D = H^2(\mathbb{R}^{nN})$ und wesentlich selbstadjungiert auf $D = C_0^\infty(\mathbb{R}^{nN})$.

\times

Korollar Der Schrödingeroperator $H : D \subset L^2(\mathbb{R}^{3N}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{3N})$ gegeben durch

$$H = \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_k} - \frac{Ze^2}{|x_k|} \right) + \sum_{i < k} \frac{e^2}{|x_i - x_k|}$$

ist selbstadjungiert auf $D = H^2(\mathbb{R}^{3N})$ und wesentlich selbstadjungiert auf $D = C_0^\infty(\mathbb{R}^{3N})$.

\times

Bemerkung zu den Einheiten. Der Operator aus dem obigen Korollar ist unitär äquivalent zu

$$2\alpha^2 mc^2 \left[\sum_{k=1}^N \left(-\Delta_{x_k} - \frac{Z}{|x_k|} \right) + \sum_{i < k} \frac{1}{|x_i - x_k|} \right],$$

wobei $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ die Feinstrukturkonstante ist.

Die zugehörige unitäre Transformation ist gegeben durch

$$U : L^2(\mathbb{R}^{3N}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{3N}), \quad (U\varphi)(x) := \lambda^{3N/2} \varphi(\lambda x)$$

mit geeignetem $\lambda > 0$. Es gilt

$$UHU^{-1} = \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} \Delta_{x_k} - \frac{Ze^2}{\lambda |x_k|} \right) + \sum_{i < k} \frac{e^2}{\lambda |x_i - x_k|}.$$

Eine einfache Rechnung zeigt, dass $\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} = \frac{e^2}{\lambda}$, mit der Wahl

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2me^2} = \frac{1}{2} \text{Bohr-Radius.}$$

Der gemeinsame Faktor

$$\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} = \frac{e^2}{\lambda} = 2\alpha^2 me^2$$

ist die 4-fache Rydberg-Energie $E_{\text{Ryd}} = \frac{1}{2} \alpha^2 mc^2$. \rightarrow

6 Funktionalkalkül und Spektralsatz

6-A Messbarer Funktionalkalkül

Sei \mathcal{B} die Familie der Borel-messbaren Teilmengen von \mathbb{R} , d.h. die kleinste σ -Algebra, die alle offenen und abgeschlossenen Teilmengen enthält. Weiterhin bezeichne $B(\mathbb{R})$ die Familie *beschränkter* Borel-messbaren Funktionen $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$.

Notation. Ist (f_n) eine Folge in $B(\mathbb{R})$, dann schreiben wir

$$f_n \xrightarrow{p} f, \quad \text{oder} \quad f = \text{p-lim}_{n \rightarrow \infty} f_n,$$

falls $f_n(x) \rightarrow f(x)$ für jedes $x \in \mathbb{R}$ und die f_n gleichmäßig beschränkt sind, d.h.

$$\sup_{n \geq 0} \|f_n\| < \infty. \quad \rightarrow$$

6.1 **Satz** Sei $\mathcal{F} \subset B(\mathbb{R})$ eine Familie von Funktionen mit

- 1) $C_0(\mathbb{R}) \subset \mathcal{F}$,
- 2) Ist (f_n) eine Folge in \mathcal{F} mit $f_n \xrightarrow{p} f$, dann ist $f \in \mathcal{F}$.

Dann ist $\mathcal{F} = B(\mathbb{R})$. \times

Man kann dies auch als Definition von $B(\mathbb{R})$ sehen.

» Siehe [Wero7]. «

Bemerkung. Nach Satz 6.1 ist $C_0(\mathbb{R})$ dicht in $B(\mathbb{R})$ bezüglich der Topologie der punktweisen Konvergenz. Diese Topologie erfüllt jedoch nicht das erste Abzählbarkeitsaxiom. D.h. obwohl $C_0(\mathbb{R})$ in $B(\mathbb{R})$ dicht ist, lässt sich zu einem $f \in B(\mathbb{R})$ im Allgemeinen keine Folge (f_n) in $B(\mathbb{R})$ finden mit $f_n \xrightarrow{p} f$. \rightarrow

Definition Sei $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ die Menge der beschränkten linearen Operatoren $B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Eine Folge (B_n) in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ *konvergiert stark* gegen einen Operator $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, in Zeichen

$$B = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} B_n,$$

falls $B\varphi = \lim_{n \rightarrow \infty} B_n\varphi$ für jedes $\varphi \in \mathcal{H}$. \times

6.2 **Messbarer Funktionalkalkül** Zu jedem selbstadjungierten Operator $A : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ gibt es eine eindeutig bestimmte Abbildung

$$\Phi : B(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

mit folgenden Eigenschaften:

1) Falls $f_z(x) = (z - x)^{-1}$ mit $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, dann ist

$$\Phi(f_z) = (z - A)^{-1}.$$

2) Φ ist ein *-Homomorphismus, d.h. für alle $f, g \in B(\mathbb{R})$ gilt

$$(i) \quad \Phi(\alpha f + \beta g) = \alpha \Phi(f) + \beta \Phi(g) \text{ für } \alpha, \beta \in \mathbb{C},$$

$$(ii) \quad \Phi(f)\Phi(g) = \Phi(fg),$$

$$(iii) \quad \Phi(\bar{f}) = \Phi(f)^*.$$

3) Falls $f_k \xrightarrow{p} f$, dann gilt

$$\Phi(f) = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \Phi(f_k).$$

Weiterhin gilt für alle $f \in B(\mathbb{R})$:

$$4) \quad \|\Phi(f)\| \leq \|f\|_\infty.$$

5) Ist $f \geq 0$, so ist $\Phi(f) \geq 0$ (d.h. $\langle \varphi, \Phi(f)\varphi \rangle \geq 0$ für alle $\varphi \in \mathcal{H}$).

Statt $\Phi(f)$ schreibt man in der Regel $f(A)$. \times

BSP a.) Sei $A = M_x$ der Multiplikationsoperator

$$(A\varphi)(x) = x\varphi(x), \quad D_A = \left\{ \varphi \in L^2(\mathbb{R}) : x\varphi(x) \in L^2(\mathbb{R}) \right\}.$$

Dann ist $A = A^*$ und für jede Funktion $f \in B(\mathbb{R})$ gilt

$$\Phi(f) = M_f, \quad \text{d.h. } [\Phi(f)\varphi](x) = f(x)\varphi(x), \quad \varphi \in L^2(\mathbb{R}).$$

» Es genügt zu zeigen, dass $f \mapsto M_f$ die Eigenschaften 1)-3) aus Theorem 6.2 besitzt. Dann folgt aus der Eindeutigkeit des Funktionalkalküls, dass $\Phi(f) = M_f$. «

b.) Sei $A = -i \frac{d}{dx}$ in $L^2(\mathbb{R})$ mit $D_A = H^1(\mathbb{R})$. Dann ist $A = A^*$ und

$$f(A) = \mathcal{F}^{-1} f(p) \mathcal{F},$$

wobei $f(p)$ für den Multiplikationsoperator M_f steht.

» Analog zu Beispiel 1. «

c.) Sei $A = -\Delta$ in $L^2(\mathbb{R})$ und $D_A = H^2(\mathbb{R})$. Dann ist $A = A^*$ und

$$f(A) = \mathcal{F}^{-1} f(p^2) \mathcal{F}. \quad \blacksquare$$

Für alles Weitere sei \mathcal{H} ein Hilbertraum und $A : D \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator auf \mathcal{H} .

6.3 **Satz** Sei $A = A^*$ in \mathcal{H} und $f \in C_0(\mathbb{R})$, dann gilt

$$f(A) = \text{s-lim}_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{R}} f(t) \left(\frac{1}{t - i\varepsilon - A} - \frac{1}{t + i\varepsilon - A} \right) dt. \quad \times$$

» Übung. «

6-B Spektralmaß

6.4 **Satz** Sei $A = A^*$ und für jede Borel-Menge $\Omega \subset \mathbb{R}$ sei

$$P_\Omega := \chi_\Omega(A) = \Phi(\chi_\Omega).$$

Dann gelten:

- 1) P_Ω ist Orthogonalprojektor, d.h. $P_\Omega^2 = P_\Omega$ und $P_\Omega^* = P_\Omega$.
- 2) $P_\emptyset = 0$ und $P_{\mathbb{R}} = \text{Id}$.
- 3) Falls $\Omega = \bigcup_{k=1}^{\infty} \Omega_k$ und $\Omega_i \cap \Omega_k = \emptyset$ für $i \neq k$, dann ist

$$P_\Omega = \text{s-lim}_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N P_{\Omega_k}.$$

$$4) P_{\Omega}P_{\Omega'} = P_{\Omega \cap \Omega'}. \quad \times$$

» 1) Man rechnet direkt nach, dass

$$P_{\Omega}P_{\Omega} = \Phi(\chi_{\Omega})\Phi(\chi_{\Omega}) = \Phi(\chi_{\Omega}^2) = P_{\Omega},$$

$$P_{\Omega}^* = \Phi(\chi_{\Omega})^* = \Phi(\overline{\chi_{\Omega}}) = P_{\Omega}.$$

2) Eine leichte Übung zeigt, $\Phi(1) = \text{Id}$ und folglich ist

$$P_{\mathbb{R}} = \Phi(\chi_{\mathbb{R}}) = \Phi(1) = \text{Id},$$

$$P_{\emptyset} = \Phi(\chi_{\emptyset}) = \Phi(0) = 0.$$

3) Es gilt

$$\sum_{k=1}^N P_{\Omega_k} = \sum_{k=1}^N \Phi(\chi_{\Omega_k}) = \Phi\left(\sum_{k=1}^N \chi_{\Omega_k}\right) = \Phi\left(\chi_{\bigcup_{k=1}^N \Omega_k}\right),$$

wobei

$$\chi_{\bigcup_{k=1}^N \Omega_k} \xrightarrow{p} \chi_{\Omega}$$

also

$$P_{\Omega} = \Phi(\chi_{\Omega}) = \text{s-lim}_{N \rightarrow \infty} \Phi\left(\chi_{\bigcup_{k=1}^N \Omega_k}\right) = \text{s-lim}_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N P_{\Omega_k}$$

$$4) P_{\Omega}P_{\Omega'} = \Phi(\chi_{\Omega}\chi_{\Omega'}) = \Phi(\chi_{\Omega \cap \Omega'}) = P_{\Omega \cap \Omega'}. \quad \ll$$

Definition Jede Abbildung $P : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit den Eigenschaften 1)-3) aus Satz 6.4 heißt *projektionswertiges Maß*.

Eigenschaft 4) folgt aus 1)-3) und außerdem gelten

$$\Omega_1 \subset \Omega_2 \quad \Rightarrow \quad P_{\Omega_1} \leq P_{\Omega_2}, \quad \text{Monotonie}$$

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^N \Omega_k \quad \Rightarrow \quad P_{\Omega} \leq \sum_{k=1}^N P_{\Omega_k}, \quad \text{Subadditivität.}$$

Nach dem messbaren Funktionalalkül gibt es zu jedem selbstadjungierten Operator A ein projektionswertiges Maß. Dieses heißt auch *Spektralmaß*. \times

» Siehe [Tesog]. «

Definition Der Träger $\text{supp}(P)$ eines projektionswertigen Maßes P ist definiert durch

$$x \in \text{supp}(P) \Leftrightarrow P(U) \neq 0 \text{ für jede offene Umgebung } U \text{ von } x. \quad \times$$

6.5 **Lemma** Sei $A = A^*$ mit Spektralmaß P , dann gelten

- 1) $S = \text{supp}(P)$ ist abgeschlossen.
- 2) $P_S = \text{Id}$ und $P_{\mathbb{R} \setminus S} = 0$.
- 3) Für jede Funktion $f \in B(\mathbb{R}) \cap C(\mathbb{R})$ gilt

$$\|f(A)\| = \sup_{x \in S} |f(x)|. \quad \times$$

- » 1) Sei $x \notin S$, dann existiert eine offene Umgebung U von x mit $P_U = 0$. Also ist auch $y \notin S$ für jedes $y \in U$. Somit ist $\mathbb{R} \setminus S$ offen und S ist abgeschlossen.
- 2) Sei $K \subset \mathbb{R} \setminus S$. Dann existieren offene Mengen

$$\Omega_1, \dots, \Omega_N \subset \mathbb{R} \text{ mit } K \subset \bigcup_{k=1}^N \Omega_k \text{ und } P_{\Omega_k} = 0.$$

Also ist auch

$$0 \leq P_K \leq P_{\bigcup_{k=1}^N \Omega_k} \leq \sum_{k=1}^N P_{\Omega_k} = 0,$$

und somit $P_K = 0$. Sei nun $K_m = \{x \in \mathbb{R} : |x| \leq m \text{ und } \text{dist}(x, S) \geq \frac{1}{m}\} \subset \mathbb{R} \setminus S$. Dann ist K_m kompakt, $P_{K_m} = 0$ und

$$\bigcup_{m=1}^{\infty} K_m = \mathbb{R} \setminus S.$$

Daraus folgt

$$P_{\mathbb{R} \setminus S} \leq \sum_{m=1}^{\infty} P_{K_m} = 0,$$

also ist $P_{\mathbb{R} \setminus S} = 0$. Es folgt

$$P_S = P_S + P_{\mathbb{R} \setminus S} = P_{\mathbb{R}} = \text{Id}.$$

3) Nach 2) gilt

$$\|\Phi(f)\| = \|\Phi(\chi_S)\Phi(f)\| = \|\Phi(\chi_S f)\| \leq \sup_{x \in S} |f(x)|.$$

Sei $x \in S$. Es genügt nun zu zeigen, dass $\|\Phi(f)\| \geq |f(x)|$. Dies folgt trivialerweise, wenn $f(x) = 0$. Für $f(x) \neq 0$ gibt es ein $\varepsilon > 0$ so klein, dass

$$|f(x)| - \varepsilon \geq 0.$$

Die Abbildung $x \mapsto |f(x)|$ ist stetig, es gibt daher eine offene Umgebung U von x mit

$$y \in U \Rightarrow |f(y)| > |f(x)| - \varepsilon \geq 0.$$

Da $x \in S$, ist $P_U \neq 0$ und somit existiert ein $\varphi \in \mathcal{H}$ mit $\|\varphi\| = 1$ und $P_U \varphi = \varphi$. Somit gilt

$$\begin{aligned} \|\Phi(f)\varphi\|^2 &= \langle \varphi, \Phi(|f|^2)\varphi \rangle = \langle \varphi, \Phi(|f|^2)\Phi(\chi_U)\varphi \rangle \\ &= \langle \varphi, \Phi(\chi_U |f|^2)\varphi \rangle \geq (|f(x)| - \varepsilon)^2 \langle \varphi, \Phi(\chi_U)\varphi \rangle \\ &= (|f(x)| - \varepsilon)^2 \|\varphi\|. \end{aligned}$$

Somit ist $\|\Phi(f)\| \geq |f(x)| - \varepsilon$ für jedes $\varepsilon > 0$, also gilt auch $\|\Phi(f)\| \geq |f(x)|$.

«

6.6 **Satz** Sei $A = A^*$ mit Spektralmaß P . Dann gelten

1) $\sigma(A) = \text{supp } P$.

2) $\|(z - A)^{-1}\| = \text{dist}(z, \sigma(A))^{-1}$ für alle $z \in \rho(A)$. ✕

» Sei $S := \text{supp } P$, so gilt für $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ nach Lemma 6.5,

$$\|(z - A)^{-1}\| = \|\Phi(f_z)\| = \sup_{x \in S} \|(z - x)^{-1}\| = \text{dist}(z, S)^{-1}. \quad (*)$$

Für $\lambda \in \mathbb{R}$ sei $z_n = \lambda + in^{-1}$. Dann folgt

$$\lambda \in \sigma(A) \Leftrightarrow \|(z_n - A)^{-1}\| \rightarrow \infty \Leftrightarrow \text{dist}(z_n, S) \rightarrow 0 \Leftrightarrow \lambda \in \bar{S} = S.$$

Also ist $S = \sigma(A)$.

Für $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \sigma(A)$ folgt nun die zweite Behauptung aus (*) im Limes für $z \rightarrow \lambda$. «

6.7 **Lemma** Für jeden linearen Operator $B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ in einem Prähilbertraum \mathcal{H} und alle $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$ gilt die Polarisationsidentität

$$\begin{aligned} \langle \varphi, B\psi \rangle &= \frac{1}{4} [\langle \varphi + \psi, B(\varphi + \psi) \rangle - \langle \varphi - \psi, B(\varphi - \psi) \rangle] \\ &\quad + \frac{1}{4i} [\langle \varphi + i\psi, B(\varphi + i\psi) \rangle - \langle \varphi - i\psi, B(\varphi - i\psi) \rangle]. \quad \times \end{aligned}$$

» Der Beweis ist eine leichte Übung. «

6.8 **Satz** Sei $A = A^*$ mit Spektralmaß P und sei $f \in B(\mathbb{R})$. Dann gilt für alle $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} \langle \varphi, f(A)\psi \rangle &= \int f(\lambda) \, d\mu_{\varphi, \psi}(\lambda) \\ &:= \frac{1}{4} \left[\int f \, d\mu_{\varphi+\psi} - \int f \, d\mu_{\varphi-\psi} \right] + \frac{1}{4i} \left[\int f \, d\mu_{\varphi+i\psi} - \int f \, d\mu_{\varphi-i\psi} \right], \end{aligned}$$

wobei $\mu_{\varphi}(\Omega) = \langle \varphi, P(\Omega)\varphi \rangle$. \times

Bemerkung. $\mu_{\varphi, \psi} := \langle \varphi, P(\Omega)\psi \rangle$ ist ein komplexes Borelmaß. Eine Einführung in die allgemeine Integrationstheorie bezüglich komplexer Borelmaße würde den Rahmen dieser Vorlesung sprengen. Aufgrund der Zerlegung des Integrals, wie in Satz 6.8 angegeben, ist dies jedoch auch nicht notwendig, da wir uns auf gewöhnliche Integrale zurückziehen können. \rightarrow

» Ist f eine elementare Funktion

$$f = \sum_{k=1}^n c_k \chi_{\Omega_k}, \quad \Omega_k \in \mathcal{B},$$

so gilt

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \Phi(f)\varphi \rangle &= \left\langle \varphi, \sum_{k=1}^n c_k \Phi(\chi_{\Omega_k}) \varphi \right\rangle = \sum_{k=1}^n c_k \langle \varphi, P(\Omega_k)\varphi \rangle = \sum_{k=1}^n c_k \mu_{\varphi}(\Omega_k) \\ &= \int f(\lambda) \, d\mu_{\varphi}(\lambda). \end{aligned}$$

Zu jeder Funktion $f \in B(\mathbb{R})$ gibt es eine Folge (f_n) von elementaren Funktionen $f_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $f_n \xrightarrow{P} f$. Somit gilt

$$\langle \varphi, \Phi(f)\varphi \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \varphi, \Phi(f_n)\varphi \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n \, d\mu_{\varphi} = \int f \, d\mu_{\varphi},$$

mit dem Satz von Lebesgue und der Tatsache, dass μ_{φ} ein endliches Maß und damit jede beschränkte Funktion μ_{φ} -integrierbar ist.

Um den Beweis abzuschließen, ist noch die Polarisationsidentität auf $\langle \varphi, f(A)\psi \rangle$ anzuwenden. «

6-C Spektralsatz

Der messbare Funktionalkalkül $\Phi : B(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ lässt sich auch auf unbeschränkte borelmeasurable Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ ausdehnen. Der Operator $\Phi(f)$ ist dann in der Regel unbeschränkt und definiert durch

$$D(\Phi(f)) = \Phi\left(\frac{1}{1+|f|}\right)\mathcal{H},$$

$$\Phi(f)\varphi = \Phi\left(\frac{f}{1+|f|}\right)\varphi, \quad \text{falls } \varphi = \Phi\left(\frac{1}{1+|f|}\right)\psi.$$

6.9 **Satz** *Mit obigen Notationen gilt*

1) $\Phi(f)$ ist wohl- und dicht definiert.

2) $D(\Phi(f)) = \{\varphi \in \mathcal{H} : \int |f|^2 d\mu_\varphi < \infty\}$ und für alle $\varphi, \psi \in D(\Phi(f))$ gilt

$$\|\Phi(f)\varphi\|^2 = \int |f|^2 d\mu_\varphi$$

$$\langle \varphi, \Phi(f)\psi \rangle = \int f d\mu_{\varphi, \psi}$$

3) Ist (f_k) eine Folge in $B(\mathbb{R})$ mit $f_k(x) \rightarrow f(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}$ und $|f_k| \leq |f|$ für alle k , dann gilt für alle $\varphi \in D(\Phi(f))$,

$$\Phi(f_k)\varphi \rightarrow \Phi(f)\varphi, \quad k \rightarrow \infty. \quad \times$$

Bemerkung. Alle Integrale in 2) können durch $\int_{\sigma(A)}$ ersetzt werden. \rightarrow

» Siehe [RSa], [Wero7] oder [?, Kapitel 12]. \ll

6.10 **Spektralsatz** *Zu jedem selbstadjungierten Operator A gibt es ein eindeutig bestimmtes Spektralmaß P mit*

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda d\mu_{\varphi, \psi}, \quad (1)$$

$$\mu_\varphi(\Omega) := \langle \varphi, P(\Omega)\varphi \rangle \quad (2)$$

für alle $\varphi, \psi \in D(A)$. Umgekehrt wird zu jedem projektionswertigen Maß P durch (1) und (2) ein selbstadjungierter Operator A definiert. \times

» Übung. «

Bemerkungen. A. Man schreibt (1) oft in der Form

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dP(\lambda).$$

Das ist die Verallgemeinerung der Spektralzerlegung

$$A = \sum_{k=1}^m \lambda_k P_k$$

eines selbstadjungierten Operators $A \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$ mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ und zugehörigen Eigenprojektoren P_1, \dots, P_m .

B. **Spektrale Unterräume:** Sei $\Omega \in \mathbb{R}$ eine Borelmenge, $P_\Omega = \phi(\chi_\Omega)$ und $\mathcal{H}_\Omega = P_\Omega \mathcal{H}$. Dann ist $P_\Omega A \subset AP_\Omega$, und

$$A|_{\mathcal{H}_\Omega} : P_\Omega D(A) \subset \mathcal{H}_\Omega \rightarrow \mathcal{H}_\Omega$$

ist selbstadjungiert (Übung). Ist Ω offen, dann

$$\sigma(A) \cap \Omega \subset \sigma(A|_{\mathcal{H}_\Omega}) \subset \sigma(A) \cap \overline{\Omega}.$$

Insbesondere ist $A|_{\mathcal{H}_\Omega}$ beschränkt, wenn Ω beschränkt ist.

» Für $\lambda \in \sigma(A) \cap \Omega$ und alle $\varepsilon > 0$ klein genug gilt $(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \subset \Omega$ und $P_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)} \neq 0$. Also $\lambda \in \sigma(A|_{\mathcal{H}_\Omega})$.

Falls $\lambda \notin \sigma(A) \cap \overline{\Omega} := B$ dann ist $\delta := \text{dist}(\lambda, B) > 0$ und somit für alle $\varphi \in P_\Omega D(A)$,

$$\|(A - \lambda)\varphi\|^2 = \int_{\sigma(A) \cap \Omega} |t - \lambda|^2 \, d\mu_\varphi(t) \geq \delta^2 \int_{\sigma(A) \cap \Omega} d\mu_\varphi(t) = \delta^2 \langle \varphi, \varphi \rangle.$$

Also $\lambda \notin \sigma(A|_{\mathcal{H}_\Omega})$. «

C. $\lambda \in \mathbb{R}$ ist genau dann ein Eigenwert von A , wenn $P_{\{\lambda\}} \neq 0$ ist. Dann ist $P_{\{\lambda\}}$ der Orthogonalprojektor auf den Eigenraum zu λ . (siehe Aufgabenblatt 6)

D. In der Quantenmechanik wird jede beobachtbare Größe (Ort, Impuls, Spin, ...) durch einen selbstadjungierten Operator beschrieben. Die normierten Vektoren

$\varphi \in \mathcal{H}$ beschreiben die (reinen) Zustände des Systems. Ist $\Omega \subset \mathbb{R}$ eine Borelmenge, dann ist

$$\mu_\varphi(\Omega) = \langle \varphi, P(\Omega)\varphi \rangle, \quad P(\Omega) = \Phi(\chi_\Omega),$$

die Wahrscheinlichkeit bei einer Messung der Größe A einen Wert in Ω zu finden. Wegen $\mu_\varphi(\mathbb{R} \setminus \sigma(A)) = 0$ können nur Werte in $\sigma(A)$ gefunden werden.

Der Erwartungswert

$$\langle \varphi, A\varphi \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda d\mu_\varphi(\lambda), \quad \varphi \in D(A), \|\varphi\| = 1$$

kann allerdings jeden Wert zwischen $\inf \sigma(A)$ und $\sup \sigma(A)$ annehmen.

Zum Weiterlesen siehe [?] oder [Thi94]. \rightarrow

Definition Das *diskrete* und das *wesentliche* Spektrum eines selbstadjungierten Operators A sind definiert durch

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{disc}} &= \{\lambda \in \mathbb{R} : \lambda \text{ ist isolierter Eigenwert von } A \text{ mit endlicher Vielfachheit}\} \\ \sigma_{\text{ess}} &= \sigma(A) \setminus \sigma_{\text{disc}}. \quad \times \end{aligned}$$

6.11 **Satz** Sei $A = A^*$ und $P_\Omega(A) = \chi_\Omega(A)$. Dann gelten

- 1) $\lambda \in \sigma(A) \Leftrightarrow P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) \neq 0$ für alle $\varepsilon > 0$,
- 2) $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A) \Leftrightarrow \lambda \in \sigma(A)$ und es gibt ein $\varepsilon > 0$ mit $\dim P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A)\mathcal{H} < \infty$.
- 3) $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A) \Leftrightarrow \dim P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A)\mathcal{H} = \infty$ für alle $\varepsilon > 0$. \times

» 1) Nach Satz 6.5 gilt

$$\begin{aligned} \lambda \in \sigma(A) &\Leftrightarrow P_\Omega(A) \neq 0 \text{ für jede offene Menge } \Omega \ni \lambda. \\ &\Leftrightarrow P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) \neq 0 \text{ für alle } \varepsilon > 0. \end{aligned}$$

2) Nach der Definition des diskreten Spektrums und Aufgabenblatt 6 gilt

$$\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A) \Leftrightarrow \begin{cases} \lambda \text{ ist Eigenwert von } A \text{ mit } \dim P_{\{\lambda\}} < \infty \\ \text{und } B_\varepsilon(\lambda) \cap \sigma(A) = \{\lambda\} \text{ für ein } \varepsilon > 0. \end{cases}$$

Aus $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$ folgt also $P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) = P_{\{\lambda\}}$ und somit $\dim P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}\mathcal{H} < \infty$.

Ist umgekehrt $\lambda \in \sigma(A)$ und $n = \dim P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)} \mathcal{H} < \infty$. Dann gilt,

$$\sigma(A) \cap (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \subset \sigma(A|_{P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A)\mathcal{H}}}) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_m\}, \quad m \leq n.$$

Also ist λ ein isolierter Eigenwert von A mit endlicher Vielfachheit.

3) Folgt aus (i) und (ii). «

7 Kompakte Operatoren und Stabilität des wesentlichen Spektrums

Definition Eine Folge (φ_n) im Hilbertraum \mathcal{H} konvergiert *schwach* gegen $\varphi \in \mathcal{H}$, in Zeichen

$$\varphi_n \rightharpoonup \varphi, \quad n \rightarrow \infty,$$

wenn für alle $\psi \in \mathcal{H}$ gilt,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi, \varphi_n \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle. \quad \times$$

Bemerkungen. A. Jede Orthonormalfolge (φ_n) konvergiert schwach gegen Null, denn für alle $\psi \in \mathcal{H}$ ist

$$\sum_{n \geq 0} |\langle \psi, \varphi_n \rangle|^2 \leq \|\psi\|^2.$$

B. Aus $\varphi_n \rightarrow \varphi$ folgt $\varphi_n \rightharpoonup \varphi$. Umgekehrt folgt aus

$$\varphi_n \rightharpoonup \varphi, \quad \|\varphi_n\| \rightarrow \|\varphi\|$$

auch $\varphi_n \rightarrow \varphi$. \rightarrow

7.1 **Theorem von Weyl** Sei A selbstadjungiert. Die Zahl $\lambda \in \mathbb{R}$ ist genau dann in $\sigma_{\text{ess}}(A)$, wenn eine *Weylfolge* (φ_n) in $D(A)$ existiert, d.h. eine Folge mit

$$\|\varphi_n\| = 1, \quad \varphi_n \rightarrow 0, \quad \text{und} \quad \|(A - \lambda)\varphi_n\| \rightarrow 0. \quad \times$$

» “ \Rightarrow ”: Sei $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$ und $\mathcal{H}_n = P_{(\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n})}(A)\mathcal{H}$. Dann ist $\dim \mathcal{H}_n = \infty$ für jedes $n \geq 1$ nach Satz 6.11. Wir konstruieren rekursiv eine Orthonormalfolge (φ_n) mit $\varphi_n \in \mathcal{H}_n$.

Sei $\varphi_1 \in \mathcal{H}_1$ mit $\|\varphi_1\| = 1$. Gegeben $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$ orthonormalisiert mit $\varphi_k \in \mathcal{H}_k$ für $k = 1, \dots, n-1$, wählen wir $\varphi_n \in \mathcal{H}_n$ mit $\varphi_n \perp \{\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}\}$ und $\|\varphi_n\| = 1$. Es gilt dann $\varphi_n \rightarrow 0$ und

$$\|(A - \lambda)\varphi_n\|^2 = \int_{|t - \lambda| < \frac{1}{n}} |t - \lambda|^2 d\mu_{\varphi_n}(\lambda) \leq \frac{1}{n^2} \|\varphi_n\|^2 \rightarrow 0.$$

“ \Leftarrow ”: Sei (φ_n) eine Weylfolge, dann ist $\lambda \in \sigma(A)$. Wir führen nun die Annahme $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$ auf einen Widerspruch. Angenommen $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$, dann existiert nach Satz 6.11 ein $\varepsilon > 0$, so dass

$$\dim(P_{I_\varepsilon}(A)\mathcal{H}) < \infty, \quad I_\varepsilon = (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon).$$

Weiterhin gilt $P_{I_\varepsilon}(A)\varphi_n \rightarrow 0$, denn

$$P_{I_\varepsilon}(A)\varphi_n = \sum_{k=1}^N \psi_k \langle \psi_k, \varphi_n \rangle \rightarrow 0$$

wenn $(\psi_k)_{k=1}^N$ eine ONB von $P_{I_\varepsilon}(A)\mathcal{H}$ ist. Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \|P_{\mathbb{R} \setminus I_\varepsilon}(A)\varphi_n\|^2 &= \int_{\mathbb{R} \setminus I_\varepsilon} d\mu_{\varphi_n}(t) < \int_{|t - \lambda| > \varepsilon} \frac{|t - \lambda|^2}{\varepsilon^2} d\mu_{\varphi_n}(t) \\ &\leq \frac{1}{\varepsilon^2} \int |t - \lambda|^2 d\mu_{\varphi_n}(t) = \frac{1}{\varepsilon^2} \|(A - \lambda)\varphi_n\|^2 \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Also gilt auch

$$1 = \|\varphi_n\|^2 = \|P_{I_\varepsilon}(A)\varphi_n\|^2 + \|P_{\mathbb{R} \setminus I_\varepsilon}(A)\varphi_n\|^2 \rightarrow 0,$$

ein Widerspruch. «

Definition Ein beschränkter Operator $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ heißt **kompakt**, wenn die Bildfolge $(B\varphi_n)$ jeder beschränkten Folge (φ_n) eine konvergente Teilfolge besitzt.

B heißt **von endlichem Rang**, wenn $\dim(B\mathcal{H}) < \infty$. \times

7.2 **Satz** 1) Ist $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ von endlichem Rang, dann ist B kompakt.

2) Sind $B, C \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ kompakt und $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$, dann ist auch $\lambda B + \mu C$ kompakt.

- 3) Ist B kompakt und $C \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, dann sind auch BC und CB kompakt.
- 4) Ist B_n eine Folge kompakter Operatoren in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit $\|B_n - B\| \rightarrow 0$, dann ist auch B kompakt.
- 5) Ist B kompakt und $\varphi_n \rightarrow \varphi$, dann gilt $B\varphi_n \rightarrow B\varphi$. \times

Die kompakten Operatoren bilden also ein abgeschlossenes Ideal der beschränkten Operatoren und führen schwach konvergente in konvergente Folgen über.

» "1-5": Übung. «

7.3 **Theorem** Sei $A = A^*$ und $B \subset B^*$ mit $D(B) \supset D(A)$. Ist $B(A+i)^{-1}$ kompakt, dann ist $A+B$ selbstadjungiert auf $D(A)$ und

$$\sigma_{\text{ess}}(A+B) = \sigma_{\text{ess}}(A). \quad \times$$

Ist $B(A+i)^{-1}$ kompakt, dann heißt B **relativ kompakt** bezüglich A .

» 1) Wir zeigen $\|B(A+in)^{-1}\| \rightarrow 0$.

Wähle eine Folge (φ_n) in \mathcal{H} mit $\|\varphi_n\| = 1$ und

$$\begin{aligned} \|B(A+in)^{-1}\| &\leq \|B(A+in)^{-1}\varphi_n\| + \frac{1}{n} \\ &= \|B(A+i)^{-1}(A+i)(A+in)^{-1}\varphi_n\| + \frac{1}{n}. \end{aligned} \quad (*)$$

Die Existenz der Folge (φ_n) folgt direkt aus der Definition der Norm $\|B(A+in)^{-1}\|$. Aus dem Spektralsatz folgt, dass

$$\|(A+i)(A+in)^{-1}\| \leq 1$$

und für alle $y \in D(A)$ gilt

$$\begin{aligned} \left| \langle y, (A+i)(A+in)^{-1}\varphi_n \rangle \right| &= \left| \langle (A-i)y, (A+in)^{-1}\varphi_n \rangle \right| \\ &\leq \|(A-i)y\| \|(A+in)^{-1}\varphi_n\| \leq \frac{1}{n} \|(A-i)y\| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Da $D(A) \subset \mathcal{H}$ dicht liegt, folgt $(A+i)(A+in)^{-1}\varphi_n \rightarrow 0$ und damit gilt nach Voraussetzung

$$B(A+i)^{-1}(A+i)(A+in)^{-1}\varphi_n \rightarrow 0.$$

Mit (*) folgt somit $\|B(A+in)^{-1}\| \rightarrow 0$.

2) $A + B$ ist selbstadjungiert auf $D(A)$.

Nach 1) gibt es ein $n \in \mathbb{N}$, so dass

$$a := \left\| B(A + in)^{-1} \right\| < 1.$$

Somit gilt für alle $\varphi \in D(A)$,

$$\|B\varphi\| = \left\| B(A + in)^{-1}(A + in)\varphi \right\| \leq a \|(A + in)\varphi\| \leq a \|A\varphi\| + an \|\varphi\|.$$

Also ist $A + B$ selbstadjungiert auf $D(A)$ nach dem Theorem von Kato-Rellich 4.6.

3) $\sigma_{\text{ess}}(A + B) = \sigma_{\text{ess}}(A)$.

“ \supset ”: Sei $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$ und (φ_n) eine zugehörige Weylfolge. Dann gilt

$$\|(A + B - \lambda)\varphi_n\| \leq \underbrace{\|(A - \lambda)\varphi_n\|}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\|B\varphi_n\|}_{\downarrow 0},$$

denn $\|B\varphi_n\| = \|B(A + i)^{-1}(A + i)\varphi_n\|$ und

$$(A + i)\varphi_n = (A - \lambda)\varphi_n + (\lambda + i)\varphi_n \rightarrow 0,$$

während $B(A + i)^{-1}$ kompakt ist. Somit ist $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A + B)$.

“ \subset ”: Die Umkehrung folgt mit den gleichen Argumenten, denn

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

ist kompakt, da $(A + i)(A + B + i)^{-1}$ nach dem Graphensatz beschränkt ist. «

7.4 **Theorem** Sei \mathcal{H} ein separabler Hilbertraum und $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ kompakt. Dann existiert eine Folge (B_n) von Operatoren von endlichem Rang mit $\|B_n - B\| \rightarrow 0$. \times

» Da \mathcal{H} separabel ist, existiert eine abzählbare ONB (φ_k) . Sei P_N definiert durch

$$P_N \varphi = \sum_{k=1}^N \varphi_k \langle \varphi_k, \varphi \rangle,$$

dann gilt $P_N^* = P_N = P_N^2$ und $P_N \varphi \rightarrow \varphi$ für alle $\varphi \in \mathcal{H}$. Sei $B_N := BP_N$, dann ist B_N von endlichem Rang und nach Definition der Norm $\|B_N - B\|$ gibt es Vektoren γ_N mit $\|\gamma_N\| = 1$ und

$$\|B_N - B\| \leq \|(B_N - B)\gamma_N\| + \frac{1}{N}. \quad (*)$$

Es gilt

$$(1 - P_N)\gamma_N \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty,$$

denn für $\psi \in \mathcal{H}$ gilt

$$\langle \psi, (1 - P_N)\gamma_N \rangle = \langle (1 - P_N)\psi, \gamma_N \rangle \leq \underbrace{\|(1 - P_N)\psi\|}_{=0} \underbrace{\|\gamma_N\|}_{=1}$$

Da B kompakt ist, folgt aus (*), dass $\|B_N - B\| \rightarrow 0$. «

Kompakte Operatoren über einem separablen Hilbertraum können also als Abschluss der Operatoren von endlichem Rang aufgefasst werden.

Definition Ein Operator auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ heißt *Hilbert-Schmidt-Operator*, falls ein Kern $K \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ existiert mit

$$(B\varphi)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} K(x, y)\varphi(y) dy. \quad \times \tag{**}$$

Lemma Jeder Kern definiert via (**) einen beschränkten Operator B mit

$$\|B\| \leq \|K\|_2. \quad \times$$

» Sei also $K \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ und B via (**) definiert, dann ist

$$\begin{aligned} \int |B\varphi(x)|^2 dx &= \int \left| \int K(x, y)\varphi(y) dy \right|^2 dy \\ &\leq \int \left(\int |K(x, y)|^2 dy \right) \left(\int |\varphi(y)|^2 dy \right) dx \\ &= \|K\|_2^2 \|\varphi\|_2^2. \quad \ll \end{aligned}$$

Das Tensorprodukt $\varphi \otimes \psi \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ von $\varphi, \psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist definiert durch

$$(\varphi \otimes \psi)(x, y) := \varphi(x)\psi(y).$$

Ist (φ_n) eine ONB von $L^2(\mathbb{R}^n)$, dann ist $(\varphi_n \otimes \varphi_k)_{n,k \in \mathbb{N}}$ eine ONB von $L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$.

7.5 **Theorem** Jeder Hilbert-Schmidt-Operator auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist kompakt. «

» Sei B ein Hilbert-Schmidt-Operator mit Integralkern $K \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$, (φ_n) eine ONB von $L^2(\mathbb{R}^n)$ und

$$K_N := \sum_{l,j=1}^N \varphi_l \otimes \varphi_j \langle \varphi_l \otimes \varphi_j, K \rangle.$$

Der durch K_N definierte Hilbert-Schmidt-Operator B_N ,

$$(B_N \varphi)(x) = \int K_N(x, y) \varphi(y) dy$$

ist von endlichem Rang, denn $B_N L^2(\mathbb{R}^n) = \text{span} \{ \varphi_1, \dots, \varphi_N \}$, und folglich kompakt. Weiterhin ist

$$\|B - B_N\| \leq \|K - K_N\|_2 \rightarrow 0$$

also ist auch B kompakt. «

7.6 **Satz** Sind $f, g \in L^2(\mathbb{R}^n)$, dann ist

$$f(x)g(-i\nabla_x) = M_f \mathcal{F}^{-1} M_g \mathcal{F}$$

in $L^2(\mathbb{R}^n)$ dicht definiert und beschränkt. Die eindeutige beschränkte Fortsetzung auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist ein Hilbert-Schmidt-Operator mit Kern

$$(2\pi)^{-n/2} f(x) \check{g}(x - y). \quad \times$$

» Der Operator ist auf $S(\mathbb{R}^n)$ definiert, denn für $\varphi \in S(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$\hat{\varphi} \in S(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n) \cap L^\infty(\mathbb{R}^n)$$

also ist $g\hat{\varphi} \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$. Somit ist $\hat{\varphi} \in D(M_g)$ und

$$\mathcal{F}^{-1} M_g \mathcal{F} \varphi = \mathcal{F}^{-1}(g\hat{\varphi}) \in L^\infty(\mathbb{R}^n) \subset D(M_f).$$

Für $g, \varphi \in S(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$\mathcal{F}^{-1}(g\hat{\varphi}) = (2\pi)^{-n/2} \check{g} * \varphi.$$

Zu $g \in L^2(\mathbb{R}^n)$, existiert eine Folge (g_k) in $S(\mathbb{R}^n)$ mit $\|g_k - g\|_2 \rightarrow 0$ und somit ist für $\varphi \in S(\mathbb{R}^n)$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1} M_g \mathcal{F} \varphi &= \mathcal{F}^{-1} g\hat{\varphi} = L^2\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{F}^{-1}(g_k \hat{\varphi}) = L^2\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} (2\pi)^{-n/2} \check{g}_k * \varphi \\ &= (2\pi)^{-n/2} \check{g} * \varphi, \end{aligned}$$

denn $\|(\check{g}_k - \check{g}) * \varphi\|_2 \leq \|\check{g}_k - \check{g}\|_2 \|\varphi\|_1$. «

7.7 **Lemma** Sei $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ messbar und sei eine der folgenden Bedingungen erfüllt

$$(i) \quad V \in L^2(\mathbb{R}^n), \quad n \leq 3,$$

$$(ii) \quad V \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n), \quad n \leq 3, \quad V(x) \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty,$$

$$(iii) \quad V \in L^\infty(\mathbb{R}^n), \quad V(x) \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty.$$

Dann ist $V(-\Delta + 1)^{-1}$ kompakt. \times

Bemerkung. Die Kompaktheit von $V(-\Delta + 1)^{-1}$ ist äquivalent zur Kompaktheit der Abbildung

$$V : H^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n), \quad \varphi \mapsto V\varphi. \quad \rightarrow$$

» Sei $g(p) = (p^2 + 1)^{-1}$, dann ist $g \in L^2(\mathbb{R}^n)$ genau dann, wenn $n \leq 3$.

In den Fällen (ii) und (iii) genügt es zu zeigen, dass

$$V_R(-\Delta + 1)^{-1}, \quad V_R(x) = V(x)\chi_{|x| \leq R}$$

kompakt ist für alle $R > 0$, denn

$$\begin{aligned} \left\| V(-\Delta + 1)^{-1} - V_R(-\Delta + 1)^{-1} \right\| &\leq \|M_{V-V_R}\| \underbrace{\left\| (-\Delta + 1)^{-1} \right\|}_{\leq 1} \\ &\leq \|V - V_R\|_\infty = \sup_{|x| > R} |V(x)| \rightarrow 0, \quad R \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Da $V_R \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist $V_R(-\Delta + 1)^{-1}$ unter den Voraussetzungen von (ii) nach (i) kompakt.

Im Fall (iii) definieren wir $g_m(p) = g(p)\chi_{|x| \leq m}$, dann ist $g_m \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und

$$\|g_m - g\|_\infty = \sup_{|p| > m} \frac{1}{p^2 + 1} \rightarrow 0.$$

Also ist nach obigem Satz $V_R g_m(-i\nabla_x)$ kompakt und

$$\begin{aligned} \left\| V_R(-\Delta + 1)^{-1} - V_R g_m(-i\nabla_x) \right\| &\leq \|V_R\|_\infty \left\| (-\Delta + 1)^{-1} - g_m(-i\nabla_x) \right\| \\ &\leq \|V_R\|_\infty \|g - g_m\|_\infty \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Somit ist auch $V_R(-\Delta + 1)^{-1}$ kompakt. \leftarrow

7.8 **Theorem** Ist $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ messbar und $V(-\Delta + 1)^{-1}$ kompakt, dann ist

$$-\Delta + V : D \subset L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

selbstadjungiert auf $D = H^2(\mathbb{R}^n)$, nach unten beschränkt und $\sigma_{\text{ess}} = [0, \infty)$. \times

Bemerkung. Ein selbstadjungierter Operator A heißt nach unten beschränkt, wenn $\sigma(A)$ nach unten beschränkt ist. \rightarrow

» Wegen $\sigma_{\text{ess}}(-\Delta) = \sigma(-\Delta) = [0, \infty)$ bleibt nach den bisherigen Sätzen nur zu zeigen, dass $(-\Delta + V)$ nach unten beschränkt ist.

Für $\lambda > 0$ gilt

$$(-\Delta + V + \lambda) = (\text{Id} + V(-\Delta + \lambda)^{-1})(-\Delta + \lambda) \quad (*)$$

wobei $\|V(-\Delta + \lambda)^{-1}\| \rightarrow 0$ für $\lambda \rightarrow \infty$, da $\|V(-\Delta + 1)^{-1}\|$ kompakt ist (vgl. Beweis von $\|B(A + in)^{-1}\| \rightarrow 0$ zu Satz 7.3). Also existiert ein λ_0 , so dass für $\lambda > \lambda_0$

$$\|V(-\Delta + \lambda)^{-1}\| < 1$$

und folglich der Operator $-\Delta + V + \lambda$ nach (*), $H^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ bijektiv abbildet mit beschränkter Inverser. Also ist $-\lambda \in \rho(-\Delta + V)$ für $\lambda > \lambda_0$. \leftarrow

7.9 **Korollar** Erfüllt V die Voraussetzungen von Theorem 7.8 und ist

$$E := \inf \left\{ \langle \varphi, (-\Delta + V)\varphi \rangle : \varphi \in H^2(\mathbb{R}^n), \|\varphi\| = 1 \right\} < 0,$$

dann ist $E = \min \sigma(-\Delta + V)$ ein isolierter Eigenwert endlicher Vielfachheit. \times

» Sei $H = -\Delta + V$ und $\lambda_0 = \min \sigma(H)$. Aus dem Spektralsatz wissen wir,

$$\langle \varphi, H\varphi \rangle = \int_{\sigma(H)} \lambda \, d\mu_{\varphi}(\lambda) \geq \|\varphi\|^2 \lambda_0.$$

Wegen $\lambda_0 \in \sigma(H)$ ist $P_{(\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon)}(H) \neq 0$ für jedes $\varepsilon > 0$. Für $\varphi_{\varepsilon} \in P_{(\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon)}(H)\mathcal{H}$ ist dann

$$\langle \varphi_{\varepsilon}, H\varphi_{\varepsilon} \rangle = \int_{(\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon)} \lambda \, d\mu_{\varphi_{\varepsilon}}(\lambda) \leq \|\varphi_{\varepsilon}\|^2 (\lambda_0 + \varepsilon)$$

und folglich ist $E \leq \lambda_0$. Dass E ein isolierter Eigenwert endlicher Vielfachheit ist, folgt aus der Annahme $E < 0$ und aus Theorem 7.8. \leftarrow

Index

Defektindizes, 36

dicht definiert, 19

Ionisierungsschwelle, 15

Konvergenz

starke, 42

Lemma

Sobolev-, 7

von Riemann-Lebesgue, 5

Operator

abgeschlossen, 19

abschließbar, 25

Abschluss, 25

adjungiert, 27

definierender Bereich, 32

Erweiterung, 20

Hilbert-Schmidt-, 57

Kern, 29

kompakter, 54

linear, 19

selbstadjungiert, 29

symmetrisch, 29

von endlichem Rang, 54

wesentlich selbstadjungiert, 32

Resolvente, 20

Resolventenmenge, 20

schwache Ableitung, 9

schwache Konvergenz, 53

Sobolevraum, 6

Spektralmaß, 44

Spektrum, 20

Punkt-, 20

projektionswertiges Maß, 44

Literaturverzeichnis

- [CFKS07] CYCON H. L., FROESE R. G., KIRSCH W., SIMON B., *Schrödinger Operators*. 2. Auflage, Springer 2007.
- [Fun07] GRIESEMER M., *Funktionalanalysis*. Sommersemester 2007.
- [HS95] HISLOP P.D., SIGAL I.M., *Introduction to Spectral Theory*. 1. Auflage, Springer 1995.
- [Kat66] KATO T., *Perturbation Theory for Linear Operators*. 2. Auflage, Springer 1966.
- [RSa] REED M., SIMON B., *Methods of modern mathematical physics, Band 1*. Academic Press, 1995.
- [RSb] REED M., SIMON B., *Methods of modern mathematical physics, Band 2*. Academic Press, 2005.
- [Tes09] TESCHL G., *Mathematical Methods in Quantum Mechanics*. Volume 99, Amer. Math. Soc., Providence, 2009.
- [Thi94] THIRRING W., *Lehrbuch der Mathematischen Physik, Band 3*. 2. Auflage, Springer 1994.
- [Wero7] WERNER D., *Funktionalanalysis*. 6. Auflage, Springer 2007.
- [Yos80] YOSIDA K., *Functional analysis*. Springer 1980.