3.2 Das Cauchy-Problem für die freie Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \Delta\psi = 0 \quad (SG_0) \qquad \psi(t=0) = \psi_0$$

Vorbereitung: Berechnung der Fouriertransformierten von

$$G_{2it}(x) := e^{-it|x|^2} \qquad (t\in\mathbb{R}\setminus\{0\},\ x\in\mathbb{R}^n),$$

die als temperierte Distribution aufgefasst wird.

Für Gaussfunktionen $G_\beta(x) = e^{-\beta\frac{|x|^2}{2}}$ mit $\mathrm{Re}\,\beta > 0$ wissen

wir $$\widehat{G_\beta}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\beta}^n}\, e^{-\frac{|\xi|^2}{2\beta}} = \frac{1}{\sqrt{\beta}^n}\, G_{\frac{1}{\beta}}(\xi)$$

Ferner gilt punktweise

$$G_{2it}(x) = e^{-it|x|^2} = \lim_{\varepsilon\searrow 0} e^{-(it+\frac{\varepsilon}{2})|x|^2} = \lim_{\varepsilon\searrow 0} G_{2it+\varepsilon}(x)$$

Das gilt auch mit Konvergenz in $S'(\mathbb{R}^n)$, denn für $f\in S(\mathbb{R}^n)$ ist

$$G_{2it}[f] = \int_{\mathbb{R}^n} G_{2it}(x)\cdot f(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}^n} \lim_{\varepsilon\searrow 0} G_{2it+\varepsilon}(x)\cdot f(x)\,dx$$

Lebesguescher Konvergenzsatz, $|G_\beta(x) f(x)| \le |f(x)|$ wenn $\mathrm{Re}\,\beta \ge 0$ ist

$$= \lim_{\varepsilon\searrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} G_{2it+\varepsilon}(x) f(x)\,dx = \lim_{\varepsilon\searrow 0} G_{2it+\varepsilon}[f]$$

Also: $G_{2it} = S'\text{-}\lim\limits_{\varepsilon\searrow 0} G_{2it+\varepsilon}$.

Aufgrund der Stetigkeit der Fouriertransformation $\mathcal{F}: S'(\mathbb{R}^n)\to S'(\mathbb{R}^n)$ erhalten wir dann:

$$\widehat{G_{2it}} = S'\text{-}\lim_{\varepsilon\searrow 0} \widehat{G_{2it+\varepsilon}} = S'\text{-}\lim_{\varepsilon\searrow 0} \frac{1}{\sqrt{2it+\varepsilon}^n}\, G_{\frac{1}{2it+\varepsilon}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2it}^n}\, G_{\frac{1}{2it}}$$ womit die von $\frac{1}{\sqrt{2it}^n} G_{\frac{1}{2it}}(\xi)$ induzierte reguläre Distribution gemeint ist

Zsf.: $$\boxed{\widehat{G_{2it}}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2it}^n}\, e^{i\frac{|\xi|^2}{4t}}}$$

1. Existenz- und Eindeutigkeitssatz für (SG_0): Zu $\psi_0 \in S(\mathbb{R}^n)$ gibt es genau eine Lösung $\psi \in C^1(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ des Cauchy-Problems $\psi(0) = \psi_0$ zu $i\frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta\psi = 0$. Hierfür gelten $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$, also insbes. $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}^{n+1})$ und

$$\psi(x,t) = \begin{cases} \psi_0(x) & \text{für } t = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi i t}^{\,n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} \psi_0(y)\,dy. \end{cases}$$

Bew.: (1) Eindeutigkeit: Sei $\psi \in C^1(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ eine Lösung von (SG_0) mit $\psi(0) = \psi_0 \in S(\mathbb{R}^n)$. Dann ist

$$i\,\widehat{\frac{\partial \psi}{\partial t}}(\xi,t) - |\xi|^2\hat{\psi}(\xi,t) = 0 \quad \text{und} \quad \hat{\psi}(\xi,0) = \hat{\psi}_0(\xi)$$

Nun ist

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\xi,t) = \lim_{h\to 0} (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} \frac{1}{h}(\psi(x,t+h) - \psi(t,x))\,dx$$

$$\underset{\text{MWS,}}{=} \lim_{h\to 0} (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} \frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t+\vartheta(x))\,dx \quad \text{mit } |\vartheta(x)| \leq |h| \underset{\text{O.E.}}{\ll} 1$$

Zerlege ggf. in Re + i Im

Nach Vor. ist $t \mapsto \frac{\partial \psi}{\partial t}(\cdot, t)$ eine stetige Funktion mit Werten in $S(\mathbb{R}^n)$, so dass

$$\left|\frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t+\vartheta(x))\right| \leq \langle x\rangle^{-n-1} \sup_{s\in[t-1,t+1]} g_{n+1}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}(s)\right),$$

womit eine integrierbare Majorante gefunden ist.

Also mit Lebesgue

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\xi,t) = |\xi|^2\hat{\psi}(\xi,t) \quad \forall (\xi,t) \in \mathbb{R}^{n+1}, \quad \hat{\psi}(\xi,0) = \hat{\psi}_0(\xi)$$

Bei festem $\xi \in \mathbb{R}^n$ hat dieses AWP für eine gewöhnliche lineare Dgl. 1. Ordnung die eindeutige Lösung

$$\hat{\psi}(\xi,t) = e^{-it|\xi|^2}\hat{\psi}_0(\xi).$$

Mit dem vorbereitenden Bsp. und dem Faltungssatz erhalten wir für $t \neq 0$:

$$\psi(x,t) = \mathcal{F}^{-1}\left(e^{-it|\cdot|^2}\hat{\psi}_0\right)(x) = (2\pi)^{-n/2}\left(\mathcal{F}^{-1}G_{2it}\right) * \psi_0(x)$$

$$= (2\pi)^{-n/2}\frac{1}{\sqrt{2it}^{\,n}}\, e^{i\frac{|\cdot|^2}{4t}} * \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i t}^{\,n}}\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}}\psi_0(y)\,dy.$$

(2) Regularität und Dgl.: Aus (1) entnehmen wir, dass für ψ (wie angegeben) gilt

$$\hat{\psi}(\xi,t) = e^{-t|\xi|^2}\hat{\psi}_0(\xi).$$

Hieraus folgt für alle $j \in \mathbb{N}_0$

$$s_j\left(\hat{\psi}(t+h)-\hat{\psi}(t)\right) = \sup_{\substack{|\alpha|\le j\\ \xi\in\mathbb{R}^n}} \left|\langle\xi\rangle^j \nabla_\xi^\alpha \left(e^{i(t+h)|\xi|^2} - e^{it|\xi|^2}\right)\hat{\psi}_0(\xi)\right|$$

$$\lesssim \sup_{\substack{|\alpha|\le j\\ \xi\in\mathbb{R}^n}} \Big|\underbrace{\left(e^{ih|\xi|^2}-1\right)}_{|\cdot|\le |h||\xi|^2}\langle\xi\rangle^{3j}\nabla_\xi^\alpha\hat{\psi}_0(\xi)\Big| \lesssim |h|\, s_{3j+2}(\hat{\psi}_0) \underset{(h\to 0)}{\longrightarrow} 0$$

Also ist $\hat{\psi} \in C(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$. Ähnlich sieht man

$$s_j\left(\tfrac{1}{h}\left(\hat{\psi}(t+h)-\hat{\psi}(t)\right) - \left(-i|\xi|^2\hat{\psi}(t)\right)\right) \underset{(h\to 0)}{\longrightarrow} 0 \quad \forall j \in \mathbb{N}_0$$

und das bedeutet $\hat{\psi} \in C^1(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ und

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(t,\xi) - |\xi|^2\hat{\psi}(t,\xi) = 0.$$

Nun ist $\mathcal{F}^{-1}: S(\mathbb{R}^n) \to S(\mathbb{R}^n)$ stetig und damit

$S\text{-}\lim\limits_{h\to 0} \psi(t+h)-\psi(t) = 0$, d.h. $\psi \in C(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$

sowie

$$S\text{-}\lim_{h\to 0} \frac{1}{h}(\psi(t+h)-\psi(t)) = \mathcal{F}^{-1}\, S\text{-}\lim_{h\to 0} \frac{1}{h}(\hat{\psi}(t+h)-\hat{\psi}(t))$$

$$= \mathcal{F}^{-1}(-i|\xi|^2\hat{\psi}(t)) = i\Delta\psi(t), \text{ d.h.}$$

$$\psi \in C^1(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n)) \text{ und } i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \Delta\psi = 0.$$

Für höhere Regularitäten setzt man $\varphi = \frac{\partial\psi}{\partial t} = i\Delta\psi$. Dann ist $\varphi \in C^1(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$, $i\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \Delta\varphi = 0$ und $\varphi(0) = i\Delta\psi_0$.
$\Rightarrow \psi \in C^2(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$, induktiv: $\psi \in C^k(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))\ \forall k \in \mathbb{N}$.

Die Voraussetzungen des Satzes sind sehr stark. Teilaussagen des Thms. können auf anderem Wege teils einfacher, teils unter schwächeren Voraussetzungen gezeigt werden:

Def.: (1) Für $s \in \mathbb{R}$ heißt $J^s: S'(\mathbb{R}^n) \to S'(\mathbb{R}^n)$, $f \mapsto J^s f$, definiert durch $J^s f := \mathcal{F}^{-1}\langle\xi\rangle^s \mathcal{F} f$ der <u>Bessel-Potential-Operator der Ordnung $-s$</u>.

(2) Für $s \in \mathbb{R}$, $1 \le p < \infty$ heißt $H^s_p(\mathbb{R}^n) := \{f \in S'(\mathbb{R}^n) : \|f\|_{s,p} < \infty\}$ mit der Norm $\|f\|_{s,p} := \|J^s f\|_p$ ein <u>Bessel-Potential-Raum</u>.

Bem.: (1) Diese Räume werden oft auch als Sobolev-Räume bezeichnet.

(2) Per Definitionem ist $J^\sigma: H^s_p(\mathbb{R}^n) \to H^{s-\sigma}_p(\mathbb{R}^n)$ ein isometrischer Isomorphismus. Speziell: $H^0_p = L^p$.

(3) $H^s(\mathbb{R}^n) := H_2^s(\mathbb{R}^n)$ ist ein Hilbertraum und daher von besonderem Interesse. Aufgrund des Satzes von Plancherel gilt

$$\|f\|_{s,2}^2 = \int_{\mathbb{R}^n} \langle \xi \rangle^{2s} |\hat{f}(\xi)|^2 d\xi .$$

Satz 2 (H^s-Normerhaltung und Eindeutigkeit): Es sei $\psi \in C^1(\mathbb{R}, H^s(\mathbb{R}^n)) \cap C(\mathbb{R}, H^{s+2}(\mathbb{R}^n))$ eine Lösung von (SG_0) mit $\psi(0) = \psi_0 \in H^{s+2}(\mathbb{R}^n)$. Dann ist ψ (in dieser Funktionenklasse) eindeutig bestimmt und für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt $\|\psi(t)\|_{s,2} = \|\psi_0\|_{s,2}$.

Bew.: Für $s=0$ haben wir mit dem $L^2(\mathbb{R}^n)$-Skalarprodukt

$$\frac{d}{dt}\|\psi(t)\|_2^2 = \frac{d}{dt}\langle \psi(t), \psi(t)\rangle = 2\,\mathrm{Re}\,\langle \frac{\partial \psi}{\partial t}(t), \psi(t)\rangle$$

$$\underset{\text{Dgl.}}{=} 2\,\mathrm{Re}\,\langle i\Delta\psi(t), \psi(t)\rangle = -2\,\mathrm{Re}\,(i\langle \nabla\psi(t), \nabla\psi(t)\rangle) = 0 .$$

Daher gilt $\|\psi(t)\|_2 = \|\psi_0\|_2$.

Sind $u, v \in C^1(\mathbb{R}, H^s(\mathbb{R}^n)) \cap C(\mathbb{R}, H^{s+2}(\mathbb{R}^n))$ Lösungen mit $u(0) = v(0)$ und $w = u - v$, so gilt $i\frac{\partial w}{\partial t} + \Delta w = 0$, $w(0) = 0$ und daher $\|w(t)\|_2 = \|w(0)\|_2 = 0$, also $w \equiv 0$.

Für $s \neq 0$ setzen wir $\varphi = J^s\psi$. Dann ist

$$\varphi \in C^1(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^n)) \cap C(\mathbb{R}, H^2(\mathbb{R}^n)),$$

$\varphi(0) = J^s\psi(0) = J^s\psi_0$ und $i\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \Delta\varphi = 0$. Also ist $\forall t \in \mathbb{R}$

$$\|\psi(t)\|_{s,2} = \|J^s\psi(t)\|_2 = \|\varphi(t)\|_2 = \|\varphi(0)\|_2$$

$$= \|J^s\psi_0\|_2 = \|\psi_0\|_{s,2} .$$

Aus der Normerhaltung folgt die Eindeutigkeit. $\square$

Die vermutlich allgemeinste Existenz- und Eindeutigkeitsaussage in diesem Zusammenhang ist der folgende

<u>Satz 3</u>: Es sei $\psi_0 \in S'(\mathbb{R}^n)$. Dann gibt es genau eine Lösung $\psi \in C^1(\mathbb{R}, S'(\mathbb{R}^n))$ von (SG_0) mit $\psi(0) = \psi_0$. Hierfür gelten $\psi(t) = \mathcal{F}^{-1} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F} \psi_0$ und $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}, S'(\mathbb{R}^n))$.

Anmerkungen zum Bew.: (1) Existenz + Reg.: Man setzt

$$U(t)\psi_0 := \mathcal{F}^{-1} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F} \psi_0 = \psi(t)$$

mit dem angegebenen Kandidaten für eine Lösung und

hat $U(t)\psi_0[\varphi] = \mathcal{F}^{-1} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F}\psi_0[\varphi] = \psi_0[\mathcal{F} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F}^{-1}\varphi]$

und $\mathcal{F} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F}^{-1} \varphi = \mathcal{F} e^{-it|\cdot|^2} R\hat{\varphi} = \mathcal{F}R(e^{-it|\cdot|^2}\hat{\varphi})$

$$= \mathcal{F}^{-1} e^{-it|\cdot|^2} \mathcal{F}\varphi = U(t)\varphi$$

Hierbei ist $\varphi \in S(\mathbb{R}^n)$ beliebig und $U(\cdot)\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ die eindeutig bestimmte Lösung von (SG_0) mit Anfangswert φ entsprechend dem ersten Ex.+Eind.-Satz. Also für alle $\varphi \in S(\mathbb{R}^n)$

stetig auf $S(\mathbb{R}^n)$

$$\frac{d\psi}{dt}[\varphi] = \frac{d}{dt} U(t)\psi_0[\varphi] = \frac{d}{dt}\psi_0[U(t)\varphi] = \dots$$

$$= \psi_0\left[\frac{d}{dt}U(t)\varphi\right] \overset{\text{Dgl.}}{=} \psi_0[i\Delta U(t)\varphi] = \dots \qquad \Delta = \mathcal{F}^{-1}(-|\cdot|^2)\mathcal{F}$$

$$= \psi_0[i U(t)\Delta\varphi] = i\Delta U(t)\psi_0[\varphi] = i\Delta\psi(t)[\varphi]$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi}{dt} = i\Delta\psi.$$

Ähnlich: Stetigkeit, Stetigkeit der Ableitung. Für höhere Regularitäten. $\tilde{\psi} = i\Delta\psi \rightsquigarrow i\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} + \Delta\tilde{\psi} = 0$, $\tilde{\psi}(0) = i\Delta\psi_0 \rightsquigarrow \dots$

(2) Eindeutigkeit: Sei $\Psi \in C^1(\mathbb{R}, S'(\mathbb{R}^n))$ eine Lösung von (SG_0) mit $\Psi(0) = \Psi_0 \in S'(\mathbb{R}^n)$ und $\varphi \in S(\mathbb{R}^n)$ beliebig. Man definiert

$$F : \mathbb{R} \to \mathbb{C},\ t \mapsto F(t) := U(-t)\Psi(t)[\varphi] \overset{\text{s.o.}}{=} \Psi(t)[U(-t)\varphi].$$

Jetzt möchte man nach der "Produktregel" ableiten, dann kommt $F'(t) \equiv 0$ und für $\Psi_0 = 0$ auch $F(t) \equiv 0$ heraus, also die gewünschte Eindeutigkeitsaussage.

Dafür benötigt man die Stetigkeit von F, die man aus einer Version des "Prinzips der gleichmäßigen Beschränktheit" in lokalkonvexen topologischen Vektorräumen erhält. (Siehe Rudin, Walter: Functional Analysis, Theo. 2.6, 2.17)

Diskussion:

(1) Außerhalb der Klasse $C^1(\mathbb{R}, S'(\mathbb{R}^n))$ gibt es durchaus nichttriviale Lösungen von (SG_0) mit Anfangswert $\Psi_0 = 0$. (Das können wir ggf. in den Übungen diskutieren.)

(2) Die Feststellung $\Psi \in C^\infty(\mathbb{R}, S'(\mathbb{R}^n))$ umfasst nicht die punktweise Konvergenz der Lösung gegen die Daten Ψ_0, also die Aussage

$$(*) \qquad \lim_{t \to 0} \Psi(x,t) = \Psi_0(x) \quad \text{für } \lambda^n\text{-fast alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

Das ist klar, wenn Ψ_0 keine reguläre Distribution und damit nicht punktweise definiert ist. Aber selbst für $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist (*) im allgemeinen falsch! Das hängt unter anderem damit zusammen, dass der "Schrödinger-Kern" $(S_t)_{t>0}$ mit

$$S_t(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i t}^{\,n}} e^{-i\frac{|x|^2}{4t}}$$

keine approximative Einheit ist. Auf der Skala der Sobolev-Räume ist das beste Ergebnis

Wenn ein $s > \frac{n}{2(n+1)}$ existiert, für das $\psi_0 \in H^s(\mathbb{R}^n)$, so gilt (*). (Carleson (1980) für $n=1$, sogar mit "$= \frac{1}{4}$", Du & Zhang (2019) für $n \geq 2$)

Dieses Ergebnis ist nahezu optimal: Bourgain hat 2016 für $n \geq 2$ gezeigt: Ist $s < \frac{n}{2(n+1)}$, so existiert ein $\psi_0 \in H^s(\mathbb{R}^n)$, so dass (*) nicht gilt. ($n=1$: Dahlberg, Kenig (1982))

Leicht einzusehen ist

Proposition 1: Sei $\psi_0 \in H^s(\mathbb{R}^n)$ und ψ die eindeutige Lösung (nach Satz 3) von

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta\psi = 0 \qquad \psi(0) = \psi_0 .$$

Dann gelten:

(1) $\lim\limits_{t\to 0} \|\psi(t) - \psi_0\|_{s,2} = 0$

(2) Falls $s > \frac{n}{2}$ ist: $\lim\limits_{t\to 0} \|\psi(t) - \psi_0\|_\infty = 0$, das ist die gleichmässige Konvergenz.

Bew.: (1) $\|\psi(t)-\psi_0\|_{s,2}^2 = \int \langle\xi\rangle^{2s} \underbrace{|e^{-it|\xi|^2}-1|^2}_{\leq 4} |\hat{\psi}_0(\xi)|^2 d\xi \underset{(t\to 0)}{\longrightarrow} 0$

aufgrund des Lebesgueschen Konvergenzsatzes.

(2) $\|f\|_\infty = \|\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}f\|_\infty \leq \|\mathcal{F}f\|_1 = \int |\hat{f}(\xi)|\,d\xi$

$$= \int \langle\xi\rangle^{-s}\left(\langle\xi\rangle^{s}|\hat{f}(\xi)|\right)d\xi \lesssim_s \|f\|_{s,2}, \text{ wenn } s>\tfrac{n}{2}. \ \square$$

Bem.: Die in (2) für $s>\frac{n}{2}$ gezeigte Aussage „$H^s(\mathbb{R}^n)\subset L^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit einer stetigen Einbettung" wird als Sobolewscher Einbettungssatz bezeichnet. Allgemeiner gilt für $1\leq p\leq q<\infty$ und $s\geq \frac{n}{p}-\frac{n}{q}$, dass $H^s_p(\mathbb{R}^n)\subset L^q(\mathbb{R}^n)$. Das ist aber etwas schwieriger zu beweisen.

(3) Die Integraldarstellung

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i t}^{\,n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\frac{|x-y|^2}{4t}}\psi_0(y)\,dy$$

aus dem 1. —-Satz führt unmittelbar auf die Abschätzung

$$\|\psi(t)\|_\infty \lesssim |t|^{-n/2}\|\psi_0\|_1,$$

die als „time-decay-estimate" oder „dispersive estimate" bezeichnet wird. Um den zeitlichen Abfall qualitativ zumindest ansatzweise zu verstehen, schreiben wir

$$\psi(x,t) = c_n \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\xi-it|\xi|^2}\hat{\psi}_0(\xi)\,d\xi.$$

Die Superlinearität der Phasenfunktion $\varphi(\xi)=-|\xi|^2$

führt dazu, dass sich bei dieser Überlagerung Beiträge verschiedener Wellenvektoren ξ_1, ξ_2 für $|\xi_1| << |\xi_2|$ mit unterschiedlicher Gruppengeschwindigkeit

$$V_g(\xi_i) = \nabla -|\xi|^2 = -2\xi_i$$

ausbreiten. Das führt wiederum zu einer Verbreiterung und Abflachung des Anfangsprofils. Diese "dispersive Abschätzung" kann man mit der L^2-Normerhaltung interpolieren (Satz v. Riesz-Thorin) und erhält

$$\|\psi(t)\|_p \lesssim |t|^{-\frac{n}{2}\left(\frac{1}{p'}-\frac{1}{p}\right)} \|\psi_0\|_{p'} \qquad (2 \le p \le \infty).$$

Dies liefert den Ausgangspunkt zum Beweis von Raum-Zeitabschätzungen in gemischten L^p-Normen:

$$\|\psi\|_{L^p_t(L^q_x)} \lesssim \|\psi_0\|_2 ,$$

sog. "Strichartz-Abschätzungen", die unter den Voraussetzungen

$$\frac{2}{p} = n\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{q}\right), \quad 2 \le q \le \frac{n}{n-2} \qquad \begin{pmatrix} q \le \infty : n=1 \\ q < \infty : n=2 \end{pmatrix}$$

gelten. Solche Abschätzungen spielen eine fundamentale Rolle in der Analysis semilinearer Schrödingergleichungen wie z. B.

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta\psi = \lambda|\psi|^{\kappa}\psi \qquad (\kappa>0).$$

Das Cauchy-Problem für die Hermite-Schrödinger-Gleichung [1)]

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-\Delta + |x|^2)\psi =: H\psi \qquad (SG_{|x|^2}), \quad \psi(0) = \psi_0 .$$

Auch in diesem Fall kann man die Lösung in geschlossener Form

$$\psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} k(x,y;t)\,\psi_0(y)\,dy$$

angeben. Allerdings ist der Integralkern k hier kein „Faltungskern" mehr wie bei Gleichungen mit konstanten Koeffizienten. Zuerst betrachten wir jedoch eine spezielle Klasse von Daten, nämlich die Hermite-Funktionen vom 1. Übungsblatt.

Erinnerung: In einer Raumdimension setzt man

$$H_0(x) := \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-x^2/2} \quad \text{und, für } k \geq 1, \quad H_k(x) := \frac{1}{\sqrt{k}} b^* H_{k-1}(x)$$

mit dem „Aufsteigeoperator" $b^* := \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \frac{d}{dx})$. Dieser ist formal adjungiert zum „Absteigeoperator"

$b = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{d}{dx})$ und zusammen bilden sie den

„Besetzungszahloperator"

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

dessen Eigenvektoren gerade die Hermite-Funktionen sind:

$$N H_k = k H_k \qquad (k \in \mathbb{N}_0).$$

Nun besteht in $n=1$ offenbar der Zusammenhang

$$H_{(n=1)} = 2N + 1$$

1) = Schrödinger-Gleichung mit Oszillator-Potential

und daher gilt

$$H H_k = (2N+1) H_k = (2k+1) H_k .$$

In höheren Raumdimensionen definiert man

$$H_{\vec k}(x) := \prod_{j=1}^{n} H_{k_j}(x_j) \qquad \vec k = (k_1,\dots,k_n) \in \mathbb{N}_0^n$$

und erhält

$$H H_{\vec k}(x) = \sum_{j=1}^{n} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + x_j^2\right) \prod_{l=1}^{n} H_{k_l}(x_l)$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \Big(\prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} H_{k_i}(x_i) \Big) H_{(n=1)} H_{k_j}(x_j)$$

$$= \sum_{j=1}^{n} (2k_j+1) \prod_{i=1}^{n} H_{k_i}(x_i) = (2|\vec k| + n) \cdot H_{\vec k}(x),$$

wobei $|\vec k| = \sum_{j=0}^{n} k_j$ die Länge des Multiindex $\vec k$ ist.

<u>Proposition 2</u>: Sei $\vec k \in \mathbb{N}_0^n$ und $H_{\vec k}$ die entsprechende Hermite-Funktion. Das Cauchy-Problem

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-\Delta + |x|^2)\psi = H\psi; \qquad \psi(0) = H_{\vec k}$$

wird gelöst durch $\psi(x,t) = e^{-i(2|\vec k|+n)t} H_{\vec k}(x)$.

<u>Bew.</u>: $$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) = (2|\vec k| + n) \cdot e^{-i(2|\vec k|+n)t} H_{\vec k}(x)$$

$$= e^{-i(2|\vec k|+n)t} H H_{\vec k}(x) = H\psi(x,t). \qquad \square$$

<u>Bem.</u>: $\| \ \|_2$-Erhaltung und damit die Eindeutigkeit erhält man leicht in der Klasse $C^1(\mathbb{R}, L^2) \cap C^0(\mathbb{R}, D)$ mit $D = \{ f \in L^2 : Hf \in L^2 \}$.

Da die $(H_{\vec{k}})_{\vec{k}\in\mathbb{N}_0^n}$ eine ONB von $L^2(\mathbb{R}^n)$ bilden, ist es naheliegend, einen beliebigen Anfangswert $\psi_0\in L^2(\mathbb{R}^n)$ (oder $\psi_0\in D$) nach den $H_{\vec{k}}$ zu entwickeln und die Lösung in der Form

$$\psi(t)=\sum_{\vec{k}\in\mathbb{N}_0^n} e^{-i(2|\vec{k}|+n)t}\langle\psi_0,H_{\vec{k}}\rangle H_{\vec{k}} \qquad (*)$$

aufzuschreiben. Hieran kann man z.B. schon erkennen, dass $\psi(t+2\pi)=\psi(t)$ und $\lim_{t\to\infty}\|\psi(t)\|_\infty=0$ unmöglich ist. Punktweise wird die Analyse schwieriger. Schreiben wir $(*)$ aus:

$$\psi(x,t)=\sum_{\vec{k}\in\mathbb{N}_0^n} e^{-i(2|\vec{k}|+n)t}\int_{\mathbb{R}^n}\psi_0(y)H_{\vec{k}}(y)\,dy\; H_{\vec{k}}(x)$$

$$\overset{(?)}{=}\int_{\mathbb{R}^n}\underbrace{\Big(\sum_{\vec{k}\in\mathbb{N}_0^n} e^{-i(2|\vec{k}|+n)t}H_{\vec{k}}(x)H_{\vec{k}}(y)\Big)}_{\text{Kandidat für } K(x,y;t)}\psi_0(y)\,dy.$$

Die hier auftretende unendliche Reihe erweist sich als divergent für $t\in\{2\pi k: k\in\mathbb{Z}\}$, man kann sie aber unter bestimmten Voraussetzungen an ψ_0 tatsächlich explizit berechnen! Weder die Rechnung noch die dabei auftretenden Konvergenzfragen sind "straight forward". (Ich habe eine BT üblichen Umfangs darüber schreiben lassen, die übrigens sehr gut gelungen ist.) Am Ende der Mühe lässt sich eine Abkürzung erraten in Form einer invertierbaren Transformation, die Lösungen von $(SG_{|x|^2})$ in solche von (SG_0) überführt. Dies möchte ich im Folgenden skizzieren:

Es seien $0 < T \leq \infty$, $v \in C^{2,1}(\mathbb{R}^4 \times (-T,T))$ und $\omega > 0$. Wir definieren

$$I_\omega := \left(-\frac{\arctan(\omega T)}{\omega}, \frac{\arctan(\omega T)}{\omega}\right)$$

$$y := \frac{x}{\cos(\omega t)}, \qquad s := \frac{\tan(\omega t)}{\omega} \qquad \text{und}$$

$$\boxed{T_\omega v(x,t) := \cos(\omega t)^{-4/2} \exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2 \tan(\omega t)\right) v(y,s).}$$

Bem.: Die Transformation T_ω kann händisch invertiert werden: Wegen

$$1 + \omega^2 s^2 = 1 + \tan^2(\omega t) = \frac{1}{\cos^2(\omega t)}$$

sind $\cos(\omega t)^{4/2} = (1+\omega^2 s^2)^{-\frac{4}{4}}$, $\tan(\omega t) = \omega s$, $|x|^2 = \dfrac{|y|^2}{1+\omega^2 s^2}$ und somit

$$v(y,s) = \cos(\omega t)^{4/2} \exp\left(+i\frac{\omega}{4}|x|^2 \tan(\omega t)\right) T_\omega v(x,t)$$

bzw.

$$\boxed{T_\omega^{-1} u(y,s) = (1+\omega^2 s^2)^{-\frac{4}{4}} \exp\left(i\frac{\omega^2}{4}\frac{|y|^2 s}{1+\omega^2 s^2}\right) u\left(\frac{y}{\sqrt{1+\omega^2 s^2}}, \frac{\arctan(\omega s)}{\omega}\right)}$$

Lemma 1: $T_\omega v \in C^{2,1}(\mathbb{R}^4 \times I_\omega)$ und es gilt

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \Delta\right) T_\omega v(x,t) = \frac{\omega^2 |x|^2}{4} T_\omega v(x,t) + \ldots$$

$$\ldots \cos(\omega t)^{-4/2-2} \exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2 \tan(\omega t)\right)\left(i\frac{\partial}{\partial s} + \Delta_y\right) v(y,s).$$

Bew.: Die Regularitätsaussage ist klar, weil cos und tan C^∞ sind. Ferner ist $s \in (-T,T)$ g.d.w. $t \in I_\omega$ ist. Es bleibt also eine etwas längere, aber elementare Rechnung übrig. Dazu setzen wir $u := T_\omega v$:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = -\frac{n}{2}\cos(\omega t)^{-\frac{n}{2}-1}(-\sin(\omega t)\omega)\cdot\exp(\ldots)\cdot v(y,s)$$

$$+\cos(\omega t)^{-\frac{n}{2}}\cdot\exp(\ldots)\cdot\left(-i\frac{\omega^2}{4}\frac{|x|^2}{\cos^2(\omega t)}\right)v(y,s)$$

$$+\cos(\omega t)^{-\frac{n}{2}}\exp(\ldots)\cdot\left(\langle\nabla_y v(y,s),x\rangle\cdot\frac{\omega\sin(\omega t)}{\cos^2(\omega t)}+\frac{\partial v}{\partial s}(y,s)\cdot\frac{1}{\cos^2(\omega t)}\right)$$

$$=\cos(\omega t)^{-\frac{n}{2}}\cdot\exp(\ldots)\cdot\{\} \quad \text{wobei}$$

$$\{\} = \left(\frac{n}{2}\omega\tan(\omega t) - i\frac{\omega^2|x|^2}{4\cos^2(\omega t)}\right)v(y,s)$$

$$+\langle\nabla_y v(y,s),x\rangle\frac{\omega\sin(\omega t)}{\cos^2(\omega t)}+\frac{\partial v}{\partial s}(y,s)\cdot\frac{1}{\cos^2(\omega t)}.$$

Andererseits ist

$$\Delta u(x,t) = \cos(\omega t)^{-n/2}\Big\{(\Delta\exp(\ldots))\cdot v(y,s)+2\langle\nabla\exp(\ldots),\nabla_y v(y,s)\rangle\frac{1}{\cos(\omega t)}$$

$$+\exp(\ldots)\cdot\Delta_y v(y,s)\cdot\frac{1}{\cos^2(\omega t)}\Big\}, \text{ wobei}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2\tan(\omega t)\right)=\exp(\ldots)\left(-i\frac{\omega}{2}x_j\tan(\omega t)\right)$$

$$\rightsquigarrow \nabla\exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2\tan(\omega t)\right)=\exp(\ldots)\left(-i\frac{\omega}{2}\tan(\omega t)\cdot x\right),$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}\exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2\tan(\omega t)\right)=\exp(\ldots)\left(-\frac{\omega^2}{4}x_j^2\tan^2(\omega t)-i\frac{\omega}{2}\tan(\omega t)\right)$$

$$\rightsquigarrow \Delta\exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2\tan(\omega t)\right)=\exp(\ldots)\left(-\frac{\omega^2}{4}|x|^2\tan^2(\omega t)-i\frac{n\omega}{2}\tan(\omega t)\right)$$

<u>Zsf.</u>:

$$iu_t(x,t)+\Delta u(x,t)=\cos(\omega t)^{-n/2}\exp(\ldots)\cdot\{\}, \quad \text{wobei}$$

$$\{\ \} = \left(i\frac{n}{2}\omega\tan(\omega t) + \frac{\omega^2|x|^2}{4\cos^2(\omega t)}\right)v(y,s)$$

$$+\, i\frac{\omega\sin(\omega t)}{\cos^2(\omega t)}\langle\nabla_y v(y,s), x\rangle + i\frac{\partial v}{\partial s}(y,s)\cdot\frac{1}{\cos^2(\omega t)}$$

$$\left(-\frac{\omega^2}{4}|x|^2\tan^2(\omega t) - i\frac{n\omega}{2}\tan(\omega t)\right)v(y,s)$$

$$-\, i\omega\tan(\omega t)\langle\nabla_y v(y,s), x\rangle\cdot\frac{1}{\cos(\omega t)} + \Delta_y v(y,s)\cdot\frac{1}{\cos^2(\omega t)}$$

$$= \frac{\omega^2|x|^2}{4}v(y,s) + \left(i\frac{\partial v}{\partial s}(y,s) + \Delta_y v(y,s)\right)\cdot\frac{1}{\cos^2(\omega t)}$$

so dass

$$i\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + \Delta u(x,t) = \frac{\omega^2|x|^2}{4}u(x,t) + \cos(\omega t)^{-\frac{n}{2}-2}\cdot\exp(\ldots)\cdot\left(i\frac{\partial v}{\partial s}(y,s) + \Delta_y v(y,s)\right),$$

wie behauptet.

Folgerung: Sei $\lambda\in\mathbb{C}$. Genau dann ist $u = T_\omega v$ eine Lösung von

$$(1)\quad \left(i\frac{\partial}{\partial t} + \Delta\right)u(x,t) = \frac{\omega^2|x|^2}{4}u(x,t) + \lambda|u(x,t)|^{\frac{4}{n}}u(x,t),\quad u(0)=v_0,$$

wenn v das Problem

$$(2)\quad \left(i\frac{\partial}{\partial t} + \Delta\right)v(x,t) = \lambda|v(x,t)|^{\frac{4}{n}}v(x,t),\qquad v(0)=v_0$$

löst.

Bew.: (2) $\Rightarrow$ (1). Sei $(i\frac{\partial}{\partial t}+\Delta)v = \lambda|v|^{\frac{4}{n}}v$, $v(0)=v_0$ und $u = T_\omega v$. Dann ist $u(x,0) = v(x,0) = v_0(x)$ und nach

Lemma 1

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\Delta\right)u(x,t) = \frac{\omega^2|x|^2}{4}u(x,t) + N(u) \quad \text{mit}$$

Dgl. eingesetzt!

$$N(u) = \cos(\omega t)^{-\frac{n}{2}-2}\exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2\tan(\omega t)\right)\cdot\lambda|v(y,s)|^{\frac{4}{n}}v(y,s)$$

$$= \cos(\omega t)^{-2}\lambda|v(y,s)|^{\frac{4}{n}}\cdot u(x,t) \underset{\uparrow}{=} \lambda|u(x,t)|^{\frac{4}{n}}u(x,t).$$

$$\cos^{-2}|v|^{\frac{4}{n}} = |\cos^{-\frac{n}{2}}v|^{\frac{4}{n}}$$

Umgekehrt sei $\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\Delta\right)u = \lambda|u|^{\frac{4}{n}}\cdot u + \frac{\omega^2|x|^2}{4}u$, $u(0)=v_0$ und $u=T_\omega v$.

Dann ist auch $v(0)=v_0$ und (Lemma 1!)

$$\lambda|u|^{\frac{4}{n}}u = \cos(\omega t)^{-n/2-2}\exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2\tan(\omega t)\right)\cdot\left(i\frac{\partial}{\partial s}+\Delta_y\right)v(y,s)$$

$$\Rightarrow \left(i\frac{\partial}{\partial s}+\Delta_y\right)v(y,s) = \lambda|\cos^{\frac{n}{2}}(\omega t)\,u|^{\frac{4}{n}}\cdot\cos^{\frac{n}{2}}(\omega t)\exp(+i\dots)\,u(x,t)$$

$$= \lambda|v(y,s)|^{\frac{4}{n}}v(y,s).$$

$\square$

Jetzt wieder umbenennen $(y,s)\to(x,t)$.

Bem.: Herausgefunden haben diesen Zusammenhang

- U. Niederer, 1974, für $\lambda=0$;
- R.K. Bullough et al., 2000, für $\lambda\neq 0$.

Aufg. Es sei $v\in C^{2,1}(\mathbb{R}\times(-T,T))$ eine Lösung von

$$i\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \lambda\cdot\left(\frac{\partial|v|^2}{\partial x}\right)\cdot v, \qquad v(0)=v_0$$

und $u=T_\omega v$. Zeigen Sie, dass u das Problem

$$i\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\omega^2x^2}{4} + \lambda\left(\frac{\partial|u|^2}{\partial x}\right)\cdot u, \qquad u(0)=v_0$$

löst.

Kehren wir zurück zu den homogenen linearen Gleichungen:

Es seien $v_0 \in S(\mathbb{R}^n)$,

$$v(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i t}^{\,n}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} v_0(y)\,dy$$

die Lösung von $i\frac{\partial v}{\partial t} + \Delta v = 0$, $v(0) = v_0$ und $u = T_\omega v$.

Dann ist

$$u(x,t) = \cos(\omega t)^{-n/2} \exp\left(-i\frac{\omega}{4}|x|^2 \tan(\omega t)\right) \cdot \ldots$$

$$\ldots \frac{1}{\sqrt{4\pi i \frac{\tan(\omega t)}{\omega}}^{\,n}} \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left(i\frac{\omega}{4}\frac{\left|\frac{x}{\cos(\omega t)} - y\right|^2}{\tan(\omega t)}\right) v_0(y)\,dy$$

$$= \frac{\omega^{n/2}}{\sqrt{4\pi i \sin(\omega t)}^{\,n}} \cdot \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left(i\frac{\omega}{4}\ldots\right) v_0(y)\,dy \qquad \text{mit}$$

$$\ldots = \cot(\omega t)\left(\frac{|x|^2}{\cos^2(\omega t)} - \frac{2\langle x,y\rangle}{\cos(\omega t)} + |y|^2\right) - |x|^2\tan(\omega t)$$

$$= \cot(\omega t)(|x|^2 + |y|^2) - \frac{2\langle x,y\rangle}{\sin(\omega t)}.$$

Insgesamt ergibt sich also

$$u(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} K(x,y;t)\, v_0(y)\,dy$$

mit dem Integralkern

$$K(x,y;t) := \frac{\omega^{n/2}}{\sqrt{4\pi i \sin(\omega t)}^{\,n}} \exp\left(i\frac{\omega}{4}\left(\cot(\omega t)(|x|^2+|y|^2) - \frac{2\langle x,y\rangle}{\sin(\omega t)}\right)\right)$$

Damit haben wir den folgenden Existenz- und Eindeutigkeitssatz für das Cauchy-Problem zur Hartree-Schrödinger-Gleichung gezeigt:

Satz 4: Zu $\psi_0 \in S(\mathbb{R}^n)$ existiert genau eine Lösung $\psi \in C^1(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ des Cauchy-Problems

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} + \Delta \psi = \frac{\omega^2 |x|^2}{4}\psi, \qquad \psi(0) = \psi_0 .$$

Diese ist periodisch in t mit Periodenlänge $\frac{2\pi}{\omega}$, liegt in $C^\infty(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ und ist gegeben durch

$$\psi(x,t) = \begin{cases} \psi_0(x) & \text{für } t \in \{\frac{2\pi k}{\omega} : k \in \mathbb{Z}\} \\ \int_{\mathbb{R}^n} K(x,y;t)\psi_0(y)\,dy & \text{sonst.} \end{cases}$$

(Hierbei ist $K(x,y;t)$ der Integralkern von S. (33) unten.)

Bem.: Die Regularität in $t \in \{\frac{2\pi k}{\omega} : k \in \mathbb{Z}\}$ liest man ab aus

$$\psi(x,t) = \cos(\omega t)^{-n/2} \exp(-i\tfrac{\omega}{4}|x|^2 \tan(\omega t))\, v\left(\frac{x}{\cos(\omega t)}, \frac{\tan(\omega t)}{\omega}\right)$$

mit der Lösung $v \in C^\infty(\mathbb{R}, S(\mathbb{R}^n))$ von (SG_0) mit $v(0) = \psi_0$.

Schließlich können wir auch die inverse Transformation T_ω^{-1} verwenden, um aus Kenntnissen über die Hermite-Schrödinger-Gleichung Informationen über die freie Gleichung zu gewinnen. Wie bereits festgestellt, ist

$$\psi_{\vec{k}}(x,t) := e^{-i(2|\vec{k}|+n)t} H_{\vec{k}}(x)$$

die Lösung von $(SG_{|x|^2})$ mit $\psi(0) = H_{\vec{k}}$ (Hermite-Funktion zum Multiindex $\vec{k} \in \mathbb{N}_0^n$). Wählt man $\omega = 2$ (so dass $\frac{\omega^2}{4} = 1$) und berechnet $T_2^{-1}\psi_{\vec{k}}$ gemäß der Bemerkung auf S. (29) (Mitte), so erhält man:

Prop. 3: Die Lösung von (SG_0) zum Anfangswert $\Psi(0) = H_{\vec{k}}$ ist gegeben durch

$$\Psi(x,t) = (1+4t^2)^{-\frac{n}{4}} \exp\left(i\left(\frac{t\,|x|^2}{1+4t^2} - (2|\vec{k}|+n)\frac{\arctan(2t)}{2}\right)\right) H_{\vec{k}}\left(\frac{x}{\sqrt{1+4t^2}}\right).$$

Dieses Ergebnis aus der Darstellungsformel in Satz 1 zu gewinnen, ist sicherlich möglich, aber vermutlich sehr aufwändig.