## 3.3 Die Schrödinger-Gleichung in $L^2(\Omega,\mathbb{C})$

### 3.3.1 Die "freie" Schrödinger-Gleichung ($iu_t = \Delta u$)

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

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

mit Definitionsbereich $D_\Delta := \{u \in H_0^1(\Omega) : \Delta u \in L^2(\Omega)\}$ selbstadjungiert (und $\leq 0$) ist. Hieraus folgt, dass $\pm i\Delta$ mit demselben Def.-Bereich schief-selbstadjungiert sind. Mit dem Satz von Stone erhalten wir:

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

Das Cauchy-Problem

$$iu_t = \Delta u \quad , \qquad u(t=0) = u_0 \in D_\Delta \qquad \text{(CP)}$$

für die Schrödinger-Gleichung ist im klassischen Sinn wohlgestellt.

Bem. 1 (1) <u>Unitäre</u> Gruppe bedeutet u.a.: $U(t)^* = U(-t) = U(t)^{-1}$ bzw. $\langle U(t)x, U(t)y\rangle = \langle x,y\rangle \ \forall x,y \in H$, insbesondere sind alle Operatoren $U(t) : H \to H$ isometrisch. Da die Lösung von (CP) gegeben ist durch

$$u(t) = U(t)u_0 \qquad \text{mit} \qquad \frac{du}{dt}(t) = -i\Delta U(t)u_0 ,$$

haben wir $\|u(t)\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$, $\|\Delta u(t)\|_{L^2} = \|\Delta u_0\|_{L^2}$,

und ggf. auch $\| \Delta^k u(t) \|_{L^2} = \| \Delta^k u_0 \|_{L^2}$, sofern $u_0 \in D_{\Delta^k}$.
Einen time decay der $L^2$-Norm, allgemeiner der $H^{2k}$-Norm mit $k \in \mathbb{N}_0$, wie wir ihn bei der Wärmeleitungsgleichung festgestellt haben, kann es bei der Schrödinger-Gleichung also nicht geben.

(2) Aufgrund der Gruppenstruktur (statt HALBgruppenstr.) kann es auch keinen Regularisierungseffekt der Form

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

geben, denn dann wäre $u_0 = U(t) \underbrace{U(-t) u_0}_{\in H} \in D_A$, was für $A = -i\Delta$ nun einmal falsch ist.

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

$$\| u(t) \|_\infty \lesssim |t|^{-n/2} \| u_0 \|_{L^1},$$

die hier aus der expliziten Darstellung der Lösung als Faltungsintegral

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

folgt, deren exakter Beweis nicht trivial ist ($\rightarrow$ Vorl. dispersive).
Für beschränkte Gebiete $\Omega$ hat man

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

so dass in diesem Fall ein $L^\infty$-decay für freie Lösungen ebenfalls ausgeschlossen ist.

(4) Schwache Regularisierungseffekte in gemischten $L^p(\mathbb{R}^{n+1})$-Normen sind bekannt, z.B. hat man in einer Raumdimension ($n=1$)

$$\| |D_x|^{\frac{1}{2}} u \|_{L^\infty_x L^2_t} \lesssim \|u_0\|_{L^2_x} \qquad \left( \begin{array}{l} |D_x|^{\frac{1}{2}} = \mathcal{F}^{-1}|\xi|^{\frac{1}{2}}\mathcal{F}, \text{ also} \\ \text{eine „halbe" Ableitung.} \end{array} \right)$$

Auf beschränkten Gebieten sind diese Glättungen nicht möglich.

### 3.3.2 Die Schrödinger-Gleichung mit Potential

$$i u_t = \Delta u - V(x) \cdot u \qquad \text{mit } V: \mathbb{R} \to \mathbb{R},$$

so dass der Operator $\Delta - V$ mit jedem $C_c^\infty(\Omega)$ umfassenden Definitionsbereich offenbar symmetrisch und dicht definiert ist. Die Frage nach der Wohlgestelltheit des Cauchy-Problems

$$i u_t = \hat{H} u, \quad u(t=0) = u_0 \in D_{\hat{H}}$$

mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = \cancel{i}(\Delta - V)$ läuft darauf hinaus, zu klären, ob ein solcher Operator $\hat{H}$ selbstadjungiert ist. Nach den Axiomen der QM ist dies stets der Fall, wenn $\hat{H}$ ~~eines~~ reale physikalische Situation beschreibt. Hingegen ist

$$A = \Delta - V : L^2(\Omega) \supset D_A \to L^2(\Omega) \quad \text{mit } C_c^\infty(\Omega) \subset D_A$$

nicht für alle Potentiale $V : \Omega \to \mathbb{R}$ wesentlich selbstadjungiert (d.h. $\overline{A} = A^*$). Das liegt häufig an Randbedingungen, es gibt aber auch Gegenbeispiele für $\Omega = \mathbb{R}^n$. (Hiermit muß ich eine frühere Behauptung, dass $A = \Delta - V$ auf $\mathbb{R}^n$ mit $D_A = \{u \in H^2(\mathbb{R}^n) : Vu \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$ stets selbstadjungiert sei, korrigieren!)

Bsp. ($\Omega = \mathbb{R}$, also $n=1$) Der Operator

$$A : L^2(\mathbb{R}) \supset D_A := C_c^\infty(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R}), \quad Au(x) = u''(x) + x^4 u(x)$$

ist nicht wesentlich selbstadjungiert.

Zur Begründung benötigen wir die folgende

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

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

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

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

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

Forts. der Bem.: Die einfache Ungleichung $(*)$ liefert den Einstieg in den Bew. des Kriteriums, dass für jeden selbstadjungierten Operator $A$ gilt, dass $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ ist. (Habe ich unbewiesen angegeben, die Argumente sind an anderer Stelle aber genannt.)

Begründung des Bsps.: Man setzt

$p_\alpha(x) := \sqrt{x^4 + i\alpha}$ $\quad (\alpha \in \mathbb{R}, \sqrt{\ } = \text{Hauptzweig der komplexen } \sqrt{\ })$

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

Mit $\quad p_\alpha(t) = t^2 \sqrt{1 + \frac{i\alpha}{t^4}}$ haben wir $|\mathrm{Im}\, p_\alpha(t)| \leq \frac{\alpha}{t^2}$,

woraus $\quad \left|\exp\left(i \int_0^x p_\alpha(t)\,dt\right)\right| \leq C_\alpha$ folgt. Damit

ist $|u_\alpha(x)|^2 \leq \dfrac{C_\alpha^2}{x^2 + |\alpha|}$, und also $u_\alpha \in L^2(\mathbb{R})$.

Nun ergibt eine etwas längere Rechnung, dass

$$u_\alpha''(x) = u_\alpha(x) \cdot \left(m_\alpha(x) - (x^4 + i\alpha)\right)$$

bzw. $\quad \Bigl(\underbrace{\Bigl(-\frac{d^2}{dx^2} - x^4\Bigr)}_{A} - i\alpha I\Bigr) u_\alpha = m_\alpha(x)\, u_\alpha$

mit $\quad m_\alpha(x) \underset{?}{=} 5 \dfrac{x^6}{(x^4 + i\alpha)^2} - 3 \dfrac{x^2}{(x^4 + i\alpha)}$, wobei

$m_\alpha \in L^\infty(\mathbb{R})$, $\quad \|m_\alpha\|_\infty \leq C$ mit einer von $\alpha$ unabhängigen Konstante, sofern man nur $|\alpha| \geq 1$ betrachtet.

Dann haben wir also einerseits für $|\alpha| \geq 1$

Rechnung zeigt: $u_\alpha \in D_{A^*}$! (s.u.) part. Int.

$$\|(A^* - i\alpha I) u_\alpha\| = \|m_\alpha u_\alpha\| \leq C \|u_\alpha\|$$

Andererseits: $u_\alpha \in D_{A^*} = \{ u \in L^2 : \exists f \in L^2 : \langle (A - i\alpha I) u, v \rangle$

$= \langle f, (A - i\alpha I) v \rangle \quad \forall v \in C_c^\infty(\mathbb{R}) \}$

Nehmen wir $\overline{A} = A^*$, also die wesentliche Selbstadjungiertheit an, so ist $A^*$ ebenfalls symmetrisch und es müßte nach der Vorbem. gelten

$$\|(\bar{A}-i\alpha)u_\alpha\| = \|(A^*-i\alpha)u_\alpha\| \geq |\alpha|\,\|u_\alpha\|,$$

was einen Widerspruch darstellt.

Bem. (1) Weder $x^4 \cdot u_\alpha$ noch $u_\alpha''$ liegen in $L^2(\mathbb{R})$!

(2) Durch das Bsp. wird nicht ausgeschlossen, dass der Operator $\frac{d^2}{dx^2} + x^4 : L^2(\mathbb{R}) \supset C_c^\infty(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ eine selbstadjungierte Erweiterung besitzt.

Nun soll aber ein positives Ergebnis für unsere Hamilton-Operatoren vom Typ $\Delta - V$ folgen. Dazu zeigen wir den

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

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

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

<u>Bem.</u> (1) Der Satz gilt insbesondere auch für den Fall, dass $B$ stetig und selbstadjungiert ist. (In diesem Fall kann man $\delta = 0$ wählen.)

(2) Ein Operator $B$ wie im obigen Satz wird häufig als <u>Kato-Störung</u> bezeichnet.

Bew.: (1) Reduktion: Wir wollen zeigen, dass für $\delta \in \mathbb{R}$ mit $|\delta|$ hinreichend groß gilt: $i\delta \in \varrho(A+B)$, d.h.

$$A+B-i\delta I : D(A) \longrightarrow H$$

ist bijektiv mit stetiger Inverser. Skizze:

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

Da $(A-i\delta)^{-1} : H \to D_A$ bijektiv und stetig ist (denn $i\delta \in \varrho(A)$), reicht es zu zeigen, dass

$$(A+B-i\delta)(A-i\delta)^{-1} = I + B(A-i\delta)^{-1} : H \to H$$

ein Isomorphismus ist. Nach dem Satz über die Neumannsche Reihe ist dafür wiederum hinreichend:

(2) Beh.: $B(A-i\delta)^{-1} \in L(H)$ und $\| B(A-i\delta I)^{-1} \| < 1$, sofern $|\delta|$ hinreichend groß ist. Nun gilt n.V. für $y \in H$: $\| B(A-i\delta I)^{-1} y \| \le \delta \, \| A(A-i\delta)^{-1} y \| + C \, \| (A-i\delta)^{-1} y \|$

Nun gilt für $x \in D_A$:

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

angewendet mit $x = (A-i\delta)^{-1} y$ ergibt sich für den ersten Beitrag: $\| A(A-i\delta)^{-1} y \| \le \| y \|$.

Andererseits gilt auch $\| x \| \le \frac{1}{|\delta|} \cdot \| (A-i\delta)x \|$ und daher für den 2. Term $\| \underbrace{(A-i\delta)^{-1} y}_{= x \text{ wie vorher}} \| \le \frac{1}{|\delta|} \| y \|$.

$\underline{\text{Bzf.}}$: $\quad \| B(A-is)^{-1}y\| \leq (\delta + \frac{c}{|s|})\|y\|,$

und wenn wir $|s|$ ausreichend groß wählen, können wir $\delta + \frac{c}{|s|} < 1$ und damit $\| B(A-is)^{-1}\| < 1$ erreichen. $\square$

Um den Störungssatz auf einen Hamilton-Operator der Form $\hat{H} = \Delta - V$ anwenden zu können, benötigen wir zwei zusätzliche Voraussetzungen:

(1) $D_\Delta = \{ u \in H_0^1(\Omega) : \Delta u \in L^2(\Omega)\} \overset{(!)}{=} H^2(\Omega)$

(Ableitungen 1. Ordnung und gemischte Ableitungen 2. Ordnung sind kontrollierbar durch die $L^2$-Normen von $u$ und von $\Delta u$.) Dies ist z.B. der Fall für $\Omega = \mathbb{R}^4$, $\Omega = \mathbb{R}^4_+$ (Halbraum) oder $\Omega$ ein beschränktes Gebiet mit $C^2$-Rand $\partial\Omega$.

(2) Die Gültigkeit der Sobolev-Einbettung $H^2(\Omega) \subset L^r(\Omega)$ für $2 - \frac{4}{2} > -\frac{4}{r}$. Einbettung meint hier nicht nur die Mengeninklusion, sondern einen stetigen Einbettungsoperator und damit eine Abschätzung

$$\|u\|_{L^r(\Omega)} \leq C \|u\|_{H^2(\Omega)} \left(= \|u\|_{W^{2,2}(\Omega)}\right).$$

Allgemein gilt der Sobolevsche Einbettungssatz $W^{k,p}(\Omega) \subset L^r(\Omega)$ für beschränkte Gebiete mit $C^k$-Rand unter der Voraussetzung $k - \frac{4}{p} \geq -\frac{4}{r}$ (falls $r < \infty$) und $k - \frac{4}{p} > 0$ (für $r = \infty$), ebenso für $\Omega = \mathbb{R}^4$.

Lemma 1: Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein Gebiet, das den Voraussetzungen (1) und (2) genügt. Für ein $p > \frac{n}{2}$ ($p \geq 2$ im Fall $n \leq 3$) sei $V \in L^p(\Omega)$. Dann ist

$$\Delta - V : L^2(\Omega) \supset H^2(\Omega) \longrightarrow L^2(\Omega)$$

selbstadjungiert.

Zum Bew. genügt es zu zeigen, dass der Multiplikator

$$V : H^2(\Omega) \to L^2(\Omega),\ u \mapsto Vu,\ \text{def. durch } Vu(x) = V(x)u(x)$$

eine Kato-Störung von $\Delta : H^2(\Omega) \to L^2(\Omega)$ ist.

Also schätzen wir ab:

$$\|Vu\|_{L^2} \leq \|V\|_{L^p} \|u\|_{L^q} \quad , \quad \frac{1}{2} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q} \quad \text{(Hölder)}$$

und weiter, für ein geeignetes $\theta \in [0,1]$

$$\|u\|_{L^q} \leq \|u\|_{L^r}^{1-\theta} \|u\|_{L^2}^{\theta} \qquad \frac{1}{q} = \frac{1-\theta}{r} + \frac{\theta}{2} \quad \left(\begin{matrix}\text{Lyapunov}\\ \text{bzw. Hölder}\end{matrix}\right)$$

$$= \left(\varepsilon \|u\|_{L^r}\right)^{1-\theta} \cdot \left(\varepsilon^{1-\frac{1}{\theta}} \|u\|_{L^2}\right)^{\theta}$$

$$\leq (1-\theta) \cdot \varepsilon \|u\|_{L^r} + \theta \cdot \varepsilon^{1-\frac{1}{\theta}} \|u\|_{L^2},$$

wobei im letzten Schritt die Young'sche Ungleichung

$$ab \leq \frac{a^\gamma}{\gamma} + \frac{b^{\gamma'}}{\gamma'} \quad \text{mit } \gamma = \frac{1}{1-\theta} \text{ und } \gamma' = \frac{1}{\theta}$$

verwendet wurde. Benutzen wir noch

$$\|u\|_{L^r} \leq C_{SOB} \|u\|_{H^2} \ ; \quad 2 - \frac{n}{2} > -\frac{n}{r} \qquad \text{(Sob. ES)}$$

$$\text{bzw. } \frac{2}{n} > \frac{1}{2} - \frac{1}{r}$$

haben wir insgesamt:

$$\|Vu\|_{L^2} \leq (1-\theta)\cdot\varepsilon \|V\|_p C_{SoB} \|u\|_{H^2} + \theta\,\varepsilon^{1-\frac{1}{\theta}} \|u\|_{L^2}\cdot\|V\|_p$$

$$\leq \delta \|u\|_{H^2} + C\|u\|_{L^2}$$

mit $\delta = (1-\theta)\cdot\varepsilon\|V\|_p C_{SoB}$, $C = \theta\,\varepsilon^{1-\frac{1}{\theta}}\|V\|_p$,

wobei durch Wahl von $\varepsilon > 0$ erreicht werden kann, dass $\delta < 1$ wird. Jetzt müssen wir uns noch vergewissern, dass die oben getroffenen Wahlen von $q, r, \theta$ möglich sind:

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{p} \overset{\text{ok, } p\geq 2}{=} \frac{1}{q} = \frac{1-\theta}{r} + \frac{\theta}{2}$$

nur für $q < \infty$ nötig, sonst $p = 2$, $n \leq 3$ und Einbettung $H^2 \subset L^\infty$.

$$= \frac{1}{2} + (1-\theta)\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{2}\right)$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{1}{p} = (1-\theta)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{r}\right),$$

und an dieser Stelle erfordert die SoB.-ES

$$\frac{2}{n} > \frac{1}{2} - \frac{1}{r} = \frac{1}{p(1-\theta)},$$

was durch Wahl von $\theta$ nahe genug bei Null erreicht werden kann, da $p > \frac{n}{2}$ vorausgesetzt ist. $\square$

Bsp.: Coulomb-Potential in 3 Raumdimensionen. (Tritt auf bei der quantenmechanischen Beschreibung des Wasserstoff-Atoms. Hier hat man ein Proton im Nullpunkt und ein Elektron am Ort $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$. Die Anziehungskraft des Protons auf das Elektron ist in der Betrachtung der klassischen Mechanik gegeben durch

$$F(x) = -C \frac{x}{|x|^3} = -\nabla V(x)$$

mit dem Coulomb-Potential) $V(x) = \frac{\tilde{C}}{|x|}$, $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$

Wir schreiben $V(x) = V_1(x) + V_2(x)$ mit $V_1(x) = V(x)\chi_{B_1(0)}$.

Dann ist $V_2 \in L^\infty(\Omega)$ und $\int_\Omega |V_1(x)|^2 dx = \int_{B_1(0)} \frac{\tilde{C}^2}{|x|^2} dx$

$= \tilde{C}^2 \cdot 4\pi \cdot \int_0^1 \frac{1}{r^2} r^2 dr = \tilde{C}^2 \cdot 4\pi < \infty$, also $V_1 \in L^2$.

von der Jacobi-Determinante

Sowohl $V_1$ als auch $V_2$ sind Kato-Störungen des Laplaceoperators und damit $\Delta - V$ selbstadjungiert.

(übertragbar auf Mehrteilchensysteme, VZ-unabhängig, weitgehend u.a. von $\Omega$.)

Bem.: Es gibt eine Reihe von Untersuchungen darüber, wann für ein Potential bzw. einen Multiplikator $V: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ der Hamilton-Operator $\hat{H} = \Delta - V$ mit Def.-Bereich $D_{\hat{H}} = C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ noch wesentlich selbstadjungiert ist.

Ref.: M. Reed, B. Simon: Methods of modern mathematical physics, Vol. II, Sec. X.2 - X.4. Dort ist u.a. zu finden: $\hat{H} = \Delta - V : L^2(\mathbb{R}^n) \supset C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \to L^2(\mathbb{R}^n)$ ist wesentlich selbstadjungiert, wenn

(1) $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$ und $V(x) \geq 0$, oder wenn

(2) $V = V_1 + V_2$ mit $V_1$ wie in (1) und $V_2$ so, dass der zugehörige Multiplikator eine Kato-Störung von $\Delta$ ist.

(a. a. O.: Thm. X.28 und X.29)

Also: $V: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $V(x) = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k x^{2k}$ mit $\lambda_k \geq 0$ ist zugelassen, dazu zählt das Oszillator-Potential $V(x) = x^2$ und auch $V(x) = x^4$, im Ggs. zu $V(x) = -x^4$, wie wir oben im Bsp. gesehen haben. Auch das Oszillator-Potential im mehrdimensionalen, also $V(x) = |x|^2$ für $x \in \mathbb{R}^n$ führt auf einen selbstadjungierten Hamiltonoperator $\hat{H} = \Delta - V$.

## 3.3.3 Der Spektralsatz für unbeschränkte selbstadjungierte Operatoren

In Problem 7 auf Blatt 8 haben wir einen Operator

$$A : H \supset D_A \to H, \quad x \mapsto Ax = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \langle x, e_n\rangle e_n \qquad (*)$$

auf einem separablen Hilbertraum $H$ mit Def.-Bereich

$$D_A := \{ x \in H : \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \langle x, e_n\rangle e_n \text{ konvergiert in } H \}$$

$$= \{ x \in H : \sum_{n\in\mathbb{N}} |\lambda_n \langle x, e_n\rangle|^2 \}$$

diskutiert, wobei $(e_n)_n$ eine ONB von $H$ und $(\lambda_n)_n$ eine zunächst beliebige Folge komplexer Zahlen sind.

Wir haben gesehen

- Gibt es ein $M \in \mathbb{R}$, so dass $\operatorname{Re} \lambda_n \leq M \ \forall n \in \mathbb{N}$, so erzeugt $A$ eine $C^0$-Halbgruppe $(T_A(t))_{t\geq 0}$ und zwar $T_A(t)x = \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{t\lambda_n} \langle x, e_n\rangle e_n$.

- Sind alle $\lambda_n \in \mathbb{R}$, so erzeugt $iA$ eine unitäre Gruppe $(U_A(t))_{t\in\mathbb{R}}$ mit

$$U_A(t)x = \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{it\lambda_n} \langle x, e_n\rangle e_n .$$

Fragen, die sich anschließen:

(1) Ist das eine allgemeine Klasse von Operatoren, die diese Gestalt hat, und gehören dazu auch relevante Differentialoperatoren?

(2) Gibt es eine Verallgemeinerung für solche Operatoren, die keine Eigenwerte haben, für die also $\sigma(A) = \sigma_c(A)$, wie etwa Multiplikationsoperatoren, die auf keiner Menge positiven Maßes konstant sind?

Für diese Diskussion sei $A$ ein selbstadjungierter Operator auf einem (separablen) Hilbertraum $H$.

Was ist aus früheren Vorlesungen bekannt?

(1) Lineare Algebra: Spektralsatz für symmetrische bzw. hermitesche Matrizen. $A=(a_{ij})_{1\le i,j\le n} = (\overline{a_{ji}})_{1\le i,j\le n}$.
Für solche Matrizen gibt es eine ONB $\{e_1,\dots,e_n\}$ von $\mathbb{K}^n$ aus Eigenvektoren von $A$ zu reellen Eigenwerten $\lambda_1,\dots,\lambda_n$, so dass

$$Ax = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \langle x, e_k\rangle e_k \qquad \forall x \in \mathbb{K}^n.$$

(2) Einführung FA: Entsprechendes gilt für kompakte Operatoren in Hilberträumen. $A \in L(H)$ heißt kompakt, wenn $A(B_1(0))$ relativ kompakt ist, d.h. wenn $\overline{A(B_1(0))} \subset H$ kompakt ist. Hierfür hat man:
Ist $A \in L(H)$ kompakt und selbstadjungiert, so existiert eine Nullfolge $(\lambda_n)_n$ in $\mathbb{R}$ und ein ONS $(e_n)_n$ von $H$, so dass

$$A = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \langle \cdot, e_n\rangle e_n$$

mit Konvergenz in der Operatornorm. (Siehe z.B.: Meise / Vogt; Einf. FA, Satz 16.2)

Vorteil solcher Darstellungen: Man kann Funktionen von Operatoren relativ leicht definieren durch

$$f(A) := \sum_{n\in\mathbb{N}} f(\lambda_n)\langle\cdot, e_n\rangle e_n, \qquad (**)$$

z.B. $f(\lambda) = e^{t\lambda}$ oder $f(\lambda) = e^{it\lambda}$ für $C^0$-Halbgruppen oder unitäre Gruppen. Oder, wenn alle Eigenwerte $\lambda_n \geq 0$ sind, kann man Wurzeln eines Operators erklären durch

$$A^\alpha := \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n^\alpha \langle\cdot, e_n\rangle e_n$$

Will man nun von den kompakten zu den stetigen oder gar den unbeschränkten linearen Operatoren übergehen, so ist i. allg. $\sigma_c(A) \not\subseteq \{0\}$, und man muss von der Reihe zu einem Integral übergehen, was sinnvollerweise mit maßtheoretischen Begriffen geschieht. Versuchen wir also die Entwicklung (*) als Integral nach einem Maß aufzufassen, so stoßen wir dabei unmittelbar auf die Schwierigkeit, dass dies ein vektorwertiges Maß sein sollte, die Funktion $f$ in (**) ist ja reell und das Zählmaß auf $\mathbb{N}$ dabei Vektor-/Operatorwertig. Die zugrundeliegende Hilbertraumstruktur erlaubt uns jedoch, dies auf ein reellwertiges Maß zu reduzieren!

Ein Operator $A: H \supset D_A \to H$ ist bereits eindeutig bestimmt durch alle Werte $\langle Ax, x\rangle \in \mathbb{R}$ (denn $A = A^*$) für $x \in D_A$. Daher reicht es, für ein beliebiges $x \in D_A$ den Ausdruck $\langle Ax, x\rangle$ als Integral zu schreiben. Versuchen wir das für $A$ wie in $(*)$, dabei seien $\lambda_n \in \mathbb{R}$

$$\langle Ax, x\rangle = \langle \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \langle x, e_n\rangle e_n, x\rangle = \sum_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n |\langle x, e_n\rangle|^2$$

$$\stackrel{!}{=} \int_{\mathbb{C}} \lambda \, dE_x(\lambda)$$

Das ist korrekt, wenn $E_x = \sum_{n\in\mathbb{N}} \delta_{\lambda_n} |\langle x, e_n\rangle|^2$ mit Dirac-Maßen $\delta_{\lambda_n}$ der Masse 1, konzentriert in den Punkten $\lambda_n$, $n \in \mathbb{N}$, also den Eigenwerten.

Die $x$-Abhängigkeit steckt in dem Faktor $|\langle x, e_n\rangle|^2 = \langle E_n x, x\rangle$, wobei $E_n$ die orthogonale Projektion auf den eindimensionalen UVR $\mathbb{K} e_n$ ist, also $E_n x = \langle x, e_n\rangle e_n$. Das Integral erstreckt sich dann praktisch nur über das Spektrum $\sigma(A)$.

Diese ~~Definition~~ Diskussion lässt (so hoffe ich) die folgende Definition sinnvoll erscheinen:

Def.: Ein Spektralmaß ist eine Abbildung

$$E : \mathcal{B}(\mathbb{C}) \longrightarrow L(H)$$

mit den folgenden Eigenschaften:

(1) $E(B)$ ist für jedes $B \in \mathcal{B}(\mathbb{C})$ eine orthogonale Projektion, es gilt $E(\phi) = 0$ und $E(\mathbb{C}) = I$.

(2) $E(B_1 \cap B_2) = E(B_1)E(B_2) \quad \forall B_{1,2} \in \mathcal{B}(\mathbb{C})$.

(3) $E(B_1 + B_2) = E(B_1) + E(B_2) \quad \forall B_{1,2} \in \mathcal{B}(\mathbb{C})$ mit $B_1 \cap B_2 = \phi$

(4) Für jedes $x \in H$ ist $E_x : B \longmapsto \langle E(B)x, x \rangle$ ein Borel-Maß auf $\mathbb{C}$.

Der zentrale Satz in diesem Zshg. ist nun der folgende Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren:

Zu jedem selbstadjungierten Operator $A$ auf einem Hilbertraum $H$ existiert genau ein Spektralmaß $E$ auf $\mathbb{C}$ mit $\operatorname{supp}(E_x) \subset \sigma(A)$, so dass

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

d.h. $\langle Ax, x \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dE_x(\lambda) \quad \forall x \in D_A$

(siehe z.B.: Meise/Vogt, Einführung FA, Satz 20.13)

Bsp. (Spektralmaß eines Multiplikators auf $H = L^2(\Omega)$):

Es sei $V \in L^2_{loc}(\Omega, \mathbb{R})$ und $M_V : L^2(\Omega) \supset \mathcal{D}_V \to L^2(\Omega)$ definiert durch $M_V f(x) := V(x) \cdot f(x)$ mit Definitionsbereich $\mathcal{D}_{M_V} := \{f \in L^2(\Omega) : M_V f \in L^2(\Omega)\}$.

Dann ist $M_V$ selbstadjungiert.

Wir definieren für $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$:

$$E(B) f(x) := \chi_{\{y \in \Omega :\, V(y) \in B\}}(x) f(x) = \chi_B(V(x)) \cdot f(x),$$

$$\text{also} \quad E(B) = M_{\chi_B \circ V},$$

und überprüfen, ob $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to L(H)$ den Eigenschaften eines Spektralmaßes genügt:

(1) $E(B)^2 = M_{\chi_B \circ V} M_{\chi_B \circ V} = M_{(\chi_B \circ V)^2} = M_{\chi_B \circ V} = E(B)$,

also ist $E(B)$ für jedes $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ ein Projektor. Ferner ist $\chi_B \circ V$ reell und also $E(B) = M_{\chi_B \circ V}$ selbstadjungiert und damit orthogonal. Offenbar ist $\chi_{\mathbb{R}} \circ V = 1$, $\chi_\emptyset \circ V = 0$ und daher $E(\mathbb{R}) = I$ sowie $E(\emptyset) = 0$.

(2) $E(B_1 \cap B_2) = M_{\chi_{B_1 \cap B_2} \circ V} = M_{(\chi_{B_1} \circ V)(\chi_{B_2} \circ V)} = M_{\chi_{B_1} \circ V} M_{\chi_{B_2} \circ V}$

$$= E(B_1) E(B_2), \text{ und}$$

$$E(B_1 + B_2) = E(B_1) + E(B_2)$$

sieht man in ähnlicher Weise ein.

13) Wg. $E(\emptyset) = 0$ ist nur noch die $\sigma$-Additivität von

$$E_f : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow [0,\infty), \; B \longmapsto E_f(B) = \int_\Omega \chi_B(V(x))\, |f(x)|^2 dx$$

für $f \in L^2(\Omega)$ zu zeigen. Dazu sei $B = \sum_{n\in\mathbb{N}} B_n$ (disjunkte Vereinigung von $B_n \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$). Dann ist

$$E_f(B) = \int_\Omega \chi_B(V(x))\, |f(x)|^2 dx = \int_\Omega \sum_{n\in\mathbb{N}} \chi_{B_n}(V(x))\, |f(x)|^2 dx,$$

denn für disjunkte $B_n$ ist $\chi_{\sum B_n} = \sum \chi_{B_n}$. Nun erlaubt der Satz von B. Levi, $\int_\Omega$ und $\sum_{n\in\mathbb{N}}$ zu vertauschen, sodass

$$\ldots = \sum_{n\in\mathbb{N}} \int_\Omega \chi_{B_n}(V(x))\, |f(x)| dx = \sum_{n\in\mathbb{N}} E_f(B_n).$$

Also liegt in der Tat ein Spektralmaß vor.

Berechnen wir $\int_\mathbb{R} t(\lambda)\, dE_f(\lambda)$ für $f \in L^2(\Omega)$ und eine Treppenfunktion $t = \sum_{k=1}^N \lambda_k \chi_{B_k}$, $B_k \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$:

$$\int_\mathbb{R} t(\lambda)\, dE_f(\lambda) = \int_\mathbb{R} \sum_{k=1}^N \lambda_k \chi_{B_k}\, dE_f(\lambda)$$

$$= \sum_{k=1}^N \lambda_k E_f(B_k) = \sum_{k=1}^N \lambda_k \int_\Omega \chi_{B_k}(V(x))\, |f(x)|^2 dx$$

$$= \int_\Omega \sum_{k=1}^N \lambda_k \chi_{B_k}(V(x))\, |f(x)|^2 dx = \int_\Omega t(V(x))\, |f(x)|^2 dx$$

Der Konstruktion des Integrals nach einem Maß folgt hieraus für eine meßbare Funktion $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$\int_\mathbb{R} \varphi(\lambda)\, dE_f(\lambda) = \int_\Omega \varphi(V(x))\, |f(x)|^2 dx,$$

sofern die Integrale für $\varphi_\pm$ endlich ausfallen.

Insbesondere haben wir für $\varphi(\lambda)=\lambda$ und $f\in D_{M_V}$:

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE_f(\lambda) = \int_{\Omega} V(x)\,|f(x)|^2 dx = \langle M_V f, f\rangle ,$$

was man wegen der Beliebigkeit von $f\in D_{M_V}$ kurz in der Form

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE(\lambda) = M_V$$

notieren kann.

Nun definiert man für einen selbstadjungierten Operator $A$ auf einem Hilbertraum $H$ und meßbare Funktionen $f:\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ den sogenannten <u>Funktionalkalkül</u> von $A$ durch

$$\langle f(A)x, x\rangle := \int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, dE_x(\lambda), \text{ d.h. } f(A) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, dE(\lambda),$$

wobei der Definitionsbereich des Operators $f(A)$ gegeben ist durch

$$D_{f(A)} := \{x\in H : \int |f(\lambda)|^2 dE_x(\lambda) < \infty\}$$

Ist $f|_{\sigma(A)}$ beschränkt, so ist $D_{f(A)} = H$ und $f(A)\in L(H)$, denn es ist $\int_{\mathbb{R}} dE_x(\lambda) = \langle x, x\rangle = \|x\|^2$.

Lediglich die Borel-Meßbarkeit von $f:\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ ist erforderlich um zu zeigen, dass $f(A)$ mit $D_{f(A)}$ wie o.g. dicht definiert ist (s. Meise/Vogt, Lemma 20.8). Weitere Eigenschaften des Funktionalkalküls sind zusammengefasst im folgenden Satz, für dessen Beweis wiederum auf Meise/Vogt, Satz 20.9 verwiesen sei.

Satz (über die Eigenschaften des Funktionalkalküls):

Es seien $A : H \supset D_A \to H$ ein selbstadjungierter Operator auf einem Hilbertraum $H$, $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to L(H)$ das Spektralmaß von $A$, und $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ Borel-meßbar.

Dann gelten:

(1) $f(A) + g(A) \subset (f+g)(A)$;

(2) $f(A)g(A) \subset (f \cdot g)(A)$, $D(f(A)g(A)) = D_{g(A)} \cap D_{f\cdot g(A)}$;

(3) $f(A)^* = \bar{f}(A)$, insbesondere ist $f(A)$ selbstadjungiert, wenn $f$ reell ist;

(4) $f(A) f(A)^* = |f|^2(A) = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 dE(\lambda) = f(A) f(A)^*$,

insbesondere gilt für alle $x \in D_{f(A)}$:

$\| f(A) x \|^2 = \langle f(A)^* f(A) x, x \rangle = \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 dE_x(\lambda)$,

(5) $f(A)$ ist ein abgeschlossener Operator.

Schauen wir uns nun an, wie man Spektralsatz und Funktionalkalkül verwenden kann, um die Aussage

„Jeder schief-selbstadjungierte Operator $iA$ auf einem Hilbertraum $H$ erzeugt eine unitäre Gruppe."

ein Satz von Stone zu beweisen:

Sei $A$ selbstadjungiert auf $H$ und $E$ das zugehörige Spektralmaß, so dass $A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dE(\lambda)$ bzw

$$\langle Ax, x \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dE_x(\lambda) \qquad \forall x \in D_A .$$

Für $t \in \mathbb{R}$ setzt man

$$U_A(t) := \int_{\sigma(A)} e^{it\lambda}\, dE(\lambda).$$

Dann ist $|e^{it\lambda}| = 1$ (denn $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$) und nach der Bemerkung im Anschluss an die Def. des Funktionalkalküls $U_A(t) \in L(H)$. Ferner gilt nach Eigenschaft (4)

$$U_A(t)U_A(t)^* = \int_{\mathbb{R}} dE(\lambda) = E(\mathbb{R}) = I = U_A(t)^* U_A(t).$$

Das bedeutet: Für jedes $t \in \mathbb{R}$ ist $U_A(t)$ ein unitärer Operator. Ebenso hat man

$$U_A(0) = \int_{\mathbb{R}} dE(\lambda) = I.$$

Um die Halbgruppeneigenschaft einzusehen, bemerken wir die Multiplikativität des Funktionalkalküls, das ist Eigenschaft (2), die Definitionsbereiche sind stets $D_{U_A(t)} = D_{U_A(s)} = D_{U_A(t)U_A(s)} = \ldots = H$:

$$U_A(t)U_A(s) \underset{(2)}{=} \int_{\sigma(A)} e^{it\lambda} e^{is\lambda}\, dE(\lambda)$$

$$= \int_{\sigma(A)} e^{i(t+s)\lambda}\, dE(\lambda) = U_A(t+s).$$

Zum Nachweis der starken Stetigkeit verwenden wir (4):

$$\|(U_A(t+h) - U_A(t))x\|^2 = \|(U_A(h) - I)x\|^2$$

$$\underset{(4)}{=} \int_{\sigma(A)} |e^{ih\lambda} - 1|^2\, dE_x(\lambda),$$ wobei $E_x$ ein nichtnegatives Borelmaß ist.

Dann ist $\lim_{h\to 0} |e^{ih\lambda} - 1|^2 = 0$ punktweise und $|e^{ih\lambda} - 1|^2 \le 4$. Da $E_x(\mathbb{R}) = \|x\|^2 < \infty$, also $E_x$ ein endliches Maß ist, ist damit eine integrierbare Majoraute gefunden, und mit dem Lebesgueschen Konvergenzsatz erhalten wir

$$\lim_{h\to 0} \| (U_A(t+h) - U_A(t))x \| = 0 \quad \forall x \in H.$$

Damit ist gezeigt, dass $(U_A(t))_{t\in\mathbb{R}}$ in der Tat eine unitäre Gruppe auf $H$ ist.

Nun betrachten wir für $x \in D_A = \{x \in H : \int_{\sigma(A)} \lambda^2 dE_x(\lambda) < \infty\}$

$$\| \tfrac{1}{t}(U_A(t) - I)x - iAx \|^2 = \| (\tfrac{1}{it}(U_A(t) - I) - A)x \|^2$$

$$\underset{(4)}{=} \int_{\sigma(A)} \left| \tfrac{1}{it}(e^{it\lambda} - 1) - \lambda \right|^2 dE_x(\lambda)$$

Nun gilt für jedes $\lambda \in \mathbb{R}$: $\lim_{t\to 0} \frac{1}{it}(e^{it\lambda} - 1) = \lambda$, der Integrand geht also punktweise gegen Null.

Schreiben wir $\frac{1}{it}(e^{it\lambda} - 1) = \int_0^\lambda e^{it\mu} d\mu$, so sehen wir, dass $\left| \frac{1}{it}(e^{it\lambda} - 1) - \lambda \right|^2 \le 4\lambda^2$ ist, und unter der Vor. $x \in D_A$ (s.o.!) ist dies eine integrierbare (bezügl. $E_x$) Majorante. Nennen wir den infinitesimalen Generator von $(U_A(t))_{t\in\mathbb{R}}$ wie üblich $B : H \supset D_B \to H$ mit $D_B := \{x \in H : \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(U_A(t) - I)x \text{ existiert}\}$, so haben wir gezeigt, dass $D_A \subset D_B$ und $B|_{D_A} = iA$.

Andrerseits ist $-iB$ symmetrisch, denn für $x, y \in D_B$ gilt $\langle -iBx, y\rangle = \lim_{t\to 0} -i \langle \frac{1}{t}(U_A(t) - I)x, y\rangle$

$$= \lim_{t\to 0} \langle x, \tfrac{i}{t}(U_A(t)^* - I)y\rangle \underset{U_A(t)\text{ unitär}}{=} \lim_{t\to 0} \langle x, \tfrac{-i}{-t}(U_A(-t) - I)y\rangle$$

$= \langle x_1, -iBy \rangle$. Damit ist aber

$$\mathcal{D}_B = \mathcal{D}_{-iB} \subset \mathcal{D}_{iB^*} = \mathcal{D}_{B^*} \subset \mathcal{D}_{A^*} = \mathcal{D}_A ,$$

letzteres, weil $A$ selbstadjungiert ist. $\square$

Bem.: Eine weitere wichtige Anwendung des Funktionalkalküls ist die Definition von Quadratwurzeln solcher selbstadjungierter Operatoren, deren Spektrum in $[0,\infty)$ enthalten ist. In diesem Fall setzt man

$$A^{1/2} = \int_{\sigma(A)} \sqrt{\lambda}\, dE(\lambda)$$

und hat $A = A^{1/2}A^{1/2}$ aufgrund der Multiplikativität (ES (2) im Satz oben). Dann kann man noch zeigen, dass die "Wurzel" aus $A$ die einzige "positive Wurzel" im Sinne von $\langle A^{1/2}x, x\rangle \geq 0$ ist.

Konkret: Für den Laplace-Operator auf $L^2(\Omega)$ mit Definitionsbereich $\mathcal{D}_\Delta = \{u \in H_0^1(\Omega) : \Delta u \in L^2(\Omega)\}$ haben wir gesehen, dass $(0,\infty)$ zur Resolventenmenge $\varrho(\Delta)$ gehört. Folglich ist $\sigma(-\Delta) \subset [0,\infty)$, ~~und~~ ~~auch~~ $\cancel{\sigma(-\Delta + m^2) \subset [0,\infty) \ (m \in \mathbb{R})}$ und wir können

$$(-\Delta + m^2)^{\frac{1}{2}} = \int_{\sigma(-\Delta)} \sqrt{\lambda + m^2}\, dE(\lambda) \qquad (m \in \mathbb{R})$$

mit Hilfe des Spektralmaßes $E$ von $(-\Delta)$ definieren. Dies ist nützlich zur Behandlung von Wellen- und Klein-Gordon-Gleichungen, vgl. Aufg. 15!

Beispiele:

(1) Der Laplace-Operator auf $L^2(\mathbb{T}^n)$ bzw. die freie Schrödinger-Gleichung mit periodischer Randbedingung

Mit $C = [-\pi, \pi]^n$ können wir $L^2(\mathbb{T}^n)$ auffassen als

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

mit $\|u\|^2 := \langle u, u\rangle$ und $\langle u, v\rangle := (2\pi)^{-n} \int_C u(x)\overline{v(x)}\,dx$.

Bekannt ist aus der Theorie der Fourierreihen, dass $(e_k)_{k\in\mathbb{Z}^n}$ mit $e_k(x) := e^{ikx}$, $kx = \sum_{j=1}^n k_j x_j$, eine ONB von $L^2(\mathbb{T}^n)$ ist, d.h. wir haben für $u \in L^2(\mathbb{T}^n)$ mit Konvergenz in der oben definierten Norm

$$u = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \langle u, e_k\rangle e_k =: \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \underbrace{\hat{u}(k)}_{k\text{-ter Fourierkoeffizient von } u} e_k$$

Für $u \in C^2(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{T}^n)$ ist dann

$$\widehat{\Delta u}(k) = -|k|^2 \hat{u}(k) \qquad \text{(einfache Rechnung!)}$$

und daher

$$-\Delta u = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} |k|^2 \hat{u}(k) e_k .$$

Bilden wir den Abschluss, so gelangen wir zu dem selbstadjungierten Operator $-\Delta : L^2(\mathbb{T}^n) \supset D_\Delta \longrightarrow L^2(\mathbb{T}^n)$ mit

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

Für $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ und $u \in L^2(\mathbb{T}^n)$ definieren wir

$$E(B)u := \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \chi_B(|k|^2)\, \hat{u}(k) e_k .$$

Dann lässt sich ganz ähnlich wie bei einem Multiplikationsoperator überprüfen, dass $E: \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow L(L^2(\mathbb{T}^n))$ ein Spektralmaß ist, z. B. haben wir

$$E(B_1)E(B_2)u = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \chi_{B_1}(|k|^2)\, \widehat{E(B_2)u}(k)\, e_k$$

$$= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^n} \chi_{B_1}(|k|^2)\chi_{B_2}(|l|^2) \underbrace{\langle \hat{u}(l) e_l, e_k \rangle}_{= \hat{u}(l)\delta_{l,k}} e_k$$

$$= \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \underbrace{\chi_{B_1}(|k|^2)\chi_{B_2}(|k|^2)}_{= \chi_{B_1 \cap B_2}(|k|^2)} \hat{u}(k) e_k = E(B_1 \cap B_2)u$$

und für $B_1 = B_2$ ist hiermit auch bereits festgestellt, dass $E(B)$ ein Projektor ist.

Nun integrieren wir eine Treppenfunktion $t = \sum_{\nu=1}^{N} \lambda_\nu \chi_{B_\nu}$ nach dem Maß $E_u$, wobei $u \in H = L^2(\mathbb{T}^n)$ ist:

$$\int_{\mathbb{R}} t(\lambda)\, dE_u(\lambda) = \sum_{\nu=1}^{N} \lambda_\nu\, E_u(B_\nu)$$

$$= \sum_{\nu=1}^{N} \lambda_\nu \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \chi_{B_\nu}(|k|^2)\, |\hat{u}(k)|^2$$

$$= \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \left( \sum_{\nu=1}^{N} \lambda_\nu \chi_{B_\nu}(|k|^2) \right) |\hat{u}(k)|^2 = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} t(|k|^2)\, |\hat{u}(k)|^2$$

und dass gilt auch für meßbare, komplexwertige Funktionen $f$, sofern alle (vier) Reihen unabhängig voneinander konvergieren. Speziell für $f(\lambda) = \lambda$ folgt

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE_u(\lambda) = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} |k|^2 \hat{u}(k) \langle e_k, u\rangle = \langle -\Delta u, u\rangle$$

bzw. $\int_{\mathbb{R}} \lambda \, dE(\lambda)\, u = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} |k|^2 \hat{u}(k) e_k = -\Delta u.$

Für die von $-i\Delta$ erzeugte unitäre Gruppe erhalten wir:

$$U_{-\Delta}(t)\, u_0 = \int_{\mathbb{R}} e^{it\lambda} \, dE(\lambda)\, u_0 = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} e^{it|k|^2} \hat{u}_0(k) e_k ,$$

und damit ist die Lösung von $\frac{du}{dt} = -i\Delta u$, $u(0) = u_0 \in H^2(\mathbb{T}^n)$ mit periodischer Randbedingung gegeben.

Da alle Beiträge zu diesen Darstellungen vom Spektrum von $-\Delta$ kommen, können wir hieraus ablesen:

$\sigma(-\Delta) = \{ |k|^2 : k \in \mathbb{Z}^n \}$, besteht nur aus Eigenwerten endlicher Vielfachheit, besitzt keinen Häufungspunkt. (Es gibt also nur eine diskrete Eigenwertfolge.) Ein solches Spektrum nennt man ein reines Punktspektrum. ($\longrightarrow$ Situation wie in Problem 7 auf flatt 8)

(2) Laplace-Operator auf $L^2(\mathbb{R}^n)$ bzw. freie Schrödingergleichung. Hier ist

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

letzterer mit Skp. $\langle u, v\rangle_{H^2} = \int_{\mathbb{R}^n} (1+|\xi|^2)^2 \, \hat{u}(\xi) \overline{\hat{v}(\xi)} \, d\xi$

$\hat{u}(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} u(x)\, dx$ (Fouriertransformierte),

sofern $u \in L^1(\mathbb{R}^n)$

Liest man in Bsp. (1) die Abbildung

$$(\hat{u}(k))_{k\in\mathbb{Z}^n} \longmapsto \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \hat{u}(k)e_k \quad (=u)$$

als inverse Fouriertransformation und ersetzt diese durch

$$\mathcal{F}^{-1}\hat{u}(x) = (2\pi)^{-n/2}\int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\xi}\,\hat{u}(\xi)\,d\xi \quad (=u(x))$$

so lassen sich alle Argumente aus Bsp (1) Schritt für Schritt übertragen. Das Spektralmaß von $-\Delta$ ist für $B\in\mathcal{B}(\mathbb{R})$ und $u\in L^2(\mathbb{R}^n)$ gegeben durch

$$E(B)u = \mathcal{F}^{-1}\chi_B(|\xi|^2)\,\hat{u}$$

und durch Integration danach erhalten wir

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda\, dE(\lambda)u = \mathcal{F}^{-1}|\xi|^2\,\hat{u}$$

bzw. für die erzeugte unitäre Gruppe

$$U_A(t)u = \int_{\mathbb{R}} e^{it\lambda}\,dE(\lambda)u = \mathcal{F}^{-1}e^{it|\xi|^2}\hat{u}.$$

In diesem Fall ist $\sigma(-\Delta) = \{|\xi|^2 : \xi\in\mathbb{R}^n\} = [0,\infty)$.
Es gibt hier überhaupt keinen Eigenwert, es ist ein reines Stetigkeitsspektrum.

(3) Hamilton-Operator bzw. Schrödingergleichung mit Oszillator-Potential $V(x)=x^2$ auf $\mathbb{R}$ / $L^2(\mathbb{R})$

Betrachten wir den Operator

$$\hat{H} : L^2(\mathbb{R}) \supset S(\mathbb{R}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R})$$

$$u \longmapsto \hat{H}u = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V\right)u, \quad V(x) = x^2$$

Unsere erste Beobachtung ist, dass für die Gauss-Funktion $g(x) = e^{-x^2/2}$ gilt

$$g'(x) = -x\,g(x) \Rightarrow g''(x) = (x^2-1)\,g(x), \quad \text{also}$$

$$\hat{H}\,g(x) = \frac{1}{2}\left(-g''(x) + x^2 g(x)\right) = \frac{1}{2}\,g(x),$$

d.h. wir $g$ ist ein Eigenvektor von $\hat{H}$ zum Eigenwert $\lambda_0 = \frac{1}{2}$ gefunden. Wir definieren die Operatoren

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

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

und stellen fest: Genau dann ist $f$ ein Eigenvektor von $N$ zum Eigenwert $\lambda$ (also $Nf = \lambda f$), wenn $\hat{H} f = (N + \frac{1}{2}I) f = (\lambda + \frac{1}{2}) f$, also wenn $f$ ein Eigenvektor von $H$ zum Eigenwert $(\lambda + \frac{1}{2})$ ist.

Nun setzt man $H_0 := \pi^{-1/4} g$ (Normierung, so dass $\|H_0\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1$) und rekursiv für $n \geq 1$:

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

Auf diese Weise erhält man die Folge der Hermite-Funktionen, $(H_n)_{n\in\mathbb{N}_0}$, von denen bekannt ist, dass sie eine ONB von $L^2(\mathbb{R})$ bilden. Nun zeigt ein relativ einfacher Induktionsbeweis, dass

$N H_n = n \cdot H_n$ (der Ind.-Anfang ist gerade unsere "erste Beobachtung")

(vgl. Ü zu "dispersive", Blatt 4 u. 5)

und damit $\hat{H} H_n = (n+\frac{1}{2}) \cdot H_n$ gilt.

Wg. der Vollständigkeit des ONS $(H_n)_{n\in\mathbb{N}_0}$ erhalten wir die Darstellung

$$\hat{H} u = \hat{H} \sum_{n\in\mathbb{N}_0} \langle u, H_n\rangle H_n = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} \langle u, H_n\rangle \hat{H} H_n = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} (n+\tfrac{1}{2}) \langle u, H_n\rangle H_n$$

und den Definitionsbereich

$$D_{\hat{H}} = \{ u \in L^2(\mathbb{R}) : \sum_{n\in\mathbb{N}_0} (n+\tfrac{1}{2})^2 |\langle u, H_n\rangle|^2 < \infty \}.$$

Wir können Funktionen des Operators definieren als

$$f(\hat{H}) u = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} f(n+\tfrac{1}{2}) \langle u, H_n\rangle H_n$$

mit $D_{f(\hat{H})} = \{ u \in L^2(\mathbb{R}) : \sum_{n\in\mathbb{N}_0} |f(n+\frac{1}{2})|^2 |\langle u, H_n\rangle|^2 < \infty \}$

und mit $f(\lambda) = e^{it\lambda}$ erhalten wir die unitäre Gruppe

$$U_{\hat{H}}(t) u = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} e^{it(n+\frac{1}{2})} \langle u, H_n\rangle H_n .$$

Für $f = \chi_B$ ergeben sich die Projektoren des Spektralmaßes. Wieder liegt ein reines Punktspektrum $\sigma(\hat{H}) = \{ n + \frac{1}{2} : n \in \mathbb{N}_0 \}$ vor. Wir sind erneut in der Situation von Problem 7.

(4) $\hat{H} = -\Delta - \frac{e^2}{|x-x_0|}$, Wasserstoffatom

Hier hat man eine Folge negativer Eigenwerte, endlicher Vielfachheit, die gegen Null konvergieren, und das Stetigkeitsspektrum $\sigma_c(\hat{H}) = [0, \infty)$. (Ausführliche Diskussion in Triebel, H.: Higher Analysis, chap. 7.3.3/4.)

besitzt ein selbstadjungierter Operator $A: H \supset D_A \to H$ ein reines Punktspektrum (nur EWe endlicher Vielfachheit, kein Häufungswert der Eigenwertfolge), so existiert eine ONB $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ von $H$ aus Eigenvektoren von $A$ und eine reelle Eigenwertfolge $(\lambda_n)_{n\in\mathbb{N}}$, so dass

$$A x = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \langle x, e_n \rangle e_n \qquad \forall x \in D_A = \{x \in H : \sum_{n=1}^{\infty} |\lambda_n|^2 |\langle x, e_n\rangle|^2 < \infty\}$$

Die von $iA$ erzeugte unitäre Gruppe nimmt in diesem Fall die Gestalt $\displaystyle U_A(t)x = \sum_{n=1}^{\infty} e^{it\lambda_n} \langle x, e_n \rangle e_n$ an.

Vgl. Bsp. (1), (3) oben und Problem 7.

Für selbstadjungierte positiv definite Operatoren gibt es ein scharfes Kriterium dafür, ob diese ein reines Punktspektrum haben. Dabei heißt ein Operator $A: H \supset D_A \to H$ <u>positiv definit</u>, wenn ein $\varepsilon_0 > 0$ existiert, so dass $\langle Ax, x \rangle \geq \varepsilon_0 \|x\|^2$. In diesem Fall wird durch $\|x\|_A^2 := \langle Ax, x\rangle$ eine Norm auf $D_A$ definiert, die sogenannte <u>Energie-Norm</u>. Sie liegt zwischen der Norm des Hilbertraumes und der Graphen-Norm, denn

$$\|x\|^2 \leq \frac{1}{\varepsilon_0} \|x\|_A^2 \leq \frac{1}{\varepsilon_0} \|Ax\| \|x\| \leq \frac{1}{2\varepsilon_0} \|x\|_{D_A}^2 .$$

Der Abschluss von $D_A$ bezüglich der Energie-Norm, also

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

wird als der <u>Energie-Raum</u> des Operators $A$ bezeichnet (engl.: Energy-space).

Damit gilt das

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

(Triebel: Higher Analysis, Theor. 4.5.3)

<u>Bsp.</u> (1) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein Gebiet und

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

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

$$\langle A f, f \rangle = \langle f, f \rangle - \langle \Delta f, f \rangle = \langle f, f \rangle + \langle \nabla f, \nabla f \rangle,$$

also $\| f \|_A = \| f \|_{H^1(\Omega)}$. Der Energie-Raum für den Laplace Operator auf $L^2(\Omega)$ ist also gerade $H_0^1(\Omega)$. Nun sagt der <u>Einbettungssatz von Rellich-Kondrachov</u>(*) gerade aus: Ist $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein <u>beschränktes</u> Gebiet, so ist die Einbettung $W_0^{1,p}(\Omega) \to L^q(\Omega)$ kompakt, sofern $1 - \frac{n}{p} > -\frac{n}{q}$ und $p \leq q < \infty$. Nun ist $W_0^{1,2}(\Omega) = H_0^1(\Omega)$, also die Einbettung $H_A \hookrightarrow H = L^2(\Omega)$ kompakt. Damit hat $I - \Delta$ und also auch $\Delta$ ein reines Punktspektrum, wenn $\Omega$ beschränkt ist.

---

(*) siehe Adams, Robert, Sobolev Spaces Chap. 6.

(2) Sei $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ stetig mit $V(x) \geq 1 \; \forall x \in \mathbb{R}^n$ und $\lim\limits_{x\to\infty} V(x) = \infty$, sowie $\hat{H} := -\Delta + M_V$ selbstadjungiert.(*)
Dann ist die Einbettung $H_{\hat{H}} \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ kompakt (und $\hat{H}$ besitzt ein reines Punktspektrum).

Bew.: Die Energie-Norm ist hier gegeben durch

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

Sei also eine Folge $(u_k)_{k\in\mathbb{N}}$ in $H_{\hat{H}}$ gegeben mit $\|u_k\|_{H_{\hat{H}}} \leq 1$. Zu $N \in \mathbb{N}$ wählen wir $\chi_N \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $0 \leq \chi_N(x) \leq 1$, $\chi_N|_{B_N} = 1$, $\chi_N|_{B_{N+1}} = 0$, $B_N = B_N(0) \subset \mathbb{R}^n$, und definieren $u_{k,N} := \chi_N \cdot u_k$. Dann ist $u_{k,N}|_{B_{N+1}} \in H_0^1(B_{N+1})$, besitzt also nach Rellich-Kondrachov eine in $L^2(B_{N+1})$ konvergente Teilfolge. Wir wählen sukzessive Teilfolgen aus

Indexfolgen „nested"

$$\left.\begin{array}{lll}
u_{k_1,1} & \longrightarrow & v_1, \ \operatorname{supp} v_1 \subset B_2 \\
\cup & & \\
u_{k_2,2} & \longrightarrow & v_2, \ \operatorname{supp} v_2 \subset B_3 \\
\vdots & & \\
\cup & & \\
u_{k_N,N} & \longrightarrow & v_N, \ \operatorname{supp} v_N \subset B_{N+1}
\end{array}\right\} \text{Grenzwerte in } L^2(\mathbb{R}^n)$$

so dass $v_{N+1}|_{B_{N-1}} = v_N|_{B_{N-1}}$. Dann existiert in $L^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$: $u = \lim\limits_{N\to\infty} v_N$ (Grenzwert in $L^2_{loc}$ und bei geschickter Teilfolgenauswahl pktw. f.ü.)

---

(*) Nämlich der Abschluß von $\hat{H}|_{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}$.

Nun sei $\varepsilon > 0$ vorgegeben. Dann ex. $N_\varepsilon \in \mathbb{N}$, so dass $\frac{1}{V(x)} \leq \varepsilon \quad \forall x \in B_{N_\varepsilon}^c$, und für $R > N_\varepsilon$ erhalten wir

$$\int_{B_R \setminus B_{N_\varepsilon}} |u(x)|^2 dx \leq \sup_{k \in \mathbb{N}} \int_{B_R \setminus B_{N_\varepsilon}} |u_k(x)|^2 dx$$

$$\leq \sup_{k \in \mathbb{N}} \frac{1}{V(x)} \int_{B_{N_\varepsilon}^c} V(x) |u_k(x)|^2 dx$$

$$\leq \varepsilon \, \|u_k\|^2_{\hat{H}} \leq \varepsilon, \text{ unabhängig von } R > N_\varepsilon.$$

Das zeigt $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$ (Beppo-Levi für $R \nearrow \infty$) und

$$\int_{B_{N_\varepsilon}^c} |u_k(x) - u(x)|^2 dx \leq 4\varepsilon \quad \text{(unabhängig von } k\text{)}.$$

Damit ist dann

$$\int_{\mathbb{R}^n} |u_{k_{N_\varepsilon}} - u|^2 d\lambda \leq \int_{B_{N_\varepsilon}} |u_{k_{N_\varepsilon}, N_\varepsilon}(x) - \underbrace{V_{N_\varepsilon}(x)}_{= u(x)}|^2 dx$$

$$+ \int_{B_{N_\varepsilon}^c} |u_{k_{N_\varepsilon}}(x) - u(x)|^2 dx$$

$$\leq \int_{B_{N_\varepsilon}} |u_{k_{N_\varepsilon}, N_\varepsilon}(x) - V_{N_\varepsilon}(x)|^2 dx + 4\varepsilon$$

Jetzt $k_{N_\varepsilon} \to \infty$, so dass $\int_{B_{N_\varepsilon}} \dots dx \to 0$, dann $\varepsilon \searrow 0$.

Also: $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$ besitzt eine in $L^2(\mathbb{R}^n)$ konvergente Teilfolge, und damit ist der Einbettungsoperator kompakt.