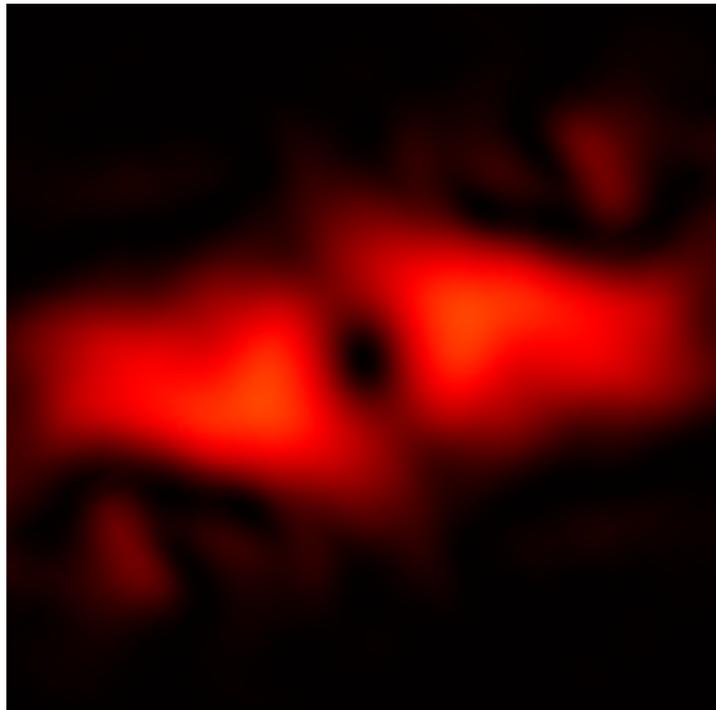


Kompendium zur Lehrveranstaltung
Spektraltheorie und Anwendungen
in der Quantenmechanik

Mechthild Thalhammer



Leopold–Franzens Universität Innsbruck
Wintersemester 2015/16

Das vorliegende Kompendium faßt die im Rahmen der Lehrveranstaltung **Spektraltheorie und Anwendungen in der Quantenmechanik** (VO2) im Wintersemester 2015/16 an der Universität Innsbruck behandelten Themen zusammen. Ohne Anspruch auf Allgemeinheit und Vollständigkeit werden mathematische Grundlagen der Quantenmechanik eingeführt und dazu insbesondere Methoden der Funktionalanalysis genützt. Zur Illustration werden einfache quantenmechanische Systeme betrachtet und deren charakteristisches Lösungsverhalten diskutiert.

Das Kompendium beruht vorwiegend auf einem von Robert Denk verfaßten Skriptum, welches unter

ROBERT DENK

Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik (Wintersemester 2011/12)

<http://cms.uni-konstanz.de/math/denk/home/publikationen-und-skripten/skripten/>

frei verfügbar ist. Als Referenz zu Grundlagen der Funktionalanalysis ist insbesondere das an der Universität Innsbruck als E-Book verfügbare Buch

DIRK WERNER

Funktionalanalysis

7. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, 2011

zu nennen.

Zusätzliche Informationen, insbesondere zur Orts- und Zeitdiskretisierung von nichtlinearen Schrödinger-Gleichungen wie der Gross–Pitaevskii-Gleichung, finden sich im Skriptum

Time-Splitting Spectral Methods for Nonlinear Schrödinger Equations (Sommersemester 2011)

http://techmath.uibk.ac.at/mecht/teaching/year_2010_11/NumerikPDGln_2011/Skriptum_NumerikPDEs.pdf

und den dort angegebenen Quellen.

Graphik. Die Graphik zeigt eine mittels des verallgemeinerten Fourier–Laguerre-Spektralverfahrens und eines Operator-Splittingverfahrens vierter Ordnung berechnete Lösung einer zeitabhängigen zweidimensionalen Gross–Pitaevskii-Gleichung mit zusätzlichem Rotationsterm.

Inhaltsverzeichnis

Prinzipien der Klassischen Mechanik	4
1 Grundlagen der Funktionalanalysis	10
1.1 Komplexer Hilbert-Raum	12
1.2 Stetiger linearer Operator	19
1.3 Abgeschlossener Operator	22
1.4 Selbstadjungierter Operator	25
1.5 Wesentliche Resultate zu Selbstadjungiertheit	29
2 Lebesgue- und Sobolev-Räume	32
2.1 Lebesgue-Räume	33
2.2 Sobolev-Räume	35
2.3 Ungleichung von Poincaré–Friedrichs	38
3 Spektral-Maß und unitäre Gruppe	41
3.1 Eigenschaften des Spektrums	43
3.2 Spektral-Maß und Spektralsatz	45
3.3 Stark-stetige unitäre Gruppe	52
3.4 Vertauschbarkeit	57
4 Anwendungen in der Quantenmechanik	59
4.1 Prinzipien der Quantenmechanik	61
4.2 Heisenberg’sche Unschärferelation	66
4.3 Ortsoperator und Impulsoperator	67
4.4 Schrödinger-Gleichungen	73
Lösungsdarstellung mittels Hermite-Basisfunktionen	77

Prinzipien der Klassischen Mechanik

Inhalt. An späterer Stelle ist es hilfreich, einen Vergleich zwischen Modellen der Klassischen Mechanik und der Quantenmechanik zu ziehen. Deshalb wird im Folgenden an grundlegende Prinzipien der Klassischen Mechanik erinnert; insbesondere werden die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen angegeben. Die Darstellung des Lagrange-Formalismus und des Hamilton-Formalismus ist weitgehend informell, d.h. Erklärungen werden nicht im Detail ausgeführt. Außerdem wird stillschweigend angenommen, daß die auftretenden Funktionen geeignete Regularitätsvoraussetzungen erfüllen und somit sämtliche Relationen wohldefiniert sind.

Überblick.

- Verallgemeinerte Koordinatenfunktion, Verallgemeinerte Impulsfunktion
Lagrange-Funktion, Hamilton-Funktion
Hamilton-Prinzip, Lagrange-Gleichungen, Hamilton'sche Bewegungsgleichungen
Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen
Phasenraum, Zustandsraum
- Harmonischer Oszillator

Notationen.

- Elemente $x \in \mathbb{K}^d$ mit $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ sind als Spalten aufzufassen.
- Für das euklidische Skalarprodukt wird die üblich Bezeichnung verwendet (komplexe Konjugation im zweiten Argument)

$$x \cdot y = \sum_{j=1}^d x_j \overline{y_j}, \quad x, y \in \mathbb{K}^d.$$

- Entsprechend der betrachteten Situation bezeichnet $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ oder $\mathcal{T} = [t_0, \infty)$ oder $\mathcal{T} = [t_0, T]$ mit $t_0, T \in \mathbb{R}$ und $t_0 < T$ den zeitlichen Bereich; im Fall einer autonomen Differentialgleichung kann außerdem $t_0 = 0$ angenommen werden.

Lagrange- und Hamilton-Formalismus

Lagrange-Gleichungen und Hamilton'sche Bewegungsgleichungen.

- (i) *Verallgemeinerte Koordinatenfunktion und Lagrange-Funktion.* Im Rahmen des Lagrange-Formalismus der Klassischen Mechanik wird ein physikalisches System durch eine zeitabhängige (verallgemeinerte) Koordinatenfunktion¹

$$q: \mathcal{T} \longrightarrow \mathbb{R}^{3d}: t \longmapsto q(t) = (q_1(t), \dots, q_d(t))^T,$$

welche die Koordinaten der betrachteten Teilchen bzw. Verallgemeinerungen davon angibt, und die Lagrange-Funktion des Systemes

$$\mathcal{T} \longrightarrow \mathbb{R}: t \longmapsto \mathcal{L}(t, q(t), q'(t))$$

beschrieben.

- (ii) *Bezeichnungen.* Die partiellen Ableitungen der Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L}: D \subseteq \mathcal{T} \times \mathbb{R}^{3d} \times \mathbb{R}^{3d} \longrightarrow \mathbb{R}: (t, \xi, \eta) \longmapsto \mathcal{L}(t, \xi, \eta)$$

bezüglich ξ und η werden mit $\partial_\xi \mathcal{L}$ und $\partial_\eta \mathcal{L}$ bezeichnet.

- (iii) *Hamilton-Prinzip.* Das fundamentale Hamilton-Prinzip besagt, daß das Wirkungsfunktional für Lösungen des betrachteten physikalischen Systemes extremal wird

$$\int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \, d\tau \longrightarrow \text{extremal};$$

dabei sind für zwei Zeitpunkte $t_1, t_2 \in \mathcal{T}$ die zugehörigen Lösungswerte $q(t_1)$ und $q(t_2)$ vorgegeben.

- (iv) *Lagrange-Gleichungen.* Als direkte Folgerung des Hamilton-Prinzipes erhält man die Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \partial_\eta \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) = \partial_\xi \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \quad t \in \mathcal{T}.$$

Erklärung. Um dieses Resultat herzuleiten, verwendet man, daß die Gâteaux-Ableitung² des Wirkungsintegrals verschwindet. Um die Gâteaux-Ableitung zu bestimmen, werden (kleine) Änderungen der Lösung der speziellen Form

$$q + \delta y, \quad \delta \in \mathbb{R}, \quad y: \mathcal{T} \longrightarrow \mathbb{R}^{3d},$$

¹Bemerkung. Genauer sollte es $q(t) = ((q_1(t))^T, \dots, (q_d(t))^T)^T \in \mathbb{R}^{3d \times 1}$ heißen.

²Bemerkung. Die Gâteaux-Ableitung einer Funktion F im Punkt x in Richtung v ist durch den Grenzwert

$$F'(x)v = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} (F(x + \delta v) - F(x))$$

definiert.

betrachtet; aufgrund der Vorgabe der Funktionswerte $q(t_1), q(t_2)$ ergibt sich die Einschränkung $y(t_1) = 0 = y(t_2)$, ansonsten kann y beliebig gewählt werden. Die Forderung, daß die Ableitung des Wirkungsintegrals verschwindet, führt auf

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} \left(\int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\tau, q(\tau) + \delta y(\tau), q'(\tau) + \delta y'(\tau)) \, d\tau - \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \, d\tau \right) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} \left(\mathcal{L}(\tau, q(\tau) + \delta y(\tau), q'(\tau) + \delta y'(\tau)) - \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \right) \, d\tau \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \partial_{\xi} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \cdot y(\tau) + \partial_{\eta} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \cdot y'(\tau) \, d\tau; \end{aligned}$$

mittels partieller Integration und Einsetzen der Bedingungen $y(t_1) = 0 = y(t_2)$ folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{t_1}^{t_2} \partial_{\xi} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \cdot y(\tau) \, d\tau \\ &\quad + \partial_{\eta} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \cdot y(\tau) \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{d\tau} \partial_{\eta} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \cdot y(\tau) \, d\tau \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\partial_{\xi} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) - \frac{d}{d\tau} \partial_{\eta} \mathcal{L}(\tau, q(\tau), q'(\tau)) \right) \cdot y(\tau) \, d\tau. \end{aligned}$$

Da y beliebig gewählt werden kann, ergeben sich daraus die Lagrange-Gleichungen. \diamond

- (v) *Verallgemeinerte Impulsfunktion und Hamilton-Funktion.* Um aus dem Hamilton-Prinzip bzw. den daraus resultierenden Lagrange-Gleichungen die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen abzuleiten, werden die (verallgemeinerte) Impulsfunktion sowie die Hamilton-Funktion durch

$$\begin{aligned} p: \mathcal{T} &\longrightarrow \mathbb{R}^{3d}: t \longmapsto p(t) = (p_1(t), \dots, p_d(t))^T = \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \\ \mathcal{H}: D \subseteq \mathcal{T} \times \mathbb{R}^{3d} \times \mathbb{R}^{3d} &\longrightarrow \mathbb{R}: (t, \xi, \eta) \longmapsto \mathcal{H}(t, \xi, \eta), \\ \mathcal{H}(t, q(t), p(t)) &= p(t) \cdot q'(t) - \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \quad t \in \mathcal{T}, \end{aligned}$$

definiert.

- (vi) *Bemerkung.* Man beachte, daß die Definitionen der Impulsfunktion und der Hamilton-Funktion so zu deuten sind, daß sich mittels Lagrange-Gleichungen bzw. partiellem Differenzieren die Relationen (für $t \in \mathcal{T}$)

$$\begin{aligned} p'(t) &= \frac{d}{dt} \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) = \partial_{\xi} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \\ \partial_{q(t)} \mathcal{H}(t, q(t), p(t)) &= -\partial_{\xi} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) = -p'(t), \\ \partial_{p(t)} \mathcal{H}(t, q(t), p(t)) &= q'(t), \end{aligned}$$

ergeben. Die Funktionen q und p geben meist die Position von Teilchen im dreidimensionalen Raum und den zugehörigen Impuls an; die Hamilton-Funktion \mathcal{H} entspricht der Gesamtenergie des Systemes.

- (vii) *Hamilton'sche Bewegungsgleichungen.* Insgesamt folgen aus den angegebenen Überlegungen die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen

$$\begin{cases} q'(t) = \partial_{p(t)} \mathcal{H}(t, q(t), p(t)), \\ p'(t) = -\partial_{q(t)} \mathcal{H}(t, q(t), p(t)), \end{cases} \quad t \in \mathcal{T},$$

sowie der folgende Zusammenhang zwischen Lagrange- und Hamilton-Funktion

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}(t, q(t), q'(t)) = -\partial_t \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \quad t \in \mathcal{T}.$$

Erklärung. Differenzieren und Einsetzen der zuvor abgeleiteten Relationen ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{H}(t, q(t), q'(t)) &= \frac{d}{dt} \left(p(t) \cdot q'(t) - \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \right) \\ &= p'(t) \cdot q'(t) + p(t) \cdot q''(t) \\ &\quad - \partial_t \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \\ &\quad - \partial_{\xi} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \cdot q'(t) - \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \cdot q''(t) \\ &= \partial_{\xi} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \cdot q'(t) + \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \cdot q''(t) \\ &\quad - \partial_t \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \\ &\quad - \partial_{\xi} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \cdot q'(t) - \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) \cdot q''(t) \\ &= -\partial_t \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \end{aligned}$$

was die angegebene Identität zeigt. ◇

- (viii) *Existenz und Eindeutigkeit.* Unter geeigneten Regularitätsannahmen an die Hamilton-Funktion und bei Vorgabe von Anfangsbedingungen ist die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen und somit des Zustandes des physikalischen Systemes sichergestellt. In vielen Fällen ist es sinnvoll $t \in \mathbb{R}$ zuzulassen.

- (ix) *Phasenraum, Zustandsraum.* Die Mengen

$$\left\{ \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3d} \times \mathbb{R}^{3d} : t \in \mathcal{T} \right\}, \quad \left\{ \begin{pmatrix} t \\ q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \in \mathcal{T} \times \mathbb{R}^{3d} \times \mathbb{R}^{3d} : t \in \mathcal{T} \right\},$$

werden als Phasenraum und Zustandsraum des Systemes bezeichnet.

Illustration.

- (i) *Harmonischer Oszillator.* Als einfache Illustration wird das Modell eines harmonischen Oszillators, d.h. eines (punktförmigen) Körpers der Masse m unter dem Einfluß der linearisierten Federkraft³ $F = -k q(t)$ mit Federkonstante $k > 0$ betrachtet. Dabei wird

³*Bemerkung.* Laut Hook'schem Gesetzes gilt $F = -kx$, wobei x die Auslenkung aus der Ruhelage und k die Federkonstante bezeichnet. Für eine Veranschaulichung siehe Abbildung 1 in DENK (2012).

das Koordinatensystem so gewählt, daß die Bewegung entlang der x -Achse verläuft; die Koordinatenfunktion

$$q: \mathcal{T} = \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^3: t \longmapsto (x(t), 0, 0)^T$$

gibt die Auslenkung aus der Ruhelage $(0, 0, 0)^T$ an. In diesem Fall ist die Lagrange-Funktion $\mathcal{L}: \mathcal{T} \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t, \xi, \eta) &= \frac{m}{2} \eta \cdot \eta - \frac{k}{2} \xi \cdot \xi, & \partial_{\xi} \mathcal{L}(t, \xi, \eta) &= -k \xi, & \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, \xi, \eta) &= m \eta, \\ \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) &= \frac{m}{2} q'(t) \cdot q'(t) - \frac{k}{2} q(t) \cdot q(t), \end{aligned}$$

gegeben, und die Lagrange-Gleichungen lauten (vergleiche Newton'sche Bewegungsgleichungen Masse \times Beschleunigung = Federkraft, für $t \in \mathcal{T}$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) &= \partial_{\xi} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)), \\ m q''(t) &= -k q(t). \end{aligned}$$

Für die Impulsfunktion erhält man (für $t \in \mathcal{T}$)

$$p(t) = \partial_{\eta} \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) = m q'(t), \quad p'(t) = m q''(t) = -k q(t).$$

Die Hamilton-Funktion ist durch die Gesamtenergie, d.h. kinetische und potentielle Energie, gegeben (für $t \in \mathcal{T}$)

$$\mathcal{H}(t, q(t), p(t)) = p(t) \cdot q'(t) - \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) = \frac{1}{2m} p(t) \cdot p(t) + \frac{k}{2} q(t) \cdot q(t),$$

und insbesondere gilt der Zusammenhang (\mathcal{T} und \mathcal{V} bezeichnet hier die kinetische und potentielle Energie)

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}, \quad \mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V}, \quad \mathcal{T} = \frac{m}{2} q' \cdot q' = \frac{1}{2m} p \cdot p, \quad \mathcal{V} = \frac{k}{2} q \cdot q.$$

Als zugehöriges Hamilton-System ergibt sich das Differentialgleichungssystem

$$\begin{cases} q'(t) = \frac{1}{m} p(t), \\ p'(t) = -k q(t), \end{cases} \quad t \in \mathcal{T},$$

welches der folgenden Differentialgleichung zweiter Ordnung und somit den Lagrange-Gleichungen entspricht

$$q''(t) + \frac{k}{m} q(t) = 0, \quad t \in \mathcal{T}.$$

Man beachte, daß die folgende Identität für die Zeitableitung der Hamilton-Funktion, welche auch mittels Differentiation der Hamilton-Funktion und Einsetzen des Hamilton-Systemes folgt (für $t \in \mathcal{T}$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{H}(t, q(t), q'(t)) &= -\partial_t \mathcal{L}(t, q(t), q'(t)) = 0, \\ \frac{d}{dt} \mathcal{H}(t, q(t), q'(t)) &= \frac{1}{m} p'(t) \cdot p(t) + k q'(t) \cdot q(t) = -\frac{k}{m} q(t) \cdot p(t) + \frac{k}{m} p(t) \cdot q(t) = 0, \end{aligned}$$

besagt, daß die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße ist

$$\mathcal{H}(t, q(t), q'(t)) = \mathcal{H}(0, q(0), q'(0)), \quad t \in \mathcal{T}.$$

- (ii) Weitere einfache Beispiele für Hamilton-Systeme sind das mathematische Pendel, das Zweikörperproblem und das Sonnensystem, vgl. Skriptum *Mathematische Modellierung mit gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen*.

Kapitel 1

Grundlagen der Funktionalanalysis

Inhalt. Bei der mathematischen Modellierung von quantenmechanischen Systemen sind separable komplexe Hilbert-Räume und selbstadjungierte Operatoren wesentlich; im Folgenden wird an diese grundlegenden Begriffe erinnert. Für eine detaillierte Darstellung der funktionalanalytischen Grundlagen sei auf WERNER (2011) verwiesen.

Überblick.

- Komplexer Vektorraum
 - Norm, Normierter Raum, Banach-Raum
 - Stetigkeit der Norm
 - Skalarprodukt und induzierte Norm, Prähilbert-Raum, Hilbert-Raum
 - Ungleichung von Cauchy–Schwarz
 - Stetigkeit des Skalarproduktes
 - Separabler topologischer Raum, Separabler Hilbert-Raum
 - Orthogonalität, Orthogonales Komplement
 - Orthonormalsystem, Vollständiges Orthonormalsystem
 - Euklidischer Raum
 - Lebesgue-Räume
 - Hilbert-Raum der fast periodischen Funktionen
- Linearer Operator
 - Operator-Norm
 - Beschränktheit bzw. Stetigkeit eines linearen Operators
 - Normierter Raum der stetigen linearen Operatoren

Dualraum

Isomorphismus, Isometrie

Erweiterung des Begriffes linearer Operator

Kommutator

- Dicht definierter linearer Operator

Abgeschlossener linearer Operator

Graphen-Norm

Abschließbarer linearer Operator, Abgeschlossene Erweiterung

Satz vom abgeschlossenen Graphen

- Adjungierter Operator

Normaler Operator

Unitärer Operator

Symmetrischer Operator

Selbstadjungierter Operator

Im Wesentlichen selbstadjungierter Operator

Halbbeschränkter Operator

Positiver Operator, Strikt positiver Operator

Orthogonaler Projektionsoperator

Eigenschaften des adjungierten Operators

- Selbstadjungiertheit von $A + cI$ für $c \in \mathbb{R}$

Resultat zu Symmetrie und Selbstadjungiertheit

Resultat zu Symmetrie und Selbstadjungiertheit der abgeschlossenen Erweiterung

Hilfsresultat zur Selbstadjungiertheit der Inversen von AA^*

Resultat zur Friedrichs-Erweiterung

Störungssatz von Rellich bzw. Kriterium von Kato

1.1 Komplexer Hilbert-Raum

Vorbemerkung. Einen vollständigen normierten Raum bezeichnet man als Banach-Raum; im Zusammenhang mit partiellen Differentialgleichungen sind die Lebesgue-Räume $L^p(\Omega, \mathbb{K})$ mit Exponent $p \in [1, \infty]$, Definitionsbereich $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ und Wertebereich $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ von Bedeutung. In einem Hilbert-Raum ist zusätzlich die Orthogonalität zweier Elemente mittels des Skalarproduktes erklärt und die Existenz eines vollständigen Orthonormalsystemes sichergestellt; im Rahmen der Quantenmechanik ist insbesondere der Lebesgue-Raum $L^2(\Omega, \mathbb{C})$ der quadratintegrierbaren komplexwertigen Funktionen wesentlich.

Banach-Raum. Es sei \mathcal{X} ein komplexer Vektorraum.¹

(i) *Norm, Normierter Raum.* Eine Norm auf \mathcal{X} ist eine reellwertige Funktion

$$\|\cdot\|_{\mathcal{X}} : \mathcal{X} \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : x \longmapsto \|x\|_{\mathcal{X}},$$

welche absolut homogen, subadditiv und positiv-definit ist.

(a) *Absolute Homogenität.* Es gilt

$$\forall c \in \mathbb{C} \quad \forall x \in \mathcal{X} : \quad \|cx\|_{\mathcal{X}} = |c| \|x\|_{\mathcal{X}}.$$

(b) *Subadditivität.* Es gilt (Dreiecksungleichung)

$$\forall x_1, x_2 \in \mathcal{X} : \quad \|x_1 + x_2\|_{\mathcal{X}} \leq \|x_1\|_{\mathcal{X}} + \|x_2\|_{\mathcal{X}}.$$

¹*Bemerkung.* Ein komplexer Vektorraum \mathcal{X} ist eine Menge mit zwei Verknüpfungen, einer Addition und einer Skalarmultiplikation

$$+ : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{X} : (x_1, x_2) \longmapsto x_1 + x_2, \quad \cdot : \mathbb{C} \times \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{X} : (c, x) \longmapsto cx,$$

welche die folgenden Eigenschaften erfüllen; insbesondere bildet $(\mathcal{X}, +)$ eine kommutative Gruppe.

(i) *Assoziativität, Neutrales Element, Inverses Element, Kommutativität.* Es gilt

$$\begin{aligned} \forall x_1, x_2, x_3 \in \mathcal{X} : \quad & (x_1 + x_2) + x_3 = x_1 + (x_2 + x_3), \\ \exists 0 \in \mathcal{X} \quad \forall x \in \mathcal{X} : \quad & 0 + x = x = x + 0, \\ \forall x \in \mathcal{X} \quad \exists (-x) \in \mathcal{X} : \quad & x - x = 0 = -x + x, \\ \forall x_1, x_2 \in \mathcal{X} : \quad & x_1 + x_2 = x_2 + x_1. \end{aligned}$$

(ii) *Distributivität, Assoziativität.* Es gilt

$$\begin{aligned} \forall c \in \mathbb{C} \quad \forall x_1, x_2 \in \mathcal{X} : \quad & c(x_1 + x_2) = cx_1 + cx_2, \\ \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad \forall x \in \mathcal{X} : \quad & (c_1 + c_2)x = c_1x + c_2x, \\ \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad \forall x \in \mathcal{X} : \quad & (c_1 c_2)x = c_1(c_2x). \end{aligned}$$

(iii) *Neutralität des Einselementes.* Es gilt

$$\forall x \in \mathcal{X} : \quad 1x = x.$$

(c) *Positive Definitheit.* Es gilt

$$\forall x \in \mathcal{X} : \quad \|x\|_{\mathcal{X}} \geq 0 \quad \text{und} \quad \left(\|x\|_{\mathcal{X}} = 0 \iff x = 0 \right).$$

$(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ bildet einen normierten Raum.

(ii) *Banach-Raum.* Ein Banach-Raum ist ein vollständiger normierter Raum $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$, d.h. jede Cauchy-Folge $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ in \mathcal{X} besitzt einen Grenzwert in \mathcal{X}

$$\begin{aligned} & \left(\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k_1, k_2 \in \mathbb{N} \text{ mit } k_1, k_2 \geq K : \quad \|x_{k_1} - x_{k_2}\|_{\mathcal{X}} < \varepsilon \right) \\ \implies & \left(\exists x \in \mathcal{X} \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k \in \mathbb{N} \text{ mit } k \geq K : \quad \|x_k - x\|_{\mathcal{X}} < \varepsilon \right). \end{aligned}$$

Stetigkeit der Norm. Es bezeichne $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ einen normierten Raum. Die Norm ist eine stetige Funktion, d.h. für jede in \mathcal{X} konvergente Folge konvergiert die Folge der zugehörigen Normen gegen die Norm des Grenzwertes (wobei $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $x_k \in \mathcal{X}$ für $k \in \mathbb{N}$ und $x \in \mathcal{X}$)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x \quad \implies \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \|x_k\|_{\mathcal{X}} = \left\| \lim_{k \rightarrow \infty} x_k \right\|_{\mathcal{X}} = \|x\|_{\mathcal{X}};$$

die Stetigkeit ergibt sich mittels Dreiecksungleichung aus der Abschätzung²

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k \in \mathbb{N} \text{ mit } k \geq N : \quad \left| \|x_k\|_{\mathcal{X}} - \|x\|_{\mathcal{X}} \right| \leq \|x_k - x\|_{\mathcal{X}} < \varepsilon.$$

Hilbert-Raum. Es sei \mathcal{H} ein komplexer Vektorraum.

(i) *Skalarprodukt, Induzierte Norm, Prähilbert-Raum.* Ein Skalarprodukt bzw. inneres Produkt auf \mathcal{H} ist eine komplexwertige Funktion

$$\left(\cdot \mid \cdot \right)_{\mathcal{H}} : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C} : (h_1, h_2) \longmapsto (h_1 \mid h_2)_{\mathcal{H}},$$

welche sesquilinear, hermitesch und positiv-definit ist.

(a) *Linearität im ersten Argument.* Es gilt (Additivität, Homogenität)

$$\begin{aligned} \forall h_1, h_2, h_3 \in \mathcal{H} : \quad & (h_1 + h_2 \mid h_3)_{\mathcal{H}} = (h_1 \mid h_3)_{\mathcal{H}} + (h_2 \mid h_3)_{\mathcal{H}}, \\ \forall c \in \mathbb{C} \quad \forall h_1, h_2 \in \mathcal{H} : \quad & (ch_1 \mid h_2)_{\mathcal{H}} = c(h_1 \mid h_2)_{\mathcal{H}}. \end{aligned}$$

²*Bemerkung.* Für beliebige Elemente $x_1, x_2 \in \mathcal{X}$ erhält man mit Hilfe der Dreiecksungleichung die Relation (aus $a \leq b$ sowie $-a \leq b$ folgt $|a| \leq b$)

$$\begin{cases} \|x_1\|_{\mathcal{X}} = \|x_1 - x_2 + x_2\|_{\mathcal{X}} \leq \|x_1 - x_2\|_{\mathcal{X}} + \|x_2\|_{\mathcal{X}} \\ \implies \|x_1\|_{\mathcal{X}} - \|x_2\|_{\mathcal{X}} \leq \|x_1 - x_2\|_{\mathcal{X}}, \\ \|x_2\|_{\mathcal{X}} = \|x_2 - x_1 + x_1\|_{\mathcal{X}} \leq \|x_2 - x_1\|_{\mathcal{X}} + \|x_1\|_{\mathcal{X}} \\ \implies \|x_2\|_{\mathcal{X}} - \|x_1\|_{\mathcal{X}} \leq \|x_2 - x_1\|_{\mathcal{X}} = \|x_1 - x_2\|_{\mathcal{X}}, \\ \implies \left| \|x_1\|_{\mathcal{X}} - \|x_2\|_{\mathcal{X}} \right| \leq \|x_1 - x_2\|_{\mathcal{X}}, \end{cases}$$

welche ebenfalls als Dreiecksungleichung bezeichnet wird.

(b) *Hermiteeschheit*. Es gilt³

$$\forall h_1, h_2 \in \mathcal{H} : \quad (h_2|h_1)_{\mathcal{H}} = \overline{(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}}.$$

(c) *Positive Definitheit*. Es gilt

$$\forall h \in \mathcal{H} : \quad (h|h)_{\mathcal{H}} \geq 0 \quad \text{und} \quad \left((h|h)_{\mathcal{H}} = 0 \iff h = 0 \right).$$

Durch das Skalarprodukt wird eine Norm auf \mathcal{H} induziert⁴

$$\|\cdot\|_{\mathcal{H}} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : h \longmapsto \|h\|_{\mathcal{H}} = \sqrt{(h|h)_{\mathcal{H}}}.$$

$(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ bildet einen Prähilbert-Raum.

(ii) *Hilbert-Raum*. Ein Hilbert-Raum ist ein vollständiger Prähilbert-Raum.

Ungleichung von Cauchy–Schwarz. In einem komplexen Vektorraum mit Skalarprodukt $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}})$ ergibt sich die Ungleichung von Cauchy–Schwarz

$$\forall h_1, h_2 \in \mathcal{H} : \quad |(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}| \leq \sqrt{(h_1|h_1)_{\mathcal{H}}} \sqrt{(h_2|h_2)_{\mathcal{H}}}$$

mit Hilfe der folgenden Überlegungen. Für eine beliebige komplexe Zahl $c \in \mathbb{C}$ und Elemente $h_1, h_2 \in \mathcal{H}$ mit $h_1 \neq 0$ sowie $h_2 \neq 0$ gilt die Identität (verwende Eigenschaften positive Definitheit und Sesquilinearität des Skalarproduktes)

$$0 \leq (h_1 + c h_2 | h_1 + c h_2)_{\mathcal{H}} = (h_1|h_1)_{\mathcal{H}} + 2 \Re(\bar{c} (h_1|h_2)_{\mathcal{H}}) + |c|^2 (h_2|h_2)_{\mathcal{H}};$$

³*Bemerkung.* Zusammen mit Eigenschaft (i) folgt somit

$$\begin{aligned} \forall h_1, h_2, h_3 \in \mathcal{H} : \quad (h_1|h_2 + h_3)_{\mathcal{H}} &= \overline{(h_2 + h_3|h_1)_{\mathcal{H}}} = \overline{(h_2|h_1)_{\mathcal{H}}} + \overline{(h_3|h_1)_{\mathcal{H}}} = (h_1|h_2)_{\mathcal{H}} + (h_1|h_3)_{\mathcal{H}}, \\ \forall c \in \mathbb{C} \quad \forall h_1, h_2 \in \mathcal{H} : \quad (h_1|ch_2)_{\mathcal{H}} &= \overline{(ch_2|h_1)_{\mathcal{H}}} = \bar{c} \overline{(h_2|h_1)_{\mathcal{H}}} = \bar{c} (h_1|h_2)_{\mathcal{H}}. \end{aligned}$$

⁴*Bemerkung.* Offensichtlich erfüllt die induzierte Norm die Eigenschaften absolute Homogenität und positive Definitheit

$$\begin{aligned} \forall c \in \mathbb{C} \quad \forall h \in \mathcal{H} : \quad \|ch\|_{\mathcal{H}}^2 &= (ch|ch)_{\mathcal{H}} = c \bar{c} (h|h)_{\mathcal{H}} = |c|^2 (h|h)_{\mathcal{H}} = |c|^2 \|h\|_{\mathcal{H}}^2 \implies \|ch\|_{\mathcal{H}} = |c| \|h\|_{\mathcal{H}}, \\ \|h\|_{\mathcal{H}} &= \sqrt{(h|h)_{\mathcal{H}}} = 0 \iff (h|h)_{\mathcal{H}} = 0 \iff h = 0; \end{aligned}$$

um die Subadditivität nachzuweisen, nützt man die Ungleichung von Cauchy–Schwarz (siehe unten)

$$\begin{aligned} \forall h_1, h_2 \in \mathcal{H} : \quad \|h_1 + h_2\|_{\mathcal{H}}^2 &= (h_1 + h_2 | h_1 + h_2)_{\mathcal{H}} \\ &= \|h_1\|_{\mathcal{H}}^2 + 2 \Re(h_1|h_2)_{\mathcal{H}} + \|h_2\|_{\mathcal{H}}^2 \\ &\leq \|h_1\|_{\mathcal{H}}^2 + 2 |(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}| + \|h_2\|_{\mathcal{H}}^2 \\ &\leq \|h_1\|_{\mathcal{H}}^2 + 2 \|h_1\|_{\mathcal{H}} \|h_2\|_{\mathcal{H}} + \|h_2\|_{\mathcal{H}}^2 \\ &= \left(\|h_1\|_{\mathcal{H}} + \|h_2\|_{\mathcal{H}} \right)^2, \\ \implies \|h_1 + h_2\|_{\mathcal{H}} &\leq \|h_1\|_{\mathcal{H}} + \|h_2\|_{\mathcal{H}}. \end{aligned}$$

für die folgende spezielle Wahl von $c \in \mathbb{C}$ ergibt sich die Behauptung

$$c = -\frac{(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}}{(h_2|h_2)_{\mathcal{H}}} : \quad 0 \leq (h_1|h_1)_{\mathcal{H}} + 2\Re(\bar{c}(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}) + |c|^2 (h_2|h_2)_{\mathcal{H}} = (h_1|h_1)_{\mathcal{H}} - \frac{|(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}|^2}{(h_2|h_2)_{\mathcal{H}}}$$

$$\implies \frac{|(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}|^2}{(h_2|h_2)_{\mathcal{H}}} \leq (h_1|h_1)_{\mathcal{H}} \implies |(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}|^2 \leq (h_1|h_1)_{\mathcal{H}} (h_2|h_2)_{\mathcal{H}}.$$

Zusätzlich zeigt dies, daß nur im Fall (für beliebiges $c \in \mathbb{C}$)

$$0 = (h_1 + c h_2|h_1 + c h_2)_{\mathcal{H}} \iff h_1 = -c h_2,$$

d.h. bei linearer Angängigkeit von h_1 und h_2 , Gleichheit auftreten kann. Die angegebene Relation für c erklärt sich dadurch, daß im Spezialfall reeller Größen das Minimum einer quadratischen Funktion leicht zu bestimmen ist (mit $\alpha = (h_1|h_1)_{\mathcal{H}} > 0$, $\beta = (h_1|h_2)_{\mathcal{H}} \in \mathbb{R}$ und $\gamma = (h_2|h_2)_{\mathcal{H}} > 0$, nach oben geöffnete Parabel, nach Voraussetzung ist $f(c) \geq 0$ und insbesondere $f(c_{\min}) \geq 0$)

$$f(c) = \alpha + 2\beta c + \gamma c^2, \quad f'(c) = 2(\beta + \gamma c) = 0 \iff c_{\min} = -\frac{\beta}{\gamma}, \quad f''(c_{\min}) = 2\gamma > 0,$$

$$0 \leq f(c_{\min}) = \alpha - \frac{\beta^2}{\gamma} \iff \alpha \gamma \leq \beta^2.$$

Bei Verwendung der Normschreibweise lautet die Ungleichung von Cauchy–Schwarz (man beachte, daß die Normeigenschaften zuvor mittels der Ungleichung von Cauchy–Schwarz nachgewiesen wurden)

$$\forall h_1, h_2 \in \mathcal{H} : \quad \begin{cases} |(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}| \leq \|h_1\|_{\mathcal{H}} \|h_2\|_{\mathcal{H}}, \\ |(h_1|h_2)_{\mathcal{H}}| = \|h_1\|_{\mathcal{H}} \|h_2\|_{\mathcal{H}} \iff \exists c \in \mathbb{C} : h_1 = c h_2. \end{cases}$$

Stetigkeit des Skalarproduktes. Bei Festhalten eines Argumentes führt das Skalarprodukt auf stetige Funktionen, d.h. für jede in einem Prähilbert-Raum $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ konvergente Folge gilt (wobei $(h_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $h_k \in \mathcal{H}$ für $k \in \mathbb{N}$ und $h \in \mathcal{H}$)

$$\forall \tilde{h} \in \mathcal{H} : \quad \lim_{k \rightarrow \infty} h_k = h \implies \lim_{k \rightarrow \infty} (h_k|\tilde{h})_{\mathcal{H}} = \left(\lim_{k \rightarrow \infty} h_k|\tilde{h} \right)_{\mathcal{H}} = (h|\tilde{h})_{\mathcal{H}} \quad \text{und}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\tilde{h}|h_k)_{\mathcal{H}} = (\tilde{h}|\lim_{k \rightarrow \infty} h_k)_{\mathcal{H}} = (\tilde{h}|h)_{\mathcal{H}};$$

die Stetigkeit ergibt sich mit Hilfe der Ungleichung von Cauchy–Schwarz

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k \in \mathbb{N} \text{ mit } k \geq K : \quad |(h_k - h|\tilde{h})_{\mathcal{H}}| \leq \|h_k - h\|_{\mathcal{H}} \|\tilde{h}\|_{\mathcal{H}} < \varepsilon.$$

Separabler Hilbert-Raum. Ein topologischer Raum heißt separabel, wenn es eine abzählbare dichte Teilmenge gibt; da ein Prähilbert-Raum bzw. ein Hilbert-Raum $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ insbesondere ein normierter Raum ist, läßt sich die Dichtheit einer Teilmenge $H \subseteq \mathcal{H}$ folgendermaßen charakterisieren

$$\forall h \in \mathcal{H} \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists h_0 \in H : \quad \|h - h_0\|_{\mathcal{H}} < \varepsilon.$$

Orthogonalität. Es sei $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ ein Prähilbert-Raum.

- (i) *Orthogonalität.* Zwei Elemente $h_1, h_2 \in \mathcal{H}$ heißen orthogonal, wenn ihr Skalarprodukt verschwindet

$$(h_1|h_2)_{\mathcal{H}} = 0.$$

- (ii) *Orthogonales Komplement.* Für einen Unterraum $U \subseteq \mathcal{H}$ oder allgemeiner eine Teilmenge $U \subseteq \mathcal{H}$ ist das orthogonale Komplement durch

$$U^{\perp} = \{h \in \mathcal{H} : \text{für alle Elemente } u \in U \text{ gilt } (h|u)_{\mathcal{H}} = 0\}$$

definiert; aufgrund der Stetigkeit des Skalarproduktes bildet U^{\perp} einen abgeschlossenen Unterraum.⁵

Vollständiges Orthonormalsystem. Es sei $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ ein Prähilbert-Raum.

- (i) *Orthonormalsystem.* Eine Familie $(h_k)_{k \in \mathcal{K}}$ von Elementen $h_k \in \mathcal{H}$ für $k \in \mathcal{K}$ heißt ein Orthonormalsystem in \mathcal{H} , wenn je zwei Elemente aufeinander orthogonal stehen und jedes Element normiert ist

$$\forall k, \ell \in \mathcal{K} : \quad (h_k|h_{\ell})_{\mathcal{H}} = \delta_{k\ell} = \begin{cases} 1, & k = \ell, \\ 0, & k \neq \ell. \end{cases}$$

⁵*Abgeschlossenheit.* In einem normierten Raum $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ und insbesondere in einem Prähilbert-Raum ist die Abgeschlossenheit einer Menge $M \subseteq \mathcal{X}$ dadurch charakterisiert, daß der Grenzwert einer konvergenten Folge, deren Glieder in M liegen, ebenfalls in M liegt

$$\left(\text{die Folge } (x_k)_{k \in \mathbb{N}} \text{ erfüllt } x_k \in M \text{ für } k \in \mathbb{N} \text{ und } \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x \text{ mit } x \in \mathcal{X} \right) \implies x \in M.$$

Orthogonales Komplement. Die Unterraumeigenschaften des orthogonalen Komplementes sind offensichtlich

$$\begin{aligned} h_1, h_2 \in U^{\perp} &\implies \left(\forall u \in U : (h_1|u)_{\mathcal{H}} = 0 = (h_2|u)_{\mathcal{H}} \right) \\ &\implies \left(\forall u \in U : (h_1 + h_2|u)_{\mathcal{H}} = 0 \right) \\ &\implies h_1 + h_2 \in U^{\perp}, \\ c \in \mathbb{C}, \quad h \in U^{\perp} &\implies \left(\forall u \in U : (h|u)_{\mathcal{H}} = 0 \right) \\ &\implies \left(\forall u \in U : (ch|u)_{\mathcal{H}} = 0 \right) \\ &\implies ch \in U^{\perp}. \end{aligned}$$

Die Abgeschlossenheit des orthogonalen Komplementes folgt aus der Stetigkeit des Skalarproduktes

$$\begin{aligned} &\text{die Folge } (h_k)_{k \in \mathbb{N}} \text{ erfüllt } h_k \in U^{\perp} \text{ für } k \in \mathbb{N} \text{ und } \lim_{k \rightarrow \infty} h_k = h \text{ mit } h \in \mathcal{H} \\ &\implies \left(\forall k \in \mathbb{N} \quad \forall u \in U : (h_k|u)_{\mathcal{H}} = 0 \right) \\ &\implies \left(\forall u \in U : (h|u)_{\mathcal{H}} = \left(\lim_{k \rightarrow \infty} h_k | u \right)_{\mathcal{H}} = \lim_{k \rightarrow \infty} (h_k | u)_{\mathcal{H}} = 0 \right) \\ &\implies h \in U^{\perp}. \end{aligned}$$

- (ii) *Vollständiges Orthonormalsystem.* Ein Orthonormalsystem $(h_k)_{k \in \mathcal{K}}$ von \mathcal{H} , dessen lineare Hülle dicht in \mathcal{H} liegt

$$\mathcal{H} = \overline{H}, \quad H = \mathbb{C}\langle h_k : k \in \mathcal{K} \rangle,$$

wird als vollständiges Orthonormalsystem bzw. Hilbert-Basis bezeichnet.

- (iii) *Charakterisierung und Existenz.* Für ein vollständiges Orthonormalsystem $(h_k)_{k \in \mathcal{K}}$ eines Hilbert-Raumes $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ sind folgende Aussagen äquivalent (wesentlich sind zusätzliche Überlegungen zur Wohldefiniertheit der angegebenen unendlichen Reihen, Parseval'sche Identität)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \overline{H}, & H &= \mathbb{C}\langle h_k : k \in \mathcal{K} \rangle, \\ \forall h \in \mathcal{H} : & & (h \in H^\perp &\implies h = 0), \\ \forall h \in \mathcal{H} : & & h &= \sum_{k \in \mathcal{K}} (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k, \\ \forall h, \tilde{h} \in \mathcal{H} : & & (h|\tilde{h})_{\mathcal{H}} &= \sum_{k \in \mathcal{K}} (h|h_k)_{\mathcal{H}} (h_k|\tilde{h})_{\mathcal{H}}, \\ \forall h \in \mathcal{H} : & & \|h\|_{\mathcal{H}}^2 &= \sum_{k \in \mathcal{K}} |(h|h_k)_{\mathcal{H}}|^2. \end{aligned}$$

Jeder separable Hilbert-Raum besitzt ein vollständiges Orthonormalsystem; dieses kann konstruktiv mittels des Orthogonalisierungsverfahrens von Gram–Schmidt konstruiert werden. Ein unendlich-dimensionaler Hilbert-Raum ist genau dann separabel, wenn ein abzählbares vollständiges Orthonormalsystem existiert. Siehe WERNER (2011), Kapitel V.4. Orthonormalbasen.

Illustrationen.

- (i) *Euklidischer Raum.* Betrachtet man den komplexen Vektorraum \mathbb{C}^d mit euklidischem Skalarprodukt und induzierter Norm (wobei $x = (x_1, \dots, x_d)^T \in \mathbb{C}^d$)

$$(x|y) = x \cdot y = \sum_{j=1}^d x_j \overline{y_j}, \quad \|x\| = \sqrt{\sum_{j=1}^d |x_j|^2}, \quad x, y \in \mathbb{C}^d,$$

so bildet die Familie der Standardbasisvektoren ein vollständiges Orthonormalsystem dieses endlich-dimensionalen Hilbert-Raumes.

- (ii) *Lebesgue-Räume.* Für jeden Exponenten $p \in [1, \infty)$ und eine beschränkte offene Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ bildet der Lebesgue-Raum $L^p(\Omega, \mathbb{R})$ einen separablen Banach-Raum. Insbesondere ist der Lebesgue-Raum $L^2((a, b), \mathbb{C})$ der auf einem beschränkten Intervall definierten quadratintegrierbaren komplexwertigen Funktionen, versehen mit dem Skalarprodukt

$$(f|g)_{L^2} = \int_a^b f(\xi) \overline{g(\xi)} d\xi, \quad f, g \in L^2((a, b), \mathbb{C}),$$

und der zugehörigen Norm, ein separabler Hilbert-Raum, und die Familie $(\mathcal{F}_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ der Fourier-Basisfunktionen

$$\mathcal{F}_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : x \mapsto \mathcal{F}_k(x) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{2\pi i k \frac{x-a}{b-a}}, \quad k \in \mathbb{Z},$$

bildet ein vollständiges Orthonormalsystem; ein entsprechendes Resultat gilt für den Lebesgue-Raum $L^2(\Omega, \mathbb{C})$ mit $\Omega = (a_1, b_1) \times \cdots \times (a_d, b_d) \subset \mathbb{R}^d$.

(iii) *Hilbert-Raum der fast periodischen Funktionen.* Auf dem Vektorraum der auf den reellen Zahlen definierten komplexwertigen Funktionen ist durch

$$(f|g) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(\xi) \overline{g(\xi)} \, d\xi, \quad f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C},$$

ein Skalarprodukt erklärt. Die Vervollständigung dieses Prähilbert-Raumes führt auf einen nicht separablen Hilbert-Raum; die überabzählbare Familie $(\mathcal{F}_\kappa)_{\kappa \in \mathbb{R}}$, gegeben durch

$$\mathcal{F}_\kappa : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : x \mapsto \mathcal{F}_\kappa(x) = e^{i\kappa x}, \quad \kappa \in \mathbb{R},$$

bildet ein vollständiges Orthonormalsystem. Man beachte $\mathcal{F}_\kappa \notin L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ für $\kappa \in \mathbb{R}$.

1.2 Stetiger linearer Operator

Vorbemerkung. Im Fall eines linearen Operators zwischen normierten Räumen ist Stetigkeit äquivalent zur Beschränktheit der Operator-Norm. Der Vektorraum der stetigen linearen Operatoren zwischen einem normierten Raum und einem Banach-Raum bildet mit der Operator-Norm einen Banach-Raum; spezielle Bedeutung hat der Dualraum eines normierten Raumes, welcher alle stetigen linearen Funktionale umfaßt.

Stetiger linearer Operator.

(i) *Linearer Operator.* Es seien $\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2$ komplexe Vektorräume. Eine lineare Funktion

$$A: \mathcal{X}_1 \longrightarrow \mathcal{X}_2$$

erfüllt die Eigenschaften (Additivität, Homogenität)

$$\begin{aligned} \forall x_1, \tilde{x}_1 \in \mathcal{X}_1: \quad A(x_1 + \tilde{x}_1) &= Ax_1 + A\tilde{x}_1, \\ \forall c \in \mathbb{C} \quad \forall x_1 \in \mathcal{X}_1: \quad A(cx_1) &= cAx_1, \end{aligned}$$

und wird als linearer Operator bezeichnet; wesentliche Unterräume sind der Wertebereich von A , der Kern von A und der Graph von A

$$\begin{aligned} \text{Bi}A &= A(\mathcal{X}_1) = \{Ax_1 : x_1 \in \mathcal{X}_1\} \subseteq \mathcal{X}_2, \\ \text{Ke}A &= A^{-1}(\{0\}) = \{x_1 \in \mathcal{X}_1 : Ax_1 = 0\} \subseteq \mathcal{X}_1, \\ \text{Gr}A &= \{(x_1, Ax_1) : x_1 \in \mathcal{X}_1\} \subseteq \mathcal{X}_1 \times \mathcal{X}_2. \end{aligned}$$

Im Spezialfall $\mathcal{X}_2 = \mathbb{C}$ spricht man von einem linearen Funktional.

(ii) *Beschränktheit der Operator-Norm.* Ein linearer Operator $A: \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ zwischen normierten Räumen $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ und $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ heißt beschränkt, wenn die zugehörige Operator-Norm endlich ist

$$\|A\|_{\mathcal{X}_2 \leftarrow \mathcal{X}_1} = \sup_{\substack{x_1 \in \mathcal{X}_1 \\ x_1 \neq 0}} \frac{\|Ax_1\|_{\mathcal{X}_2}}{\|x_1\|_{\mathcal{X}_1}} = \sup_{\substack{x_1 \in \mathcal{X}_1 \\ \|x_1\|_{\mathcal{X}_1} = 1}} \|Ax_1\|_{\mathcal{X}_2} < \infty;$$

für einen beschränkten Operator folgt insbesondere die Relation (mit optimaler Konstante $C = \|A\|_{\mathcal{X}_2 \leftarrow \mathcal{X}_1} \geq 0$)

$$\exists C \geq 0 \quad \forall x_1 \in \mathcal{X}_1: \quad \|Ax_1\|_{\mathcal{X}_2} \leq C \|x_1\|_{\mathcal{X}_1}.$$

(iii) *Beschränktheit und Stetigkeit.* Für einen linearen Operator $A: \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ zwischen normierten Räumen $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ und $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ sind folgende Aussagen äquivalent.

(a) Der lineare Operator A ist gleichmäßig stetig

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0 \quad \forall \tilde{x}_1, x_1 \in \mathcal{X}_1 \text{ mit } \|\tilde{x}_1 - x_1\|_{\mathcal{X}_1} \leq \delta: \quad \|A(\tilde{x}_1 - x_1)\|_{\mathcal{X}_2} \leq \varepsilon.$$

(b) Der lineare Operator A ist stetig

$$\forall x_1 \in \mathcal{X}_1 \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0 \quad \forall \tilde{x}_1 \in \mathcal{X}_1 \text{ mit } \|\tilde{x}_1 - x_1\|_{\mathcal{X}_1} \leq \delta: \quad \|A(\tilde{x}_1 - x_1)\|_{\mathcal{X}_2} \leq \varepsilon.$$

(c) Der lineare Operator A ist stetig in Null

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0 \quad \forall x_1 \in \mathcal{X}_1 \text{ mit } \|x_1\|_{\mathcal{X}_1} \leq \delta: \quad \|Ax_1\|_{\mathcal{X}_2} \leq \varepsilon.$$

(d) Der lineare Operator A ist im folgenden Sinn beschränkt

$$\exists C \geq 0 \quad \forall x_1 \in \mathcal{X}_1: \quad \|Ax_1\|_{\mathcal{X}_2} \leq C \|x_1\|_{\mathcal{X}_1}.$$

Erklärung. Vergleiche WERNER (2011), Satz II.1.2. ◇

(iv) *Stetige lineare Operatoren.* Der Vektorraum aller stetigen linearen Operatoren zwischen normierten Räumen wird mit

$$L(\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2) = \{A: \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2 \text{ linear und stetig}\}$$

bezeichnet; versehen mit der Operator-Norm bildet $L(\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2)$ einen normierten Raum. Speziell für $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 = \mathcal{X}_2$ setzt man

$$L(\mathcal{X}) = L(\mathcal{X}, \mathcal{X}) = \{A: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X} \text{ linear und stetig}\}.$$

Falls der Bildbereich \mathcal{X}_2 vollständig und somit ein Banach-Raum ist, bildet

$$(L(\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2), \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2 \leftarrow \mathcal{X}_1})$$

einen Banach-Raum, vergleiche WERNER (2011), Satz II.1.4.

(v) *Dualraum.* Aus den angegebenen Überlegungen folgt insbesondere, daß der topologische Dualraum eines normierten Raumes $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ einen Banach-Raum bildet

$$\mathcal{X}^* = L(\mathcal{X}, \mathbb{C}) = \{x^*: \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{C} \text{ linear und stetig}\}, \quad \|x^*\|_{\mathcal{X}^*} = \sup_{\|x\|_{\mathcal{X}}=1} |x^*(x)|.$$

(vi) *Isomorphismus.* Ein linearer Operator zwischen normierten Räumen $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ und $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ wird als Isomorphismus bezeichnet, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind

$$A: \mathcal{X}_1 \longrightarrow \mathcal{X}_2 \text{ bijektiv und stetig,} \quad A^{-1}: \mathcal{X}_2 \longrightarrow \mathcal{X}_1 \text{ stetig.}$$

(vii) *Isometrie.* Ein linearer Operator $A: \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ heißt eine Isometrie, wenn die Norm erhalten bleibt

$$\forall x_1 \in \mathcal{X}_1: \quad \|Ax_1\|_{\mathcal{X}_2} = \|x_1\|_{\mathcal{X}_1}.$$

Insbesondere folgt daraus die Stetigkeit und Injektivität von A , denn (somit $\text{Ke}A = \{0\}$)

$$Ax_1 = A\tilde{x}_1 \implies 0 = \|A(x_1 - \tilde{x}_1)\|_{\mathcal{X}_2} = \|x_1 - \tilde{x}_1\|_{\mathcal{X}_1} \implies x_1 = \tilde{x}_1;$$

Surjektivität ist im Allgemeinen jedoch nicht gegeben.

Erweiterung. Für die folgenden Überlegungen ist es notwendig, den Begriff des linearen Operators zwischen normierten Räumen zu erweitern; von nun an wird eine lineare Funktion, die auf einem Unterraum eines normierten Raumes $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ definiert ist und Werte in einem normierten Raum $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ annimmt

$$A : D(A) \subseteq \mathcal{X}_1 \longrightarrow \mathcal{X}_2,$$

als linearer Operator bezeichnet. Im Zusammenhang mit partiellen Differentialgleichungen ist in erster Linie der Fall eines unbeschränkten Operators $A : D(A) \subset \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ relevant; um auch den Spezialfall eines beschränkten Operators $A : D(A) = \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ zuzulassen, wird meist $D(A) \subseteq \mathcal{X}_1$ angenommen.

Kommutator. Es sei $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ ein normierter Raum; weiters seien $A_1 : D(A_1) \subseteq \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ sowie $A_2 : D(A_2) \subseteq \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ lineare Operatoren.

(i) Der Kommutator von A_1 und A_2 ist durch

$$[A_1, A_2] = A_1 A_2 - A_2 A_1 : D(A_1 A_2) \cap D(A_2 A_1) \subseteq \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{X}$$

definiert.

(ii) Einfache Rechnungen zeigen die Identitäten

$$\begin{aligned} [A_1, A_2] &= -[A_2, A_1], \\ \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C} : \quad [A_1 - c_1 I, A_2 - c_2 I] &= [A_1, A_2]. \end{aligned}$$

1.3 Abgeschlossener Operator

Vorbemerkung. Ein einfaches Modell der Quantenmechanik, bei welchem unbeschränkte lineare Operatoren auftreten, ist die eindimensionale zeitabhängige Schrödinger-Gleichungen für den harmonischen Oszillator (normalisierte Formulierung)

$$i \partial_t \psi(x, t) = -\partial_{xx} \psi(x, t) + x^2 \psi(x, t), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R};$$

der lineare Differentialoperator sowie der Multiplikationsoperator sind auf dem Lebesgue-Raum $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ unbeschränkt und insbesondere nicht stetig

$$A_1 = \partial_{xx} : D(A_1) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : f \longmapsto \partial_{xx} f,$$

$$A_2 : D(A_2) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : f \longmapsto [x \longmapsto x^2 f(x)].$$

Bei einem unstetigen linearen Operator $A : D(A) \subset \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ ist es nicht zulässig, aus der Konvergenz einer Folge im Definitionsbereich auf die Konvergenz der zugehörigen Bildfolge zu schließen

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d_k = x_1 \text{ in } \mathcal{X}_1 \not\stackrel{\text{i.A.}}{\implies} \lim_{k \rightarrow \infty} A d_k = A \lim_{k \rightarrow \infty} d_k = A x_1 \text{ in } \mathcal{X}_2.$$

Als eine Erweiterung der Klasse der stetigen Operatoren sind abgeschlossene Operatoren, welche die Eigenschaft

$$\begin{cases} \lim_{k \rightarrow \infty} d_k = x_1 \text{ in } \mathcal{X}_1 \\ \lim_{k \rightarrow \infty} A d_k = x_2 \text{ in } \mathcal{X}_2 \end{cases} \implies \begin{cases} x_1 \in D(A) \\ A x_1 = x_2 \end{cases}$$

erfüllen, bedeutsam.

Dicht definierter Operator. Es seien $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ sowie $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ normierte Räume und $A : D(A) \subseteq \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ ein auf einem Unterraum definierter linearer Operator. Der lineare Operator A heißt dicht definiert, wenn der Abschluß des Definitionsbereiches ganz \mathcal{X}_1 ergibt

$$\overline{D(A)} = \mathcal{X}_1.$$

Abgeschlossener Operator.

- (i) *Abgeschlossener Operator.* Es seien $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ sowie $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ normierte Räume und $A : D(A) \rightarrow \mathcal{X}_2$ ein auf einem Unterraum $D(A) \subseteq \mathcal{X}_1$ definierter linearer Operator. Der lineare Operator A heißt abgeschlossen, wenn der Graph von A ein abgeschlossener Unterraum von $\mathcal{X}_1 \times \mathcal{X}_2$ ist. Für eine Folge $(d_k)_{k \in \mathbb{N}}$ im Definitionsbereich $D(A)$ und die zugehörige Bildfolge $(A d_k)_{k \in \mathbb{N}}$ ergibt sich damit (beachte $(d_k, A d_k) \in \text{Gr} A$ und $(d_k, A d_k) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} (x_1, A x_1) \in \text{Gr} A$)

$$\begin{cases} \lim_{k \rightarrow \infty} d_k = x_1 \text{ in } \mathcal{X}_1 \\ \lim_{k \rightarrow \infty} A d_k = x_2 \text{ in } \mathcal{X}_2 \end{cases} \implies \begin{cases} x_1 \in D(A) \\ A x_1 = A \lim_{k \rightarrow \infty} d_k = \lim_{k \rightarrow \infty} A d_k = x_2 \end{cases}$$

als Charakterisierung von Abgeschlossenheit.

- (ii) *Graphen-Norm.* Unter der Voraussetzung, daß $(\mathcal{X}_1, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_1})$ sowie $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ Banach-Räume sind und der lineare Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ abgeschlossen ist, folgt, daß der Definitionsbereich versehen mit der Graphen-Norm

$$(D(A), \|\cdot\|_{D(A)}), \quad \|d\|_{D(A)} = \|d\|_{\mathcal{X}_1} + \|Ad\|_{\mathcal{X}_2}, \quad d \in D(A),$$

vollständig und somit ein Banach-Raum ist.⁶ Wegen

$$\|A\|_{\mathcal{X}_2 \leftarrow D(A)} = \sup_{\substack{d \in D(A) \\ \|d\|_{D(A)}=1}} \|Ad\|_{\mathcal{X}_2} \leq \sup_{\substack{d \in D(A) \\ \|d\|_{D(A)}=1}} \|d\|_{D(A)} = 1$$

ist A als Operator von $(D(A), \|\cdot\|_{D(A)})$ nach $(\mathcal{X}_2, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_2})$ beschränkt und somit stetig. Man beachte, daß $\|A(\cdot)\|_{\mathcal{X}_2}$ im Allgemeinen nur eine Seminorm definiert; ist jedoch die Injektivität von A sichergestellt, d.h. gilt $\text{Ke}A = A^{-1}(\{0\}) = \{0\}$, so führt $\|A(\cdot)\|_{\mathcal{X}_2}$ auf eine zur Graphen-Norm äquivalente Norm.

- (iii) *Abschließbarer Operator.* Ein linearer Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{X}_1 \rightarrow \mathcal{X}_2$ zwischen normierten Räumen heißt abschließbar, wenn es einen abgeschlossen linearen Operator mit folgender Eigenschaft gibt

$$\overline{A} : D(\overline{A}) \subseteq \mathcal{X}_1 \longrightarrow \mathcal{X}_2, \quad \text{Gr}\overline{A} = \overline{\text{Gr}A};$$

⁶*Bemerkung.* Im Folgenden wird die Abgeschlossenheit von A angenommen und die Vollständigkeit von $D(A)$ nachgewiesen. Es sei $(d_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Folge in $D(A) \subseteq \mathcal{X}_1$ und eine Cauchy-Folge bezüglich der Graphen-Norm, d.h. es gelte

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k_1, k_2 \in \mathbb{N} \text{ mit } k_1, k_2 \geq K: \quad \|d_{k_1} - d_{k_2}\|_{D(A)} = \|d_{k_1} - d_{k_2}\|_{\mathcal{X}_1} + \|A(d_{k_1} - d_{k_2})\|_{\mathcal{X}_2} < \varepsilon.$$

Insbesondere ist die Folge $(d_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Cauchy-Folge im zugrundeliegenden Banach-Raum \mathcal{X}_1 und besitzt somit einen Grenzwert in \mathcal{X}_1

$$\begin{aligned} & \left(\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k_1, k_2 \in \mathbb{N} \text{ mit } k_1, k_2 \geq K: \quad \|d_{k_1} - d_{k_2}\|_{\mathcal{X}_1} < \varepsilon \right) \\ & \implies \left(\exists x_1 \in \mathcal{X}_1 \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k \in \mathbb{N} \text{ mit } k \geq K: \quad \|d_k - x_1\|_{\mathcal{X}_1} < \varepsilon \right); \end{aligned}$$

ebenso ist die zugehörige Bildfolge $(Ad_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Cauchy-Folge im Banach-Raum \mathcal{X}_2 und konvergiert folglich gegen einen Grenzwert in \mathcal{X}_2

$$\begin{aligned} & \left(\forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k_1, k_2 \in \mathbb{N} \text{ mit } k_1, k_2 \geq K: \quad \|Ad_{k_1} - Ad_{k_2}\|_{\mathcal{X}_2} < \varepsilon \right) \\ & \implies \left(\exists x_2 \in \mathcal{X}_2 \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists K \in \mathbb{N} \quad \forall k \in \mathbb{N} \text{ mit } k \geq K: \quad \|Ad_k - x_2\|_{\mathcal{X}_2} < \varepsilon \right). \end{aligned}$$

Aufgrund der angenommenen Abgeschlossenheit von A folgt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d_k = x_1 \in D(A), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} Ad_k = x_2 = Ax_1.$$

Die erste Relation zeigt, daß für jede Folge in $D(A)$, welche bezüglich der Graphen-Norm eine Cauchy-Folge ist, Konvergenz gesichert ist und der zugehörige Grenzwert in $D(A)$ liegt; dies ist gleichbedeutend mit der Vollständigkeit von $D(A)$.

dieser Operator wird als die abgeschlossene Erweiterung bzw. der Abschluß von A bezeichnet.

- (iv) *Satz vom abgeschlossenen Graphen.* Ein stetiger linearer Operator ist insbesondere abgeschlossen (Stetigkeit entspricht Vertauschbarkeit von Grenzwertbildung und Funktionsauswertung). Der Satz vom abgeschlossenen Graphen besagt, daß für Banach-Räume auch die Umkehrung gilt, vergleiche WERNER (2011), Kapitel IV.4 Der Satz vom abgeschlossenen Graphen.

1.4 Selbstadjungierter Operator

Vorbemerkung. Bei der Modellierung quantenmechanischer Systeme spielt der Begriff des selbstadjungierten Operators eine zentrale Rolle; insbesondere nützt man Resultate zu den Spektraleigenschaften eines selbstadjungierten Operators. Beispielsweise führt der Ortsoperator bei geeigneter Wahl des Definitionsbereiches auf einen selbstadjungierten Operator

$$Q : D(Q) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : x \mapsto x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})\} \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto x\psi(x)].$$

Adjungierter Operator. Es seien $(\mathcal{H}_1, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}_1}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}_1})$ und $(\mathcal{H}_2, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}_2}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}_2})$ komplexe Hilbert-Räume.

- (i) *Adjungierter Operator eines beschränkten Operators.* Für einen beschränkten linearen Operator $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ ist der adjungierte Operator

$$A^* : \mathcal{H}_2 \longrightarrow \mathcal{H}_1 : h_2 \longmapsto A^* h_2$$

durch die folgende Relation definiert

$$\forall h_1 \in \mathcal{H}_1 \quad \forall h_2 \in \mathcal{H}_2 : \quad (Ah_1|h_2)_{\mathcal{H}_2} = (h_1|A^*h_2)_{\mathcal{H}_1}.$$

Vergleiche WERNER (2011), Definition III.4.1 (allgemeiner für normierte Räume) und Definition V.5.1.

- (ii) *Adjungierter Operator eines unbeschränkten Operators.* Für einen dicht definierten linearen Operator $A : D(A) \subset \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ ist der adjungierte Operator

$$A^* : D(A^*) \subseteq \mathcal{H}_2 \longrightarrow \mathcal{H}_1 : d^* \longmapsto A^* d^*$$

durch die folgende Relation definiert

$$\forall d \in D(A) \quad \forall d^* \in D(A^*) : \quad (Ad|d^*)_{\mathcal{H}_2} = (d|A^*d^*)_{\mathcal{H}_1}.$$

Aufgrund der Voraussetzung der dichten Definiertheit $\overline{D(A)} = \mathcal{H}_1$ ist das Bildelement $A^*d^* \in \mathcal{H}_1$ eindeutig bestimmt und somit der adjungierte Operator wohldefiniert; als Definitionsbereich des adjungierten Operators wird dabei der größtmögliche Unterraum gewählt.

- (iii) *Spezialfall.* Betrachtet man speziell den Fall $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$, so vereinfacht sich die Definition des adjungierten Operators wie folgt. Für einen dicht definierten linearen Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist der adjungierte Operator

$$A^* : D(A^*) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} : d^* \longmapsto A^* d^*$$

durch die folgende Relation definiert

$$\forall d \in D(A) \quad \forall d^* \in D(A^*) : \quad (Ad|d^*)_{\mathcal{H}} = (d|A^*d^*)_{\mathcal{H}}.$$

Vergleiche WERNER (2011), Definition VII.2.3.

Selbstadjungierter Operator. Es sei $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ ein komplexer Hilbert-Raum.

- (i) *Normaler Operator.* Ein beschränkter linearer Operator $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt normal, wenn die folgende Identität gültig ist

$$A^*A = AA^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

- (ii) *Unitärer Operator.* Gilt für einen beschränkten linearen Operator $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ zusätzlich die folgende Relation, so heißt der Operator unitär

$$A^*A = I = AA^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

Allgemeiner kann man auch verschiedene Hilbert-Räume zulassen und fordert dann (wobei $A: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ und $A^*: \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$)

$$A^*A = I: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1, \quad AA^* = I: \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2.$$

- (iii) *Symmetrischer Operator.* Ein dicht definierter linearer Operator $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt symmetrisch, wenn die folgende Relation gültig ist

$$\forall d_1, d_2 \in D(A): \quad (Ad_1|d_2)_{\mathcal{H}} = (d_1|Ad_2)_{\mathcal{H}}.$$

- (iv) *Selbstadjungierter Operator.* Ein linearer Operator $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt selbstadjungiert, wenn der adjungierte Operator $A^*: D(A^*) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit A übereinstimmt

$$A = A^* : D(A) = D(A^*) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H};$$

insbesondere wird A als dicht definiert angenommen.

- (v) *Erinnerung.* Die abgeschlossene Erweiterung eines linearen Operator ist durch

$$A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \bar{A}: D(\bar{A}) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \text{Gr}\bar{A} = \overline{\text{Gr}A},$$

definiert; falls A dicht definiert ist, folgt insbesondere $D(\bar{A}) = \overline{D(A)} = \mathcal{H}$.

- (vi) *Operator mit selbstadjungierter abgeschlossener Erweiterung.* Ein dicht definierter linearer Operator $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt im Wesentlichen selbstadjungiert, wenn er symmetrisch ist und seine abgeschlossene Erweiterung $\bar{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ selbstadjungiert ist.

- (vii) *Halbbeschränkter Operator.* Ein symmetrischer Operator $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt von unten halbbeschränkt, wenn die folgende Relation gültig ist

$$\exists C \in \mathbb{R} \quad \forall d \in D(A): \quad (Ad|d)_{\mathcal{H}} \geq C \|d\|_{\mathcal{H}}^2;$$

man beachte, daß auch ein negativer Wert der Konstante zugelassen ist. Entsprechend ist ein von oben halbbeschränkter Operator definiert.

(viii) *Positiver Operator.* Ein symmetrischer Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt positiv, wenn die folgende Relation gültig ist

$$\forall d \in D(A): \quad (Ad|d)_{\mathcal{H}} \geq 0;$$

ein positiver Operator ist nach unten halbbeschränkt. Man spricht von einem strikt positiven Operator, wenn insbesondere die Bedingung

$$\forall d \in D(A) \text{ mit } d \neq 0: \quad (Ad|d)_{\mathcal{H}} > 0$$

erfüllt ist.

(ix) *Projektionsoperator.* Ein beschränkter linearer Operator $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, welcher die folgenden Bedingungen erfüllt, wird als orthogonaler Projektionsoperator bezeichnet

$$A = A^2 = A^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

Ein orthogonaler Projektionsoperator ist insbesondere selbstadjungiert und folglich normal, denn $AA^* = A^2 = A = A^2 = A^*A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Siehe auch WERNER (2011), Satz V.5.9.

Bemerkungen. Es sei $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein dicht definierter linearer Operator auf einem komplexen Hilbert-Raum.

(i) Der adjungierte Operator $A^* : D(A^*) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, gegeben durch die Eigenschaft

$$\forall d \in D(A) \quad \forall d^* \in D(A^*): \quad (Ad|d^*)_{\mathcal{H}} = (d|A^*d^*)_{\mathcal{H}},$$

ist dicht definiert und abgeschlossen.

Erklärung. Für eine Folge $(d_k^*)_{k \in \mathbb{N}}$ im Definitionsbereich $D(A^*)$, die zugehörige Bildfolge $(A^*d_k^*)_{k \in \mathbb{N}}$ und ein beliebiges Element $d \in D(A)$ folgt (verwende Stetigkeit des Skalarproduktes)

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \lim_{k \rightarrow \infty} d_k^* = x_1 \text{ in } \mathcal{H} \\ \lim_{k \rightarrow \infty} A^*d_k^* = x_2 \text{ in } \mathcal{H} \end{cases} \\ & \implies (Ad|x_1)_{\mathcal{H}} = \lim_{k \rightarrow \infty} (Ad|d_k^*)_{\mathcal{H}} = \lim_{k \rightarrow \infty} (d|A^*d_k^*)_{\mathcal{H}} = (d|x_2)_{\mathcal{H}} \\ & \implies \begin{cases} x_1 \in D(A^*) \\ A^*x_1 = x_2 \end{cases} \end{aligned}$$

was die Behauptung zeigt. Vergleiche auch WERNER (2011), Satz VII.2.4. ◇

(ii) Es sind die folgenden Relationen gültig⁷

$$\overline{\text{Bi}A} = (\text{Ke}A^*)^\perp, \quad \text{Ke}A^* = (\overline{\text{Bi}A})^\perp,$$

siehe WERNER (2011), Satz III.4.5 und Satz V.5.2.

(iii) Ist A abschließbar, so ist $\overline{A} = A^{**}$ die kleinste abgeschlossene Erweiterung.

(iv) Für einen beschränkten linearen Operator ist die Eigenschaft symmetrisch äquivalent zur Eigenschaft selbstadjungiert, siehe WERNER (2011), Satz V.5.5 (Satz von Hellinger–Toeplitz). Im unbeschränkten Fall folgt für einen symmetrischen jedoch nicht selbstadjungierten Operator $D(A) \subset D(A^*)$, siehe WERNER (2011), Korollar VII.2.5.

(v) Aus der Abgeschlossenheit des adjungierten Operators folgt insbesondere, daß ein selbstadjungierter Operator abgeschlossen ist.

⁷*Bemerkung.* Beachte, daß für jedes Element $d^* \in D(A^*)$ mit $A^*d^* = 0$, d.h. es ist $d^* \in \text{Ke}A^*$, die folgende Relation gilt

$$\forall d \in D(A): \quad (Ad|d^*)_{\mathcal{H}} = (d|A^*d^*)_{\mathcal{H}} = 0.$$

1.5 Wesentliche Resultate zu Selbstadjungiertheit

Vorbemerkung. Im Folgenden werden wesentliche Resultate für selbstadjungierte Operatoren angegeben; detaillierte Begründungen sind in WERNER (2011) oder DENK (2012) zu finden.

Voraussetzung. Es bezeichne $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ einen komplexen Hilbert-Raum; im Hinblick auf die betrachteten Anwendungen kann außerdem angenommen werden, daß \mathcal{H} separabel ist.

Elementare Überlegungen. Ist $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein selbstadjungierter Operator, so gilt

$$\forall c \in \mathbb{R} : \quad A + cI : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ selbstadjungiert.}$$

Man beachte, daß die Aussage für $c \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ jedoch nicht richtig ist; so gilt beispielsweise

$$(A + iI)^* = A - iI.$$

Erklärung. Da die Operatoren A und $A + cI$ denselben Definitionsbereich besitzen, ist nur die Symmetrie nachzuweisen; Aus der Forderung

$$\forall d_1, d_2 \in D(A) : \quad (A d_1 | d_2)_{\mathcal{H}} = (d_1 | A d_2)_{\mathcal{H}},$$

folgt für reelle Zahlen $c \in \mathbb{R}$ die Identität

$$\begin{aligned} \forall d_1, d_2 \in D(A) : \quad (A + cI d_1 | d_2)_{\mathcal{H}} &= (A d_1 | d_2)_{\mathcal{H}} + (c d_1 | d_2)_{\mathcal{H}} \\ &= (d_1 | A d_2)_{\mathcal{H}} + (d_1 | c d_2)_{\mathcal{H}} \\ &= (d_1 | (A + cI) d_2)_{\mathcal{H}}, \end{aligned}$$

was die Behauptung zeigt. ◇

Vorbemerkung. Die Symmetrie eines linearen Operators wie etwa des Ortsoperators und des Impulsoperators ist leicht nachzuprüfen; das folgende Resultat ist hilfreich, um die Selbstadjungiertheit dieser Operatoren zu zeigen.

Resultat (Symmetrie und Selbstadjungiertheit). Es sei $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein dicht definierter symmetrischer linearer Operator. Folgende Aussagen sind äquivalent.

- (i) A ist selbstadjungiert.
- (ii) A ist abgeschlossen und es gilt

$$\text{Ke}(A^* + iI) = \{0\} = \text{Ke}(A^* - iI).$$

- (iii) Es gilt

$$\text{Bi}(A + iI) = \mathcal{H} = \text{Bi}(A - iI).$$

Erklärung. Siehe WERNER (2011), Satz VII.2.8 und DENK (2012), Satz 1.15. ◇

Vorbemerkung. Entsprechende Aussagen gelten für einen im Wesentlichen selbstadjungierten Operator; das folgende Resultat wird insbesondere für den Beweis des Satzes von Stone benötigt.

Resultat (Symmetrie und Selbstadjungiertheit der Erweiterung). Für einen dicht definierten symmetrischen linearen Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ gelten folgende Aussagen.

- (i) A ist abschließbar, und es gilt $\overline{A} = A^{**}$.
- (ii) \overline{A} ist symmetrisch, und es gilt $\overline{A}^* = A^*$.
- (iii) Für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ existiert eine positive Konstante $C > 0$ mit

$$\forall d \in D(A) : \quad \|(A + zI)d\|_{\mathcal{H}} \geq C \|d\|_{\mathcal{H}}.$$

- (iv) A ist genau dann abgeschlossen, wenn die Wertebereiche $\text{Bi}(A + iI)$ sowie $\text{Bi}(A - iI)$ abgeschlossen sind.
- (v) A ist genau dann im Wesentlichen selbstadjungiert, wenn die folgende Relation gilt

$$\overline{\text{Bi}(A + iI)} = \mathcal{H} = \overline{\text{Bi}(A - iI)}.$$

Erklärung. Siehe WERNER (2011), Korollar VII.2.9 und DENK (2012), Satz 2.3. ◇

Vorbemerkung. Das folgende Hilfsresultat gibt an, unter welchen Voraussetzungen man durch Komposition mit dem adjungierten Operator einen selbstadjungierten Operator erhält; die Herleitung des im Anschluß angegebenen Resultates zur Friedrichs-Erweiterung nützt dieses Hilfsresultat.

Hilfsresultat. Es seien \mathcal{H}_1 sowie \mathcal{H}_2 komplexe Hilbert-Räume und $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ ein stetiger und injektiver linearer Operator mit der Eigenschaft $\overline{\text{Bi}A} = \mathcal{H}_2$. Dann ist der lineare Operator $AA^* : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2$ stetig und injektiv mit $\overline{\text{Bi}(AA^*)} = \mathcal{H}_2$ und der zugehörige inverse Operator

$$(AA^*)^{-1} : \text{Bi}(AA^*) \subseteq \mathcal{H}_2 \longrightarrow \mathcal{H}_2$$

selbstadjungiert.

Erklärung. Siehe WERNER (2011), Lemma VII.2.12 und DENK (2012), Lemma 2.15. ◇

Vorbemerkung. Ein symmetrischer und halbbeschränkter Operator kann zu einem selbstadjungierten Operator erweitert werden; dieser Operator wird als Friedrichs-Erweiterung bezeichnet.

Resultat (Friedrichs-Erweiterung). Es bezeichne $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ einen dicht definierten symmetrischen und halbbeschränkten Operator mit zugehöriger Konstante $C \in \mathbb{R}$. Dann existiert eine selbstadjungierte Erweiterung von A ; diese ist ebenfalls ein halbbeschränkter Operator mit Konstante C .

Erklärung. Siehe WERNER (2011), Satz VII.2.11 und DENK (2012), Satz 2.16. \diamond

Vorbemerkung. Störungsergebnisse sind wesentliche Hilfsmittel zur Behandlung einer Summe von Operatoren; betrachtet man beispielsweise einen selbstadjungierten Differentialoperator zweiter Ordnung wie den Laplace-Operator

$$\Delta : H^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}),$$

so erlaubt der Störungssatz von Rellich bzw. das Kriterium von Kato es, einen symmetrischen Differentialoperator erster Ordnung oder einen Multiplikationsoperator als Störung aufzufassen.

Resultat (Störungssatz von Rellich, Kriterium von Kato). Es bezeichne $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ einen selbstadjungierten und insbesondere dicht definierten Operator. Erfüllt ein symmetrischer Operator $B : D(B) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ die Bedingungen

$$D(A) \subseteq D(B), \quad \exists C \geq 0 \quad \exists \delta \in [0, 1) \quad \forall h \in D(A) : \quad \|Bh\|_{\mathcal{H}} \leq C \|h\|_{\mathcal{H}} + \delta \|Ah\|_{\mathcal{H}},$$

so ist die Summe der Operatoren selbstadjungiert

$$A + B : D(A + B) = D(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Erklärung. Siehe DENK (2012), Satz 3.15. Vergleiche auch WERNER (2011), Seite 390. \diamond

Kapitel 2

Lebesgue- und Sobolev-Räume

Inhalt. Im Folgenden wird an die Konstruktion und wesentliche Eigenschaften der Lebesgue-Räume erinnert; weiters werden Sobolev-Räume mittels der verallgemeinerten Ableitung einer Funktion eingeführt. Die Ungleichung von Poincaré ermöglicht die Abschätzung der L^2 -Norm einer Funktion durch Sobolev-Normen.

Überblick.

- Konstruktion der Lebesgue-Räume, Vollständigkeit, Separabilität und Reflexivität
- Verallgemeinerte Ableitung
Sobolev-Räume
Äquivalente Norm auf $H^2(\mathbb{R}^d)$
- Ungleichung von Poincaré–Friedrichs
Folgerung mittels Interpolationsabschätzung

2.1 Lebesgue-Räume

Vorbemerkung. Man beachte, daß die Erweiterung des bekannten Falles einer reellwertigen Funktion $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ auf eine komplexwertige Funktion $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ auf der Betrachtung von Real- und Imaginärteil beruht.

Lebesgue-Räume. Betrachtet wird der euklidische Raum versehen mit der Borel- σ -Algebra und das Lebesgue-Maß.

- (i) *Konstruktion.* Für einen Exponenten $p \in [1, \infty)$ bzw. $p = \infty$ und eine Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ bezeichnet

$$\mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ meßbar und } \int_{\Omega} |f(x)|^p dx < \infty \right\}, \quad p \in [1, \infty),$$

$$\mathcal{L}^{\infty}(\Omega, \mathbb{C}) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ meßbar und } \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |f(x)| < \infty \right\},$$

den reellen Vektorraum der p -fach integrierbaren bzw. im Wesentlichen (d.h. bis auf Nullmengen) beschränkten reellwertigen Funktionen. Die Funktion

$$|\cdot|_{\mathcal{L}^p} : \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : f \mapsto |f|_{\mathcal{L}^p} = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \quad p \in [1, \infty),$$

$$|\cdot|_{\mathcal{L}^{\infty}} : \mathcal{L}^{\infty}(\Omega, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : f \mapsto |f|_{\mathcal{L}^{\infty}} = \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |f(x)|,$$

erfüllt die Eigenschaften positiv-semidefinit, homogen und subadditiv (Herleitung der Dreiecksungleichung bzw. Minkowski-Ungleichung mittels der Hölder-Ungleichung)

$$\forall f \in \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) : \quad |f|_{\mathcal{L}^p} \geq 0,$$

$$\forall c \in \mathbb{C} \quad \forall f \in \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) : \quad |cf|_{\mathcal{L}^p} = |c| |f|_{\mathcal{L}^p},$$

$$\forall f_1, f_2 \in \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) : \quad |f_1 + f_2|_{\mathcal{L}^p} \leq |f_1|_{\mathcal{L}^p} + |f_2|_{\mathcal{L}^p},$$

und definiert somit eine Halbnorm auf $\mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C})$. Um einen normierten Raum zu erhalten, identifiziert man Funktionen, die fast überall übereinstimmen, und geht auf Äquivalenzklassen und den zugehörigen Quotientenraum über

$$\forall f_1, f_2 \in \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) : \quad ([f_1] = [f_2]) \iff f_1 - f_2 = 0 \text{ fast überall),}$$

$$L^p(\Omega, \mathbb{C}) = \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) / \{f \in \mathcal{L}^p(\Omega, \mathbb{C}) : |f|_{\mathcal{L}^p} = 0\}.$$

Die Werte der mittels der \mathcal{L}^p -Halbnorm definierten Funktion

$$\|\cdot\|_{L^p} : L^p(\Omega, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : [f] \mapsto \|[f]\|_{L^p} = |f|_{\mathcal{L}^p}$$

sind unabhängig vom gewählten Repräsentanten; die Funktion $\|\cdot\|_{L^p}$ erfüllt die Normeigenschaften und ist insbesondere positiv-definit

$$\forall f \in L^p(\Omega, \mathbb{C}) : \quad \|f\|_{L^p} = 0 \iff f = 0.$$

Insgesamt folgt daraus, daß die Lebesgue-Räume normierte Räume sind

$$p \in [1, \infty) : \quad (L^p(\Omega, \mathbb{C}), \|\cdot\|_{L^p}).$$

- (ii) *Eigenschaften.* Für jeden Exponenten $p \in [1, \infty]$ ist der zugehörige Lebesgue-Raum $(L^p(\Omega, \mathbb{C}), \|\cdot\|_{L^p})$ vollständig und bildet daher einen Banach-Raum; im Spezialfall $p = 2$ ergibt sich ein Hilbert-Raum $(L^2(\Omega, \mathbb{C}), (\cdot|\cdot)_{L^2}, \|\cdot\|_{L^2})$

$$f_1, f_2 \in L^2(\Omega, \mathbb{C}) : \quad (f_1|f_2)_{L^2} = \int_{\Omega} f_1(x) \overline{f_2(x)} dx.$$

Da Ω ein separabler Maßraum¹ ist, führt der Lebesgue-Raum $L^p(\Omega, \mathbb{C})$ für Exponenten $p \in [1, \infty)$ auf einen separablen Banachraum; der Banachraum $L^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ ist im Allgemeinen nicht separabel. Für jeden Exponenten $p \in (1, \infty)$ ist der zugehörige Lebesgue-Raum reflexiv;² dies folgt aus dem Resultat, daß die Funktion

$$p, p^* \in (1, \infty), \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{p^*} = 1 : \quad L^{p^*}(\Omega, \mathbb{C}) \longrightarrow (L^p(\Omega, \mathbb{C}))^* : f \longmapsto (f|\cdot)_{L^2}$$

ein isometrischer Isomorphismus ist und somit die Identifikation

$$p, p^* \in (1, \infty), \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{p^*} = 1 : \quad (L^p(\Omega, \mathbb{C}))^* \cong L^{p^*}(\Omega, \mathbb{C})$$

gerechtfertigt ist. Im Gegensatz dazu sind die Lebesgue-Räume $L^1(\Omega, \mathbb{C})$ und $L^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ im Allgemeinen nicht reflexiv.

¹*Separabilität.* Ein Maßraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ heißt separabel, wenn die zugehörige σ -Algebra \mathcal{A} durch abzählbar viele Mengen erzeugt wird. Der euklidische Raum $\Omega = \mathbb{R}^d$ versehen mit der Borel- σ -Algebra ist separabel, da die Borel- σ -Algebra durch die kartesischen Produkte offener Intervalle mit rationalen Endpunkten erzeugt wird

$$\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) = \sigma\left(\left\{\prod_{j=1}^d (a_j, b_j) \subset \mathbb{R} : a_j, b_j \in \mathbb{Q}, j \in \{1, \dots, d\}\right\}\right).$$

²*Reflexivität.* Für einen normierten Raum $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ bildet der zugehörige Dualraum einen Banach-Raum

$$\mathcal{X}^* = \{x^* : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{C} \text{ stetig}\}, \quad \|x^*\|_{\mathcal{X}^*} = \sup_{\|x\|_{\mathcal{X}}=1} |x^*(x)|.$$

Mittels der stetigen und linearen Isometrie (insbesondere injektive Funktion)

$$\mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{X}^{**} : x \longmapsto [x^* \mapsto x^*(x)]$$

ergibt sich die Einbettung $\mathcal{X} \subseteq \mathcal{X}^{**}$; in Situationen, wo diese Funktion zusätzlich surjektiv und somit ein isometrischer Isomorphismus ist, heißt der normierte Raum \mathcal{X} reflexiv (Identifikation mittels Isomorphismus)

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}^{**}.$$

Aus dem Darstellungssatz von Riesz folgt, daß jeder Hilbert-Raum reflexiv ist.

2.2 Sobolev-Räume

Vorbemerkung. Bei der Modellierung quantenmechanischer Systeme sind Ortsoperator und Impulsoperator wesentlich

$$Q : D(Q) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : x \mapsto x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})\} \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto x\psi(x)],$$

$$P : D(P) = H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto -i\hbar \partial_x \psi;$$

die Erweiterung auf drei Raumdimensionen erfolgt komponentenweise. Der Sobolev-Raum $H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ und allgemeiner $H^1(\Omega, \mathbb{C})$ für $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ wird mit Hilfe der verallgemeinerten Ableitung einer Funktion erklärt.

Verallgemeinerte Ableitung.

- (i) Für ein offenes Intervall $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ bezeichne $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ den Raum der Testfunktionen, d.h. den \mathbb{C} -Vektorraum der beliebig oft differenzierbaren komplexwertigen Funktionen mit kompaktem Träger

$$\mathcal{C}_0^\infty(\Omega, \mathbb{C}) = \{f \in \mathcal{C}^\infty(\Omega, \mathbb{C}) : \text{supp } f = \overline{\{x \in \Omega : f(x) \neq 0\}} \text{ kompakt}\}.$$

Die verallgemeinerte bzw. schwache Ableitung $f' \in L^2(\Omega, \mathbb{C})$ einer Funktion $f \in L^2(\Omega, \mathbb{C})$ ist durch die Relation (partielle Integration, Randterme verschwinden aufgrund der Eigenschaften der Testfunktionen)

$$\forall g \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega, \mathbb{C}) : \int_{\Omega} f(x) g'(x) dx = - \int_{\Omega} f'(x) g(x) dx$$

definiert.

- (ii) Für eine Funktion $f \in L^2(\Omega, \mathbb{C})$ mit $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ gelten die entsprechenden Relationen für die schwachen partiellen Ableitungen.

Sobolev-Räume.

- (i) Für ein offenes Intervall $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ umfaßt der Sobolev-Raum $H^1(\Omega, \mathbb{C})$ alle komplexwertigen Funktionen $f : \Omega \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, deren verallgemeinerte Ableitung existiert

$$H^1(\Omega, \mathbb{C}) = \{f \in L^2(\Omega, \mathbb{C}) : f' \in L^2(\Omega, \mathbb{C})\};$$

versehen mit dem kanonischen Skalarprodukt und der induzierten Norm bildet der Sobolev-Raum einen Hilbert-Raum

$$(f|g)_{H^1} = (f|g)_{L^2} + (f'|g')_{L^2} = \int_{\Omega} f(\xi) \overline{g(\xi)} d\xi + \int_{\Omega} f'(\xi) \overline{g'(\xi)} d\xi, \quad f, g \in H^1(\Omega, \mathbb{C}),$$

$$\|f\|_{H^1} = \sqrt{\|f\|_{L^2}^2 + \|f'\|_{L^2}^2}, \quad f \in H^1(\Omega, \mathbb{C}).$$

- (ii) Allgemeiner umfaßt der Sobolev-Raum $H^m(\Omega, \mathbb{C})$ für $m \in \mathbb{N}$ und eine (reguläre) offene Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ sämtliche m -mal schwach differenzierbaren Funktionen, genauer, sämtliche Funktionen, deren partielle Ableitungen der Ordnung m im schwachen Sinn existieren. Insbesondere ist der Sobolev-Raum $H^2(\Omega, \mathbb{C})$ der zweimal schwach differenzierbaren Funktionen mit der Norm (wie üblich bezeichne $k = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{N}^d$ und $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{N}^d$, Schreibweise $\partial_x^k = \partial_{x_1}^{k_1} \dots \partial_{x_d}^{k_d}$ für partielle Ableitung der Ordnung $|k| = k_1 + \dots + k_d$)

$$H^2(\Omega, \mathbb{C}) = \left\{ f \in L^2(\Omega, \mathbb{C}) : \text{für } k \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d \text{ mit } |k| \in \{0, 1, 2\} \text{ gilt } \partial_x^k f \in L^2(\Omega, \mathbb{C}) \right\},$$

$$\|f\|_{H^2} = \sqrt{\sum_{\substack{k \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d \\ |k| \in \{0, 1, 2\}}} \|\partial_x^k f\|_{L^2}^2}, \quad f \in H^2(\Omega, \mathbb{C}),$$

versehen.

Äquivalenz von Normen auf Sobolev-Raum zweiter Ordnung.

- (i) Als selbstadjungierter Operator ist der Laplace-Operator insbesondere ein abgeschlossener Operator zwischen Banach-Räumen³

$$\Delta : H^2(\mathbb{R}^d) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^d).$$

Frühere Überlegungen implizieren somit, daß der Definitionsbereich $H^2(\mathbb{R}^d)$ versehen mit der Graphen-Norm

$$\|f\|_{D(\Delta)} = \|f\|_{L^2} + \|\Delta f\|_{L^2}, \quad f \in H^2(\mathbb{R}^d),$$

einen Banach-Raum bildet.

- (ii) Die folgende Abschätzung mit Konstanten $C_1, C_2 > 0$ besagt, daß die durch den Laplace-Operator definierte Norm auf eine zur H^2 -Norm äquivalente Norm führt⁴

$$C_1 \|f\|_{H^2} \leq \sqrt{\|f\|_{L^2}^2 + \|\Delta f\|_{L^2}^2} \leq C_2 \|f\|_{H^2}, \quad f \in H^2(\mathbb{R}^d).$$

³Bemerkung. Spätere Überlegungen zeigen die Selbstadjungiertheit des Impulsoperators auf $H^1(\mathbb{R})$; die Erweiterung auf $H^1(\mathbb{R}^d)$ erfolgt komponentenweise. Da der adjungierte Operator abgeschlossen ist, ist ein selbstadjungierter Operator insbesondere abgeschlossen.

⁴Bemerkung. Man beachte, daß die Graphen-Norm zur angegebenen Norm äquivalent ist; dies folgt aus den Abschätzungen (für $a, b \in \mathbb{R}_{\geq 0}$)

$$\sqrt{a^2 + b^2} \leq \sqrt{a^2 + 2ab + b^2} = a + b, \quad a + b = \sqrt{(a+b)^2} = \sqrt{a^2 + 2ab + b^2} \leq \sqrt{2} \sqrt{a^2 + b^2},$$

$$\sqrt{\|f\|_{L^2}^2 + \|\Delta f\|_{L^2}^2} \leq \|f\|_{L^2} + \|\Delta f\|_{L^2} \leq \sqrt{2} \sqrt{\|f\|_{L^2}^2 + \|\Delta f\|_{L^2}^2}, \quad f \in H^2(\mathbb{R}^d).$$

Erklärung. Zur Herleitung der Relation wird verwendet, daß die Fourier-Transformation ein isometrischer Isomorphismus auf $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ ist

$$\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2}, \quad f \in L^2(\mathbb{R}^d),$$

und partielle Ableitungen Multiplikationen entsprechen (wobei $j \in \{1, \dots, d\}$)

$$(\mathcal{F} \partial_{x_j} f)(\kappa) = i\kappa_j (\mathcal{F} f)(\kappa), \quad \kappa \in \mathbb{R}^d, \quad \partial_{x_j} f \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

Zur Vereinfachung wird der Spezialfall $d = 2$ betrachtet. Wegen (verwende dieselben Bezeichnungen für $\kappa_j \in \mathbb{R}$ und den zugehörigen Multiplikationsoperator, setze $g = \mathcal{F} f$)

$$\begin{aligned} \|f\|_{H^2}^2 &= \|f\|_{L^2}^2 + \|\partial_{x_1} f\|_{L^2}^2 + \|\partial_{x_2} f\|_{L^2}^2 + \|\partial_{x_1}^2 f\|_{L^2}^2 + \|\partial_{x_1 x_2} f\|_{L^2}^2 + \|\partial_{x_2}^2 f\|_{L^2}^2 \\ &= \|g\|_{L^2}^2 + \|\kappa_1 g\|_{L^2}^2 + \|\kappa_2 g\|_{L^2}^2 + \|\kappa_1^2 g\|_{L^2}^2 + \|\kappa_1 \kappa_2 g\|_{L^2}^2 + \|\kappa_2^2 g\|_{L^2}^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} (1 + \kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_1^4 + \kappa_1^2 \kappa_2^2 + \kappa_2^4) |g(\kappa)|^2 d\kappa, \\ \|f\|_{L^2}^2 + \|\Delta f\|_{L^2}^2 &= \|f\|_{L^2}^2 + \|\partial_{x_1}^2 f + \partial_{x_2}^2 f\|_{L^2}^2 \\ &= \|g\|_{L^2}^2 + \|(\kappa_1^2 + \kappa_2^2) g\|_{L^2}^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} (1 + (\kappa_1^2 + \kappa_2^2)^2) |g(\kappa)|^2 d\kappa, \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} (1 + \kappa_1^4 + 2\kappa_1^2 \kappa_2^2 + \kappa_2^4) |g(\kappa)|^2 d\kappa, \end{aligned}$$

reicht es aus, Abschätzungen der Form

$$\begin{aligned} 1 + \kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_1^4 + \kappa_1^2 \kappa_2^2 + \kappa_2^4 &\leq C (1 + \kappa_1^4 + 2\kappa_1^2 \kappa_2^2 + \kappa_2^4), \\ 1 + \kappa_1^4 + 2\kappa_1^2 \kappa_2^2 + \kappa_2^4 &\leq C (1 + \kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_1^4 + \kappa_1^2 \kappa_2^2 + \kappa_2^4), \end{aligned}$$

zu zeigen; die erste Relation folgt durch Unterscheidung der Fälle

$$\begin{cases} \kappa_j \leq 1 & \implies \kappa_j^2 \leq 1, \\ \kappa_j \geq 1 & \implies \kappa_j^2 \leq \kappa_j^4. \end{cases}$$

während die zweite Relation offensichtlich richtig ist. ◇

2.3 Ungleichung von Poincaré–Friedrichs

Vorbemerkungen.

(i) Für $f \in H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ bezeichnet (wobei $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$)

$$\|\nabla f\|_{L^2} = \sqrt{\sum_{k=1}^d \|\partial_{x_k} f\|_{L^2}^2}.$$

(ii) Die Ungleichung von Poincaré–Friedrichs erlaubt die Abschätzung der Lebesgue-Norm einer Funktion durch die Lebesgue-Norm des Gradienten der Funktion. Beispielsweise gilt für jedes reguläre und beschränkte Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ die Relation⁵

$$\|f\|_{L^2} \leq C \|\nabla f\|_{L^2}, \quad f \in H_0^1(\Omega, \mathbb{C});$$

die Konstante $C > 0$ hängt vom betrachteten Gebiet ab und kann insbesondere durch die Seitenlänge eines Würfels, welcher das betrachtete Gebiet umfaßt, abgeschätzt werden.

(iii) Die im Folgenden angegebene Variante der Ungleichung von Poincaré–Friedrichs wird benötigt, um den Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms (normalisierte Formulierung)

$$H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto \left[x \mapsto -\Delta \psi(x) - \frac{1}{\|x\|} \psi(x) \right],$$

als Störung des Hamilton-Operators des freien Teilchens

$$H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto \left[x \mapsto -\Delta \psi(x) \right],$$

auffassen zu können.

⁵*Spezialfall.* Zur Illustration wird die Ungleichung von Poincaré–Friedrichs für den eindimensionalen Fall und ein beschränktes Intervall $\Omega = (a, b) \subset \mathbb{R}$ hergeleitet. Da der Raum der Testfunktionen $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega, \mathbb{R})$ im Sobolev-Raum $H_0^1(\Omega, \mathbb{R})$ dicht liegt, reicht es aus, eine reguläre Funktion $f \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega, \mathbb{R})$ zu betrachten. Die Behauptung folgt aus $f(a) = 0$ und mittels Anwendung der Ungleichung von Cauchy–Schwarz (für $x \in [a, b]$)

$$\begin{aligned} f(x) &= f(a) + \int_a^x f'(\xi) \, d\xi = \int_a^x f'(\xi) \, d\xi, \\ \int_a^x f'(\xi) \, d\xi &= \int_a^x 1 \cdot f'(\xi) \, d\xi \leq \sqrt{\int_a^x 1^2 \, d\xi} \sqrt{\int_a^x (f'(\xi))^2 \, d\xi} \leq \sqrt{b-a} \sqrt{\int_a^b (f'(\xi))^2 \, d\xi}, \\ (f(x))^2 &= \left(\int_a^x f'(\xi) \, d\xi \right)^2 \leq (b-a) \int_a^b (f'(\xi))^2 \, d\xi, \\ \int_a^b (f(x))^2 \, dx &\leq (b-a)^2 \int_a^b (f'(\xi))^2 \, d\xi. \end{aligned}$$

Man beachte, daß die Voraussetzung eines beschränkten Gebietes wesentlich ist. Die Erweiterung auf unbeschränkte Gebiete wird im Folgenden untersucht.

- (iv) Die Herleitung des Resultates beruht auf den folgenden Überlegungen für eine Testfunktion $h \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ (beachte $h(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$, Vertauschung der Integrationsreihenfolge, Abschätzung mittels Ungleichung von Cauchy–Schwarz)

$$\begin{aligned} (h(r))^2 &= -(h(\varrho))^2 \Big|_{\varrho=r}^\infty = -2 \int_r^\infty h(\varrho) h'(\varrho) \, d\varrho, \\ J &= \int_0^\infty (h(r))^2 \, dr = -2 \int_0^\infty \int_r^\infty h(\varrho) h'(\varrho) \, d\varrho \, dr = -2 \int_0^\infty \left(\int_0^\varrho 1 \, dr \right) h(\varrho) h'(\varrho) \, d\varrho, \\ J &= -2 \int_0^\infty h(\varrho) \varrho h'(\varrho) \, d\varrho \leq 2 \sqrt{J} \sqrt{\int_0^\infty (\varrho h'(\varrho))^2 \, d\varrho}. \end{aligned}$$

Insgesamt zeigt dies die Relation

$$\int_0^\infty (h(r))^2 \, dr \leq 4 \int_0^\infty (\varrho h'(\varrho))^2 \, d\varrho.$$

Resultat (Ungleichung von Poincaré–Friedrichs).

- (i) Es sei $f \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$. Die durch

$$g : \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \longrightarrow \mathbb{C} : x \longmapsto g(x) = \frac{1}{\|x\|} f(x)$$

definierte Funktion erfüllt $g \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, und es gilt die Abschätzung (mit $C = 2$)

$$\|g\|_{L^2} \leq C \|\nabla f\|_{L^2}.$$

Erklärung. Aufgrund der Dichtheit der Testfunktionen $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \subset H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, reicht es aus, die Behauptung für $f \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ zu zeigen. Durch separate Betrachtung von Realteil und Imaginärteil kann außerdem $f \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ angenommen werden. Man beachte, daß die Funktion

$$\mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \longrightarrow \mathbb{R} : x \longmapsto \frac{1}{\|x\|}$$

bei $x = 0$ integrierbar ist und die Einführung von Kugelkoordinaten

$$\Phi : (0, \infty) \times (0, 2\pi) \times (0, \pi) \longrightarrow \mathbb{R}^3 : \begin{pmatrix} r \\ \varphi \\ \vartheta \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = r s(\varphi, \vartheta) = r \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \varphi \sin \vartheta \\ \cos \vartheta \end{pmatrix},$$

$$\det \Phi'(r, \varphi, \vartheta) = r^2 \sin \vartheta,$$

nahe legt; für die folgenden Überlegungen spielt die Definition von $s(\varphi, \vartheta)$ keine Rolle. Die Integraltransformation führt auf die Identität

$$\begin{aligned} \|g\|_{L^2}^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} (g(x, y, z))^2 \, d(x, y, z) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{x^2 + y^2 + z^2} (f(x, y, z))^2 \, d(x, y, z) \\ &= \int_{(0, 2\pi) \times (0, \pi)} \sin \vartheta \int_0^\infty (f(rs(\varphi, \vartheta)))^2 \, dr \, d(\varphi, \vartheta); \end{aligned}$$

durch Anwendung der zuvor angegebenen Abschätzung erhält man (Ungleichung von Cauchy-Schwarz, beachte $\|s(\varphi, \vartheta)\| = 1$)

$$\begin{aligned} h(r) &= f(r s(\varphi, \vartheta)), & h'(r) &= \nabla f(r s(\varphi, \vartheta)) \cdot s(\varphi, \vartheta), & (h'(r))^2 &\leq \|\nabla f(r s(\varphi, \vartheta))\|^2, \\ \int_0^\infty (f(r s(\varphi, \vartheta)))^2 dr &= \int_0^\infty (h(r))^2 dr \leq 4 \int_0^\infty (r h'(r))^2 dr \leq 4 \int_0^\infty r^2 \|\nabla f(r s(\varphi, \vartheta))\|^2 dr, \\ \|g\|_{L^2}^2 &\leq 4 \int_0^\infty \int_{(0, 2\pi) \times (0, \pi)} r^2 \sin \vartheta \|\nabla f(r s(\varphi, \vartheta))\|^2 d(r, \varphi, \vartheta). \end{aligned}$$

Die Rücktransformation auf kartesische Koordinaten

$$\|g\|_{L^2}^2 \leq 4 \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla f(x, y, z)\|^2 d(x, y, z)$$

ergibt die gewünschte Behauptung. \diamond

- (ii) Gilt zusätzlich $f \in H^2(\mathbb{R}^3)$, so existiert zu jeder positiven Zahl $\varepsilon > 0$ eine Konstante $C_\varepsilon > 0$, sodaß die folgende Abschätzung gültig ist

$$\|g\|_{L^2} \leq \sqrt{C_\varepsilon \|f\|_{L^2}^2 + \varepsilon \|f\|_{H^2}^2}.$$

Erklärung. Mittels der Interpolationsabschätzung (mit $X_0 = L^2(\mathbb{R}^3)$ sowie $X_1 = H^2(\mathbb{R}^3)$ und $\mu = \frac{1}{2}$, generische Konstante $C > 0$, ohne Begründung)

$$\begin{aligned} \|x\|_{X_\mu} &\leq C \|x\|_{X_0}^{1-\mu} \|x\|_{X_1}^\mu, & x &\in X_1, \\ \|f\|_{H^1}^2 &\leq C \|f\|_{L^2} \|f\|_{H^2}, & f &\in H^2(\mathbb{R}^3), \end{aligned}$$

sowie der Ungleichung von Young (setze $a = \sqrt{2\varepsilon} \alpha$ sowie $b = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \beta$)

$$\begin{aligned} 0 \leq (a - b)^2 &= a^2 - 2ab + b^2 \iff ab \leq \frac{1}{2}(a^2 + b^2), & a, b &\in \mathbb{R}, \\ \alpha \beta &= \frac{1}{2} \left((\sqrt{2\varepsilon} \alpha)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} \beta \right)^2 \right) = \varepsilon \alpha^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \beta^2, & \alpha, \beta &\in \mathbb{R}, \end{aligned}$$

folgt die Abschätzung aus der ersten Relation (mit $\alpha = \|f\|_{H^2}$ und $\beta = C \|f\|_{L^2}$)

$$\|g\|_{L^2}^2 \leq C \|\nabla f\|_{L^2}^2 \leq C \|f\|_{H^1}^2 \leq C \|f\|_{L^2} \|f\|_{H^2} \leq \varepsilon \|f\|_{H^2}^2 + \frac{C}{\varepsilon} \|f\|_{L^2}^2.$$

Insgesamt zeigt dies die Behauptung. \diamond

Kapitel 3

Spektral-Maß und unitäre Gruppe

Voraussetzung. Es bezeichne $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ einen separablen komplexen Hilbert-Raum.

Inhalt. Ein Resultat der Funktionalanalysis besagt, daß für einen auf einem Hilbert-Raum definierten selbstadjungierten Operator ein eindeutig bestimmtes Spektral-Maß

$$A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}, \quad M : \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow L(\mathcal{H}) : S \longmapsto M(S),$$

existiert. Mit Hilfe dieses Spektral-Maßes ergibt sich folgende Darstellung des Operators

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda) : D(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H};$$

der zugehörige Evolutionsoperator ist durch den entsprechenden Funktionalkalkül definiert und bildet eine stark-stetige unitäre Gruppe

$$i u'(t) = A u(t), \quad u(t) = e^{-itA} u(0), \quad e^{-itA} = \int_{\sigma(A)} e^{-it\lambda} \, dM(\lambda) : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Überblick.

- Resolventenmenge (offene Menge)
Spektrum (abgeschlossene Menge), Punktspektrum, Kontinuierliches Spektrum, Restspektrum, Eigenwert und zugehöriger Eigenraum
Eigenschaften des Spektrums eines selbstadjungierten Operators
Essentielles und diskretes Spektrum
- σ -Algebra, Borel- σ -Algebra, Maß
Spektral-Maß, Zugehöriges Maß
Integral bezüglich eines Spektral-Maßes

Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren, Funktionalkalkül
Resolution der Identität, Polynomfunktionen, Kommutativität
Resultat zu Punktspektrum

- Evolutionsoperator
Stark-stetige unitäre Gruppe, Folgerungen
Eigenschaften des Evolutionsoperators
Satz von Stone
- Kompatibilität von selbstadjungierten Operatoren

3.1 Eigenschaften des Spektrums

Vorbemerkung. Bei einem linearen Operator unterscheidet man Punktspektrum, kontinuierliches Spektrum und Restspektrum. Vergleiche WERNER (2011), Definition VII.2.14, anschließende Bemerkung und Satz VII.2.15.

Spektrum. Es bezeichne $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ einen abgeschlossenen dicht definierten linearen Operator.¹

(i) *Resolventenmenge.* Die Resolventenmenge von A ist durch

$$\rho(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} : \text{der lineare Operator } A - \lambda I : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist bijektiv und} \\ \text{die Inverse } (A - \lambda I)^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist ein stetiger linearer Operator} \}$$

definiert; aufgrund der vorausgesetzten Abgeschlossenheit von A folgt aus der Bijektivität des linearen Operators $A - \lambda I : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ für $\lambda \in \rho(A)$ die Stetigkeit der zugehörigen Resolvente $(A - \lambda I)^{-1} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Die Resolventenmenge ist eine offene Menge.

(ii) *Spektrum.* Das Spektrum von A ist das Komplement der Resolventenmenge

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

und somit eine abgeschlossene Menge. Man unterscheidet das Punktspektrum von A , d.h. die Menge der Eigenwerte von A

$$\sigma_p(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} : \text{der lineare Operator } A - \lambda I : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist nicht injektiv} \},$$

das kontinuierliche Spektrum von A

$$\sigma_c(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} : \text{der lineare Operator } A - \lambda I : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist injektiv jedoch} \\ \text{nicht surjektiv } \text{Bi}(A - \lambda I) \neq \mathcal{H} \text{ mit dichtem Bild } \overline{\text{Bi}(A - \lambda I)} = \mathcal{H} \},$$

und das Restspektrum von A

$$\sigma_r(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} : \text{der lineare Operator } A - \lambda I : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist injektiv jedoch} \\ \text{nicht surjektiv } \text{Bi}(A - \lambda I) \neq \mathcal{H} \text{ ohne dichtes Bild } \overline{\text{Bi}(A - \lambda I)} \neq \mathcal{H} \}.$$

Für einen Eigenwert $\lambda \in \sigma_p$ ist der zugehörige Eigenraum durch $\text{Ke}(A - \lambda I)$ gegeben.

¹*Bemerkung.* Da für einen unbeschränkten nicht abgeschlossenen Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ die Resolventenmenge leer ist und das Spektrum somit mit den komplexen Zahlen übereinstimmt

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

werden nur abgeschlossene Operatoren betrachtet.

Vorbemerkung. Betrachtet man speziell einen selbstadjungierten Operator, so ist das Spektrum reell; weiters stehen die zu verschiedenen Eigenwerten gehörigen Eigenfunktionen aufeinander orthogonal.²

Spektrum eines selbstadjungierten Operators. Es bezeichne $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ einen selbstadjungierten Operator.

- (i) Das Restspektrum ist leer und die Vereinigung von Punktspektrum sowie kontinuierlichem Spektrum eine Teilmenge der reellen Zahlen

$$\sigma_r(A) = \emptyset, \quad \sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \subseteq \mathbb{R}.$$

Erklärung. Vergleiche auch WERNER (2011), Satz VII.2.16. ◇

- (ii) Falls $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ zwei voneinander verschiedene Eigenwerte mit zugehörigen Eigenfunktionen $h_1, h_2 \in \mathcal{H}$ sind

$$A h_1 = \lambda_1 h_1, \quad A h_2 = \lambda_2 h_2,$$

so sind die Eigenfunktionen zueinander orthogonal

$$\lambda_1 \neq \lambda_2 \implies (h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} = 0.$$

Erklärung. Die Identität (verwende $\lambda_2 \in \mathbb{R}$ und $A^* = A$)

$$\begin{aligned} \lambda_1 (h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} &= (\lambda_1 h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} = (A h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} = (h_1 | A^* h_2)_{\mathcal{H}} = (h_1 | A h_2)_{\mathcal{H}} = (h_1 | \lambda_2 h_2)_{\mathcal{H}} \\ &= \lambda_2 (h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} \\ \implies (\lambda_1 - \lambda_2) (h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} &= 0 \implies (h_1 | h_2)_{\mathcal{H}} = 0 \end{aligned}$$

zeigt die Orthogonalität von Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten. ◇

Vorbemerkung. Das diskrete Spektrum eines selbstadjungierten Operators ist durch alle Eigenwerte endlicher Vielfachheit gegeben; das Komplement des diskreten Spektrums wird als essentielles Spektrum bezeichnet. Man beachte, daß die Begriffe essentielles Spektrum sowie diskretes Spektrum für abgeschlossene Operatoren nicht einheitlich definiert ist.

Essentielles und diskretes Spektrum. Das essentielle Spektrum eines selbstadjungierten Operators $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ umfaßt das kontinuierliche Spektrum sowie sämtliche Eigenwerte unendlicher Vielfachheit

$$\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_c \cup \{\lambda \in \sigma_p(A) : \dim \text{Ke}(A - \lambda I)^{-1} = \infty\};$$

das Komplement des essentiellen Spektrums wird als diskretes Spektrum bezeichnet

$$\sigma_d(A) = \sigma(A) \setminus \sigma_{\text{ess}}(A) = \{\lambda \in \sigma_p(A) : \dim \text{Ke}(A - \lambda I)^{-1} < \infty\}.$$

Siehe DENK (2012), Definition 3.19 (im Zusammenhang mit der Charakterisierung der Spektraleigenschaften des Hamilton-Operators des Wasserstoffatoms).

²*Bemerkung.* In Hinblick auf quantenmechanische Anwendungen wird anstelle der Bezeichnung Eigenvektor die Bezeichnung Eigenfunktion verwendet.

3.2 Spektral-Maß und Spektralsatz

Erinnerung (σ -Algebra). Eine σ -Algebra über einer nichtleeren Grundmenge $\Omega \neq \emptyset$ ist eine Teilmenge der Potenzmenge $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{P}(\Omega)$ mit folgenden Eigenschaften.

(i) *Grundmenge.* Es gilt

$$\Omega \in \mathcal{S}.$$

(ii) *Komplement.* Aus $S \in \mathcal{S}$ folgt

$$\Omega \setminus S \in \mathcal{S}.$$

(iii) *Abzählbare Vereinigung.* Aus $S_k \in \mathcal{S}$ für $k \in \mathbb{N}$ folgt

$$\bigcup_{k=1}^{\infty} S_k \in \mathcal{S}.$$

Das Paar (Ω, \mathcal{S}) heißt meßbarer Raum.

Erinnerung (Borel- σ -Algebra). Für einen topologischen Raum $\Omega \neq \emptyset$ bezeichnet $\mathcal{B}(\Omega)$ die zugehörige Borel- σ -Algebra, d.h. die kleinste σ -Algebra, welche alle offenen Mengen $S \subseteq \Omega$ enthält. Für die Menge der reellen Zahlen $\Omega = \mathbb{R}$ wird die zugehörige Topologie durch die offenen Intervalle mit rationalen Endpunkten definiert; die Borel- σ -Algebra $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ umfaßt insbesondere alle offenen und abgeschlossenen Intervalle.

Erinnerung (Maß). Es bezeichne (Ω, \mathcal{S}) einen meßbaren Raum. Ein Maß auf \mathcal{S} ist eine Funktion

$$\mu: \mathcal{S} \longrightarrow [0, \infty] : S \longmapsto \mu(S)$$

mit folgenden Eigenschaften.

(i) *Maß der leeren Menge.* Es gilt

$$\mu(\emptyset) = 0.$$

(ii) *σ -Additivität (Abzählbare Vereinigung).* Für eine Folge von paarweise disjunkten Mengen $(S_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $S_k \in \mathcal{S}$ gilt

$$\mu\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} S_k\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu(S_k).$$

Das Tripel $(\Omega, \mathcal{S}, \mu)$ bezeichnet man als Maßraum. Falls die Bedingung $\mu(\Omega) < \infty$ erfüllt ist, heißt das Maß endlich; gilt insbesondere

$$\mu(\Omega) = 1,$$

so heißt das Maß ein Wahrscheinlichkeitsmaß und das Tripel $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ ein Wahrscheinlichkeitsraum.

Spektral-Maß. Es bezeichne $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ eine abgeschlossene Teilmenge der reellen Zahlen, welche mit der Borel- σ -Algebra $\mathcal{B}(\Omega)$ versehen ist. Eine Funktion

$$M: \mathcal{B}(\Omega) \longrightarrow L(\mathcal{H}): S \longmapsto M(S), \quad M(S): \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}: h \longmapsto M(S)h,$$

welche einer Borel-Menge einen stetigen linearen Operator auf dem betrachteten Hilbert-Raum zuordnet, heißt ein Projektorwertiges Maß bzw. ein Spektral-Maß³ wenn folgende Bedingungen erfüllt sind.

(i) Jedes Bildelement definiert einen orthogonalen Projektionsoperator

$$\forall S \in \mathcal{B}(\Omega): \quad M(S) = (M(S))^2 = (M(S))^*: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

(ii) Es gelten die Identitäten⁴

$$M(\emptyset) = 0: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}: h \longmapsto 0, \quad M(\Omega) = I: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}: h \longmapsto h.$$

(iii) Für jede Familie $(S_k)_{k \in \mathbb{N}}$ von paarweise disjunkten Teilmengen $S_k \in \mathcal{B}(\Omega)$ für $k \in \mathbb{N}$ gilt

$$\forall h \in \mathcal{H}: \quad M\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} S_k\right)h = \sum_{k \in \mathbb{N}} M(S_k)h.$$

Zugehöriges Maß. Die Bezeichnung Spektral-Maß wird durch folgenden Überlegungen gerechtfertigt. Fixiert man ein Element $h \in \mathcal{H}$ und betrachtet die mittels des Spektral-Maßes definierte Funktion

$$\mu_h: \mathcal{B}(\Omega) \longrightarrow [0, \infty): S \longmapsto \mu_h(S) = (M(S)h|h)_{\mathcal{H}},$$

so ergibt sich ein endliches Maß mit der Eigenschaft

$$\mu_h(\Omega) = \|h\|_{\mathcal{H}}^2;$$

aus den Eigenschaften eines Spektral-Maßes folgt nämlich (verwende $M(S) = (M(S))^2$ sowie $M(S) = (M(S))^*$ und $M(\Omega) = I$)

$$\begin{aligned} \mu_h(S) &= (M(S)h|h)_{\mathcal{H}} = (M(S)M(S)h|h)_{\mathcal{H}} = (M(S)h|(M(S))^*h)_{\mathcal{H}} = (M(S)h|M(S)h)_{\mathcal{H}} \\ &= \|M(S)h\|_{\mathcal{H}}^2, \\ \mu_h(\Omega) &= \|h\|_{\mathcal{H}}^2. \end{aligned}$$

Insbesondere führen normierte Elemente auf Wahrscheinlichkeitsmaße

$$\forall h \in \mathcal{H} \text{ mit } \|h\|_{\mathcal{H}} = 1: \quad \mu_h(\Omega) = 1.$$

Für ein beliebiges Element $h \in \mathcal{H}$ sind die Maßeigenschaften von μ_h leicht nachzuprüfen.

³Bemerkung. Der Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren rechtfertigt die Bezeichnung Spektral-Maß.

⁴Bemerkung. Die erste Identität ist konsistent mit der Forderung

$$\forall h \in \mathcal{H}: \quad M(\emptyset)h = M(\emptyset \cup \emptyset)h = 2M(\emptyset)h.$$

(i) *Maß der leeren Menge.* Aus $M(\emptyset) = 0 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ folgt

$$\mu_h(\emptyset) = 0.$$

(ii) *σ -Additivität (Abzählbare Vereinigung).* Für zwei disjunkten Mengen $S_1, S_2 \in \mathcal{B}(\Omega)$ gilt (Definition von μ_h , verwende $M(S_1 \cup S_2)h = M(S_1)h + M(S_2)h$ und Additivität des Skalarproduktes)

$$\begin{aligned} \mu_h(S_1 \cup S_2) &= (M(S_1 \cup S_2)h|h)_{\mathcal{H}} = (M(S_1)h|h)_{\mathcal{H}} + (M(S_2)h|h)_{\mathcal{H}} \\ &= \mu_h(S_1) + \mu_h(S_2). \end{aligned}$$

Die Erweiterung auf eine Folge von paarweise disjunkten Mengen ist offensichtlich

$$\mu_h\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} S_k\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_h(S_k).$$

Vorbemerkung. Ein im Folgenden angegebenes Resultat zur Darstellung eines selbstadjungierten Operators bezüglich eines Spektral-Maßes bildet ein wesentliches Hilfsmittel für weitere Überlegungen

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda) : D(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Dazu wird zunächst das Integral einer meßbaren Funktion bezüglich eines Spektral-Maßes eingeführt.

Integral bezüglich eines Spektral-Maßes. Wie zuvor bezeichne $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ eine abgeschlossene Teilmenge der reellen Zahlen, $M : \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow L(\mathcal{H})$ ein Spektral-Maß auf dem betrachteten Hilbert-Raum und $\mu_h : \mathcal{B}(\Omega) \rightarrow [0, \infty)$ das zu $h \in \mathcal{H}$ gehörige Maß.

(i) *Definition für Stufenfunktion.* Für eine Stufenfunktion der Form (Linearkombination, komplexe Koeffizienten, charakteristische Funktionen meßbarer Mengen)

$$\begin{aligned} f : \Omega \longrightarrow \mathbb{C} : \omega \longrightarrow \sum_{k=1}^K c_k \chi_{S_k}(\omega), \\ c_k \in \mathbb{C}, \quad S_k \in \mathcal{B}(\Omega), \quad \chi_{S_k}(\omega) = \begin{cases} 1, & \omega \in S_k, \\ 0, & \omega \notin S_k, \end{cases} \quad k \in \{1, \dots, K\}, \end{aligned}$$

ist es naheliegend, das Integral bezüglich des Spektral-Maßes durch

$$\int_{\Omega} f(\omega) \, dM(\omega) = \sum_{k=1}^K c_k \int_{\Omega} \chi_{S_k}(\omega) \, dM(\omega) = \sum_{k=1}^K c_k M(S_k)$$

zu definieren; wegen $M(S_k) \in L(\mathcal{H})$ für $k \in \{1, \dots, K\}$ folgt

$$J(f) = \int_{\Omega} f(\omega) \, dM(\omega) \in L(\mathcal{H}).$$

(ii) *Erweiterung durch Approximation.* Für eine komplexwertige meßbare Funktion betrachtet man den Definitionsbereich

$$f : \Omega \longrightarrow \mathbb{C}, \quad D(J(f)) = \left\{ h \in \mathcal{H} : \int_{\Omega} |f(\omega)|^2 d\mu_h(\omega) < \infty \right\},$$

und verwendet, daß die Approximation durch Stufenfunktionen im folgenden Sinn gegeben ist

$$\forall h \in D(J(f)) \quad \exists (f_k)_{k \in \mathbb{N}} \text{ Folge von Stufenfunktionen mit } f_k : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ für } k \in \mathbb{N} : \\ f_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} f \text{ punktweise und } \int_{\Omega} |f_k(\omega) - f(\omega)|^2 d\mu_h(\omega) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0.$$

Das als Grenzwert definierte Integral bezüglich des Spektral-Maßes ist wohldefiniert

$$J(f) = \int_{\Omega} f(\omega) dM(\omega) : D(J(f)) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} : h \longmapsto \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f_k(\omega) dM(\omega) h$$

und führt auf einen normalen abgeschlossenen dicht definierten linearen Operator mit der Eigenschaft

$$\forall h \in D(J(f)) : \quad \left\| \int_{\Omega} f(\omega) dM(\omega) h \right\|_{\mathcal{H}}^2 = \int_{\Omega} |f(\omega)|^2 d\mu_h(\omega) = \int_{\Omega} |f(\omega)|^2 d\|M(\omega)h\|_{\mathcal{H}}^2.$$

(iii) *Spezialfall.* Betrachtet man eine reellwertige Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, so ist das Integral bezüglich des Spektral-Maßes ein selbstadjungierter Operator; insbesondere gilt dies für die Identität

$$f : \Omega \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : \omega \longmapsto \omega, \quad \int_{\Omega} \omega dM(\omega) : \left\{ h \in \mathcal{H} : \int_{\Omega} \omega^2 d\mu_h(\omega) < \infty \right\} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Erklärung. Vergleiche WERNER (2011), Satz VII.1.11 (für $f \in L^{\infty}(\Omega)$ eine im Wesentlichen beschränkte Funktion) und Bemerkungen ab Seite 358 (für allgemeineren Fall). \diamond

Resultat (Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren). Zu jedem selbstadjungierten Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ existiert ein eindeutig bestimmtes Spektral-Maß, welches die folgende Relation erfüllt

$$M : \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow L(\mathcal{H}), \quad A = \int_{\sigma(A)} \lambda dM(\lambda).$$

Für eine komplexwertige meßbare Funktion $f : \sigma(A) \rightarrow \mathbb{C}$ wird durch

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dM(\lambda) : D(f(A)) = \left\{ h \in \mathcal{H} : \int_{\sigma(A)} |f(\lambda)|^2 d\mu_h(\lambda) < \infty \right\} \longrightarrow \mathcal{H}$$

ein normaler Operator definiert; für eine reellwertige meßbare Funktion $f : \sigma(A) \rightarrow \mathbb{R}$ ist der Operator $f(A) : D(f(A)) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ selbstadjungiert. Es gilt folgender Funktionalkalkül (für meßbare Funktionen $f_1, f_2 : \sigma(A) \rightarrow \mathbb{C}$)

$$\begin{aligned} (f(A))^* &= \overline{f}(A) : D(f(A)) \longrightarrow \mathcal{H}, \\ (f_1 + f_2)(A) &= f_1(A) + f_2(A) : D(f_1(A)) \cap D(f_2(A)) \subseteq D((f_1 + f_2)(A)) \longrightarrow \mathcal{H}, \\ f_1(A) f_2(A) &= (f_1 f_2)(A) : D(f_1(A) f_2(A)) \subseteq D((f_1 f_2)(A)) \longrightarrow \mathcal{H}. \end{aligned}$$

Erklärung. Vergleiche WERNER (2011), Theorem VII.3.2. ◇

Bemerkungen. Es bezeichne $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ einen selbstadjungierten Operator mit zugehörigem Spektral-Maß

$$M : \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow L(\mathcal{H}), \quad A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda).$$

(i) *Resolution der Identität.* Betrachtet man speziell die konstante Funktion

$$f : \sigma(A) \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : \lambda \longmapsto 1,$$

so stimmt das Integral bezüglich des Spektral-Maßes mit der Identität überein

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} 1 \, dM(\lambda) = M(\sigma(A)) = I : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H};$$

man spricht deshalb auch von einer Resolution der Identität.

(ii) *Polynomfunktion.* Für eine Polynomfunktion wie etwa (wobei $k \in \mathbb{N}$)

$$f : \sigma(A) \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : \lambda \longmapsto \lambda^k,$$

ergibt sich der mittels Komposition definierte Operator

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} \lambda^k \, dM(\lambda) = A^k : D(f(A)) = D(A^k) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

(iii) *Kommutativität.* Ein selbstadjungierter Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ kommutiert genau dann mit einem linearen Operator $B : D(B) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$

$$AB = BA : D(AB) = D(BA) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H},$$

wenn B mit jedem Bildelement des Spektral-Maßes kommutiert

$$\forall S \in \mathcal{B}(\sigma(A)) : \quad M(S)B = BM(S);$$

für eine meßbare Funktion $f : \sigma(A) \rightarrow \mathbb{C}$ gilt dann die Relation

$$f(A)B = Bf(A) : D(f(A)B) = D(Bf(A)) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Vorbemerkung. Falls das Spektrum eines selbstadjungierten Operators durch das Punktspektrum gegeben ist, reduziert sich die Darstellungen des Operators auf die Darstellung bezüglich eines vollständigen Orthonormalsystemes von Eigenfunktionen

$$\forall h \in D(A): \quad Ah = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda) h = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k.$$

Für die Herleitung des folgenden Resultates ist die Voraussetzung, daß $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ ein separabler komplexer Hilbert-Raum ist, wesentlich. Da der Spezialfall eines endlich-dimensionalen Hilbert-Raumes in Hinblick auf quantenmechanische Anwendungen von geringerer Bedeutung ist, wird das folgende Resultat nur für den unendlich-dimensionalen Fall formuliert; im endlich-dimensionalen Fall reduzieren sich die unendliche Reihen auf endliche Reihen. Es sei daran erinnert, daß das Spektrum eines selbstadjungierten Operators reell ist und Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten zueinander orthogonal sind.

Resultat (Punktspektrum). Es bezeichne $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ einen selbstadjungierten Operator mit zugehörigem Spektral-Maß

$$M : \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow L(\mathcal{H}), \quad A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda).$$

Falls das kontinuierliche Spektrum leer ist, besteht das Spektrum aus abzählbar vielen reellen Eigenwerten $(\lambda_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $\lambda_k \in \mathbb{R}$ für $k \in \mathbb{N}$ und es existiert ein vollständiges Orthonormalsystem $(h_k)_{k \in \mathbb{N}}$ von Eigenfunktionen $h_k \in D(A) \subseteq \mathcal{H}$ für $k \in \mathbb{N}$ (Angabe der Eigenwerte mit Vielfachheit)

$$\begin{aligned} \sigma_c = \emptyset \quad \implies \quad \sigma(A) = \sigma_p(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots\} \subset \mathbb{R}, \\ Ah_k = \lambda_k h_k, \quad k \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Für einen einfachen Eigenwert $\lambda_k \in \sigma_p(A)$ mit zugehöriger Eigenfunktion $h_k \in D(A) \subseteq \mathcal{H}$ gibt $M(\{\lambda_k\})$ die orthogonale Projektion auf den Eigenraum $\text{Ke}(A - \lambda_k I) =_{\mathbb{C}} \langle h_k \rangle$ an

$$M(\{\lambda_k\}) h = (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k;$$

eine entsprechende Relation ergibt sich für einen mehrfachen Eigenwert. Allgemeiner gelten die folgenden Darstellungen (mit meßbarer Funktion $f : \sigma(A) \rightarrow \mathbb{C}$)

$$\begin{aligned} \forall h \in \mathcal{H}: \quad h &= \int_{\sigma(A)} 1 \, dM(\lambda) h = \sum_{k=1}^{\infty} (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k, \\ \forall h \in D(A): \quad Ah &= \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda) h = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k, \\ \forall h \in D(f(A)): \quad f(A)h &= \int_{\sigma(A)} f(\lambda) \, dM(\lambda) h = \sum_{k=1}^{\infty} f(\lambda_k) (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k. \end{aligned}$$

Erklärung. Die in DENK (2012), Beweis von Satz 1.28 angegebenen Überlegungen begründen die Existenz eines abzählbaren vollständigen Orthonormalsystemes von Eigenfunktionen mit

zugehörigen Eigenwerten. Zu Vereinfachung der Notation wird hier zusätzlich angenommen, daß alle Eigenwerte einfach sind und somit die orthogonale Projektion auf den Eigenraum zum k -ten Eigenwert folgende einfache Darstellung besitzt

$$A h_k = \lambda_k h_k, \quad M(\{\lambda_k\}) h = (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Entsprechend vereinfacht sich die Darstellung von

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dM(\lambda) : D(f(A)) = \left\{ h \in \mathcal{H} : \int_{\sigma(A)} |f(\lambda)|^2 d\mu_h(\lambda) < \infty \right\} \rightarrow \mathcal{H}$$

wie folgt (für $h \in D(f(A))$), nach Voraussetzung $\sigma(A) = \sigma_p(A)$)

$$\begin{aligned} f(A)h &= \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dM(\lambda)h \\ &= \int_{\bigcup_{k \in \mathbb{N}} \{\lambda_k\}} f(\lambda) dM(\lambda)h \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \int_{\{\lambda_k\}} f(\lambda) dM(\lambda)h \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} f(\lambda_k) M(\{\lambda_k\})h \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} f(\lambda_k) (h|h_k)_{\mathcal{H}} h_k. \end{aligned}$$

Für Details sei auf DENK (2012) verwiesen. ◇

3.3 Stark-stetige unitäre Gruppe

Evolutionsoperator. Die im Folgenden angegebenen Resultate sind insbesondere in Hinblick auf zeitabhängige lineare Schrödinger-Gleichungen wesentlich. Betrachtet man einen selbstadjungierten Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, so ist nämlich für die zugehörige Evolutionsgleichung (Cauchy-Problem)

$$\begin{cases} i u'(t) = A u(t), & t \in \mathbb{R}, \\ u(0) = u_0, \end{cases}$$

die Existenz der Lösung für einen beliebigen Anfangswert $u_0 \in D(A)$ sichergestellt und es gilt die Darstellung

$$u : \mathbb{R} \longrightarrow \mathcal{H} : t \longmapsto u(t) = E_{-iA}(t) u_0 = e^{-itA} u_0;$$

die durch den mittels Funktionalkalkül definierten stetigen linearen Operator erklärte Funktion

$$E : \mathbb{R} \longrightarrow L(\mathcal{H}) : t \longmapsto E_{-iA}(t) = e^{-itA}$$

wird als Evolutionsoperator bezeichnet. Die im Folgenden angegebenen Überlegungen rechtfertigen insbesondere die Schreibweise

$$u'(t) = E'_{-iA}(t) u_0 = -i A E_{-iA}(t) u_0 = -i A u(t), \quad t \in \mathbb{R}.$$

Man beachte, daß $E_{-iA}(t) u_0$ sogar für $u_0 \in \mathcal{H}$ definiert ist; in diesem Fall kann man jedoch im Allgemeinen keine Aussage über die Wohldefiniertheit der Zeitableitung $E'_{-iA}(t) u_0$ treffen.

Voraussetzung. Es sei daran erinnert, daß $(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ einen separablen komplexen Hilbert-Raum bezeichnet.

Stark-stetige unitäre Gruppe. Eine Funktion $E : \mathbb{R} \rightarrow L(\mathcal{H}) : t \mapsto E(t)$, welche jedem Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ einen stetigen linearen Operator $E(t) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ zuordnet, heißt eine stark-stetige unitäre Gruppe, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind.

(i) *Gruppeneigenschaft.* Es gilt

$$\forall s, t \in \mathbb{R} : \quad E(s) E(t) = E(s+t) = E(t) E(s) : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

(ii) *Unitäre Operatoren.* Es gilt

$$\forall t \in \mathbb{R} : \quad (E(t))^* E(t) = I = E(t) (E(t))^* : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

(iii) *Stetigkeit.* Für jedes Element $h \in \mathcal{H}$ ist die Funktion

$$\mathbb{R} \longrightarrow \mathcal{H} : t \longmapsto E(t)h$$

stetig, d.h. Stetigkeit bezüglich der starken Topologie ist gegeben.

Bemerkungen.

(i) Anstelle der Funktionenschreibweise ist auch die Familienschreibweise $(E(t))_{t \in \mathbb{R}}$ gebräuchlich.

(ii) Aus den ersten beiden Bedingungen folgt insbesondere

$$E(0) = I: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H},$$

$$\forall t \in \mathbb{R}: (E(t))^{-1} = (E(t))^* = E(-t): \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

(iii) Um für jedes Element $h \in \mathcal{H}$ die Stetigkeit der Funktion

$$\mathbb{R} \longrightarrow \mathcal{H}: t \longmapsto E(t)h$$

zu zeigen, ist die Gültigkeit der Aussage

$$\lim_{t \rightarrow s} (E(t)h - E(s)h) = 0 \text{ in } \mathcal{H}, \quad \text{d.h.} \quad \lim_{t \rightarrow s} \|E(t)h - E(s)h\|_{\mathcal{H}} = 0,$$

nachzuweisen; eine direkte Folgerung aus der Gruppeneigenschaft ist

$$E(t)h - E(s)h = E(s)(E(t-s)h - h)$$

und folglich reicht es aus, Stetigkeit bei Null zu zeigen (beachte, daß $E(s): \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein stetiger linearer Operator ist)

$$\lim_{t \rightarrow 0} (E(t)h - h) = 0 \text{ in } \mathcal{H}, \quad \text{d.h.} \quad \lim_{t \rightarrow 0} \|E(t)h - h\|_{\mathcal{H}} = 0.$$

Vorbemerkung. Das folgende Resultat besagt, daß für jeden selbstadjungierten Operator der mittels des Spektral-Maßes und des resultierenden Funktionalkalküls definierte Evolutionsoperator eine stark-stetige unitäre Gruppe bildet. Beachte (für $t \in \mathbb{R}$)

$$\left\{ h \in \mathcal{H}: \int_{\sigma(A)} |e^{it\lambda}|^2 d\mu_h(\lambda) = \mu_h(\sigma(A)) = \|h\|_{\mathcal{H}}^2 < \infty \right\} = \mathcal{H}.$$

Resultat (Eigenschaften des Evolutionsoperators). Es sei $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein selbstadjungierter Operator mit zugehörigem Spektral-Maß

$$M: \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow L(\mathcal{H}), \quad A = \int_{\sigma(A)} \lambda dM(\lambda).$$

Für jedes $t \in \mathbb{R}$ wird mittels der komplexwertigen meßbaren Funktion

$$f: \sigma(A) \longrightarrow \mathbb{C}: s \longmapsto e^{its},$$

$$e^{itA} = \int_{\sigma(A)} e^{it\lambda} dM(\lambda): \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H},$$

ein normaler Operator definiert, welcher die folgenden Eigenschaften besitzt.

(i) *Stark-stetige unitäre Gruppe.* Die Funktion

$$E_{-iA} : \mathbb{R} \longrightarrow L(\mathcal{H}) : t \longmapsto E_{-iA}(t) = e^{-itA}$$

bildet eine stark-stetige unitäre Gruppe.

Erklärung. Aus dem Funktionalkalkül folgen die Gruppeneigenschaft

$$f_1(A)f_2(A) = (f_1f_2)(A),$$

$$\forall s, t \in \mathbb{R} : E_{-iA}(s)E_{-iA}(t) = e^{-isA}e^{-itA} = e^{-i(s+t)A} = E_{-iA}(s+t) : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H},$$

und die Eigenschaft unitär

$$(f(A))^* = \overline{f}(A),$$

$$\forall t \in \mathbb{R} : (E_{-iA}(t))^* E_{-iA}(t) = e^{itA}e^{-itA} = I : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Wie zuvor bemerkt, reicht es aus, starke Stetigkeit bei $t = 0$ zu zeigen, d.h. die Gültigkeit der Relation

$$\forall h \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow 0} \|E_{-iA}(t)h - h\|_{\mathcal{H}} = \lim_{t \rightarrow 0} \left\| \int_{\sigma(A)} e^{-it\lambda} dM(\lambda) h - h \right\|_{\mathcal{H}} = 0.$$

Mittels der Identität (verwende $M(\sigma(A)) = I$)

$$\left\| \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dM(\lambda) h \right\|_{\mathcal{H}}^2 = \int_{\sigma(A)} |f(\lambda)|^2 d\mu_h(\lambda),$$

$$\left\| \int_{\sigma(A)} e^{-it\lambda} dM(\lambda) h - h \right\|_{\mathcal{H}}^2 = \left\| \int_{\sigma(A)} (e^{-it\lambda} - 1) dM(\lambda) h \right\|_{\mathcal{H}}^2 = \int_{\sigma(A)} |e^{-it\lambda} - 1|^2 d\mu_h(\lambda),$$

und geeigneter Abschätzung von $|e^{-it\lambda} - 1| = \mathcal{O}(t)$ oder eleganter durch Anwendung des Satzes von der majorisierten Konvergenz

$$\forall h \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow 0} \|E_{-iA}(t)h - h\|_{\mathcal{H}}^2 = \lim_{t \rightarrow 0} \int_{\sigma(A)} |e^{-it\lambda} - 1|^2 d\mu_h(\lambda)$$

$$= \int_{\sigma(A)} \lim_{t \rightarrow 0} |e^{-it\lambda} - 1|^2 d\mu_h(\lambda) = 0$$

folgt die gewünschte Behauptung. ◇

(ii) *Zeitableitung.* Für jedes Element $d \in D(A)$ existiert der folgende Grenzwert, und es gilt die Identität

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)d - d) = -iAd.$$

In diesem Sinn ist die Schreibweise

$$E'_{-iA}(0)d = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} E_{-iA}(t)d = -iAd$$

zu verstehen; man beachte, daß im Allgemeinen nicht auf Gleichheit von $E'_{-iA}(0)$ und $-iA$ bezüglich der Operator-Norm geschlossen werden kann.

Erklärung. Ähnliche Überlegungen wie zuvor führen für $d \in D(A)$ auf

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left\| \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)d - g) + iAd \right\|_{\mathcal{H}}^2 = \lim_{t \rightarrow 0} \int_{\sigma(A)} \left| \frac{1}{t} (e^{-it\lambda} - 1) + i\lambda \right|^2 d\mu_d(\lambda) = 0;$$

man beachte, daß unter der Voraussetzung $d \in D(A)$ das Integral

$$\int_{\sigma(A)} \left| \frac{1}{t} (e^{-it\lambda} - 1) + i\lambda \right|^2 d\mu_d(\lambda) \leq C \int_{\sigma(A)} \lambda^2 d\mu_d(\lambda) < \infty$$

existiert und somit die Voraussetzungen des Satzes von der majorisierten Konvergenz erfüllt sind. \diamond

(iii) Für jedes Element $h \in \mathcal{H}$ folgt aus der Wohldefiniertheit des Grenzwertes

$$E'_{-iA}(0)h = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)h - h)$$

die Eigenschaft $h \in D(A)$.

Erklärung. Zum Nachweis der Behauptung ist die Gleichheit der Definitionsbereiche der linearen Operatoren

$$\begin{aligned} A : D(A) &\longrightarrow \mathcal{H} : d \longmapsto Ad, \\ D(B) &= \left\{ h \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)h - h) \text{ existiert in } \mathcal{H} \right\}, \\ B : D(B) &\longrightarrow \mathcal{H} : h \longmapsto Bd = -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)h - h), \end{aligned}$$

zu zeigen. Für Elemente $d \in D(A)$ wurde bereits die Gleichheit $Ad = Bd$ hergeleitet und daher folgt $D(A) \subseteq D(B)$; da $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ nach Voraussetzung selbstadjungiert und insbesondere dicht definiert ist, ist auch $B : D(B) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ dicht definiert und somit der adjungierte Operator $B^* : D(B^*) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ wohldefiniert. Um die Inklusion $D(B) \subseteq D(A)$ zu begründen, nützt man die Symmetrie von B (verwende Stetigkeit des Skalarproduktes, beachte $(E_{-iA}(t) - I)^* = E_{-iA}(-t) - I$, ersetze $t \leftrightarrow -t$)

$$\begin{aligned} (Bh_1 | h_2)_{\mathcal{H}} &= \left(-i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)h_1 - h_1) \middle| h_2 \right)_{\mathcal{H}} \\ &= -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left((E_{-iA}(t) - I)h_1 \middle| h_2 \right)_{\mathcal{H}} \\ &= -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(h_1 \middle| (E_{-iA}(-t) - I)h_2 \right)_{\mathcal{H}} \\ &= i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \left(h_1 \middle| E_{-iA}(t)h_2 - h_2 \right)_{\mathcal{H}} \\ &= \left(h_1 \middle| -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E_{-iA}(t)h_2 - h_2) \right)_{\mathcal{H}} \\ &= (h_1 | Bh_2)_{\mathcal{H}} \end{aligned}$$

woraus sich $D(B) \subseteq D(B^*)$ ergibt. Wegen $D(A) \subseteq D(B)$ und folglich (A selbstadjungiert)

$$D(B) = D(B^*) \subseteq D(A^*) = D(A)$$

erhält man die gewünschte Behauptung $A = B : D(A) = D(B) \rightarrow \mathcal{H}$. \diamond

(iv) Für alle Zeitpunkte $t \in \mathbb{R}$ gilt

$$\forall d \in D(A) : \quad E_{-iA}(t) d \in D(A), \quad E_{-iA}(t) A d = A E_{-iA}(t) d,$$

und allgemeiner für $k \in \mathbb{N}$

$$\forall d \in D(A^k) : \quad E_{-iA}(t) d \in D(A^k), \quad E_{-iA}(t) A^k d = A^k E_{-iA}(t) d,$$

Erklärung. Man beachte, daß man wegen

$$\forall \lambda \in \mathbb{R} : \quad |e^{i t \lambda}| = 1$$

aus dem Funktionalkalkül die Gleichheit der Definitionsbereiche

$$D(E_{-iA}(t) A) = D(A) = D(A E A(t))$$

erhält; die angegebene Identität folgt aus der Gruppeneigenschaft

$$\begin{aligned} \forall d \in D(A) : \quad -i E_{-iA}(t) A d &= E_{-iA}(t) \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (E_{-iA}(s) d - d) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (E_{-iA}(s+t) d - E_{-iA}(t) d) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (E_{-iA}(s) E_{-iA}(t) d - E_{-iA}(t) d) \\ &= -i A E_{-iA}(t) d \end{aligned}$$

und Induktion. \diamond

Resultat (Satz von Stone). Aus dem vorhergehenden Resultat folgt, daß jeder selbstadjungierte Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ durch das Funktionalkalkül $(e^{itA})_{t \in \mathbb{R}}$ eine stark-stetige unitäre Gruppe definiert. Der Satz von Stone besagt umgekehrt, daß für jede stark-stetige unitäre Gruppe auf dem betrachteten Hilbert-Raum

$$(E(t))_{t \in \mathbb{R}}, \quad E(t) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H},$$

ein eindeutig bestimmter selbstadjungierter Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ existiert, sodaß die Gruppe die Darstellung

$$E(t) = E_{-iA}(t) = e^{-itA}, \quad t \in \mathbb{R},$$

besitzt; für diesen Operator, den infinitesimale Erzeuger der Gruppe, gelten die Relationen

$$\begin{aligned} D(A) &= \left\{ d \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E(t) d - d) \text{ existiert in } \mathcal{H} \right\}, \\ A : D(A) &\rightarrow \mathcal{H} : d \mapsto A d = i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E(t) d - d). \end{aligned}$$

In diesem Sinn ist die Schreibweise

$$A d = i E'(0) d$$

zu verstehen.

Erklärung. Siehe DENK (2012), Satz 2.4. \diamond

3.4 Vertauschbarkeit

Vorbemerkung. Um beispielsweise im Zusammenhang mit Ortsoperator und Impulsoperator gewisse Überlegungen für den einfacheren eindimensionalen Fall auf den relevanten dreidimensionalen Fall übertragen zu können, nützt man die Vertauschbarkeit bzw. Kompatibilität von selbstadjungierten Operatoren im folgenden Sinn. Für den eindimensionalen Fall werden zusätzliche Überlegungen zur Selbstadjungiertheit des Ortsoperators und des Impulsoperators sowie zu den angegebenen Lösungsdarstellungen zu einem späteren Zeitpunkt angegeben.

Kompatibilität.

- (i) *Kompatibilität.* Es seien $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ und $B : D(B) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ zwei selbstadjungierte Operatoren mit zugehörigen Spektral-Maßen

$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dM_A(\lambda) : D(f(A)) = \left\{ h \in \mathcal{H} : \int_{\sigma(A)} |f(\lambda)|^2 d\mu_{A,h}(\lambda) < \infty \right\} \rightarrow \mathcal{H},$$

$$g(B) = \int_{\sigma(B)} g(\lambda) dM_B(\lambda) : D(g(B)) = \left\{ h \in \mathcal{H} : \int_{\sigma(B)} |g(\lambda)|^2 d\mu_{B,h}(\lambda) < \infty \right\} \rightarrow \mathcal{H}.$$

Die Operatoren heißen vertauschbar bzw. kompatibel, wenn die folgende Relation erfüllt ist (beachte, daß $M_A(S_A), M_B(S_B)$ orthogonale Projektionsoperatoren sind)

$$\forall S_A \in \mathcal{B}(\sigma(A)) \quad \forall S_B \in \mathcal{B}(\sigma(B)) : \quad M_A(S_A) M_B(S_B) = M_B(S_B) M_A(S_A) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H};$$

verwendet man die Schreibweise mittels Kommutator, führt dies auf die Bedingung

$$\forall S_A \in \mathcal{B}(\sigma(A)) \quad \forall S_B \in \mathcal{B}(\sigma(B)) : \quad [M_A(S_A), M_B(S_B)] = 0 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

- (ii) *Kriterien für Kompatibilität.* Um die Kompatibilität von Operatoren zu verifizieren, ist es im Allgemeinen nicht ausreichend, zu überprüfen, daß der Kommutator der Operatoren verschwindet. Ein Kriterium für Kompatibilität lautet (mit zugehörigen Evolutionsoperatoren)

$$\forall s, t \in \mathbb{R} : \quad [E_{-iA}(s), E_{-iB}(t)] = 0;$$

siehe dazu DENK (2012), Satz 3.11 (Formel von Stone), Lemma 3.12 und Satz 3.13 (Kriterien für Kompatibilität).

- (iii) *Orts- und Impulsoperatoren.* Einfache Beispiele für kompatible Operatoren sind die komponentenweisen Multiplikationsoperatoren (Ortsoperatoren, wobei $k \in \{1, 2, 3\}$)

$$Q_k : \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : [x \mapsto x_k \psi(x)] \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \right\} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \mapsto [x \mapsto x_k \psi(x)];$$

die zugehörigen Evolutionsoperatoren sind durch (wobei $k \in \{1, 2, 3\}$)

$$\begin{cases} i \partial_t \psi(x, t) = x_k \psi(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}, \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

$$\forall t \in \mathbb{R}: \quad E_{-iQ_k}(t) : L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi_0 \longmapsto [x \mapsto \psi(x, t) = e^{-itx_k} \psi_0(x)],$$

gegeben. Ebenso sind die partiellen Differentialoperatoren kompatibel (Impulsoperatoren, wobei $k \in \{1, 2, 3\}$, normalisierte Formulierung)

$$P_k : \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \partial_{x_k} \psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \right\} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto -i \partial_{x_k} \psi;$$

in diesem Fall gilt die Lösungsdarstellung (wobei $k \in \{1, 2, 3\}$)

$$\begin{cases} i \partial_t \psi(x, t) = -i \partial_{x_k} \psi(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}, \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

$$\forall t \in \mathbb{R}: \quad E_{-iP_k}(t) : L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi_0 \longmapsto [x \mapsto \psi(x, t) = \psi_0(x - te_k)],$$

Eine einfache Rechnung zeigt, daß Q_k und P_ℓ für $k, \ell \in \{1, 2, 3\}$ mit $k \neq \ell$ kompatibel sind (für $s, t \in \mathbb{R}$, mit k -tem Standardbasisvektor $e_k \in \mathbb{R}^3$)

$$\begin{aligned} (E_{-iQ_k}(s) E_{-iP_\ell}(t) \psi_0)(x) &= e^{-isx_k} \psi_0(x - te_\ell), \\ (E_{-iP_\ell}(t) E_{-iQ_k}(s) \psi_0)(x) &= e^{-isx_k} \psi_0(x - te_\ell), \\ [E_{-iQ_k}(s), E_{-iP_\ell}(t)] \psi_0 &= 0; \end{aligned}$$

im Gegensatz dazu sind Q_k und P_k für $k \in \{1, 2, 3\}$ nicht kompatibel, was auch durch die Heisenberg'sche Unschärferelation belegt wird.

Kapitel 4

Anwendungen in der Quantenmechanik

Inhalt. Im Folgenden werden grundlegende quantenmechanische Begriffe wie reiner Zustand und Observable eingeführt, die stochastische Interpretation von quantenmechanischen Meßapparaturen angegeben und die Heisenberg'sche Unschärferelation gezeigt. Ein grundlegendes Prinzip der Quantenmechanik besagt, daß ein quantenmechanisches System durch den zugehörigen Hamilton-Operator, welcher einen selbstadjungierten Operator auf einem separablen komplexen Hilbert-Raum bildet, bestimmt ist

$$H : D(H) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Das dynamische Verhalten des Systemes wird durch die entsprechende zeitabhängige Schrödinger-Gleichung beschrieben

$$i \partial_t \psi(t) = H \psi(t), \quad t \in \mathbb{R};$$

die Darstellung des Evolutionsoperators beruht auf dem Spektral-Maß

$$H = \int_{\sigma(H)} \lambda \, dM(\lambda), \quad e^{-itH} = \int_{\sigma(H)} e^{-it\lambda} \, dM(\lambda), \quad t \in \mathbb{R}.$$

Als erste konkrete Anwendungen werden der Ortsoperator und der Impulsoperator für den eindimensionalen Fall betrachtet und Resultate zu Selbstadjungiertheit und Spektrum bewiesen. Im Anschluß werden einfache Quantensysteme, gegeben durch die freie Schrödinger-Gleichung und die Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential, behandelt; insbesondere werden die Spektren der zugehörigen Hamilton-Operatoren (mit Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} : x \mapsto \psi(x)$, normalisierte Formulierung)

$$(H\psi)(x) = -\Delta\psi(x), \quad (H\psi)(x) = -\Delta\psi(x) + \|x\|^2\psi(x),$$

charakterisiert. Für entsprechende Überlegungen zur Schrödinger-Gleichung mit Coulomb-Potential sei auf DENK (2012) verwiesen.

Überblick.

- Zugrundeliegender Hilbert-Raum, Reiner Zustand, Observable, Messung
Stochastische Interpretation (Erwartungswert, Varianz, Unschärfe)
Spezialfall einer Eigenfunktion
Hamilton-Operator, Evolutionsoperator, Erhaltung der Norm, Schrödinger-Gleichung
Zusammenhang zwischen Klassischer Mechanik und Quantenmechanik
Stationärer Zustand, Zusammenhang mit Eigenfunktionen
Grundzustand und angeregte Zustände
- Heisenberg'sche Unschärferelation
- Selbstadjungiertheit und Spektraleigenschaften des Ortsoperators, Spektral-Maß und Aufenthaltswahrscheinlichkeit
Selbstadjungiertheit und Spektraleigenschaften des Impulsoperators
Evolutionsoperatoren, Kanonische Vertauschungsrelation nach Weyl
Kanonische Vertauschungsrelation, Orts-Impuls-Unschärferelation
- Freie Schrödinger-Gleichung, Eigenschaften des Hamilton-Operators
- Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential, Eigenschaften des Hamilton-Operators, Lösungsdarstellung

4.1 Prinzipien der Quantenmechanik

Reiner Zustand und Observable. Ein quantenmechanisches System wird durch folgende mathematische Objekte beschrieben.

- (i) *Zugrundeliegender Raum.* Als zugrundeliegender Raum wird ein separabler komplexer Hilbert-Raum betrachtet

$$(\mathcal{H}, (\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}}).$$

- (ii) *Reiner Zustand.* Einen eindimensionalen Unterraum des zugrundeliegenden Hilbert-Raumes bezeichnet man als reinen Zustand (wobei $h \in \mathcal{H}$)

$$\mathbb{C}\langle h \rangle = \{ch : c \in \mathbb{C}\}.$$

Um sämtliche Unterräume zu erhalten, reicht es aus, normierte Elemente zu betrachten; man beachte, daß $h \in \mathcal{H}$ sowie $e^{i\rho}h$ mit $\rho \in \mathbb{R}$ auf denselben Unterraum führen. Ein reiner Zustand wird üblicherweise mit einem Repräsentanten identifiziert

$$\mathbb{C}\langle h \rangle \longleftrightarrow h_0 \in \mathbb{C}\langle h \rangle \text{ mit } \|h_0\|_{\mathcal{H}} = 1.$$

- (iii) *Observable.* Unter einer Observable versteht man eine Meßapparatur für eine physikalische Größe, gegeben durch einen selbstadjungierten Operator

$$A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

- (iv) *Messung.* Ist $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ eine Observable und befindet sich das quantenmechanische System im reinen Zustand $h \in D(A)$, so entspricht die Bestimmung von Ah einer Messung der Observablen A .

Stochastische Interpretation. In Anlehnung an Konzepte der Stochastik werden quantenmechanische Messungen in folgender Art und Weise interpretiert.

- (i) *Wahrscheinlichkeitsmaß.* Für eine Observable, d.h. einen selbstadjungierten Operator $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, ist das Spektral-Maß eindeutig bestimmt

$$M : \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow L(\mathcal{H}) : S \longmapsto M(S),$$

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, dM(\lambda) : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

Betrachtet man einen reinen Zustand, gegeben durch ein normiertes Element $h \in \mathcal{H}$, so führt das zugehörige Maß auf ein Wahrscheinlichkeitsmaß

$$\forall h \in \mathcal{H} \text{ mit } \|h\|_{\mathcal{H}} = 1 :$$

$$\mu_h : \mathcal{B}(\sigma(A)) \longrightarrow [0, 1] : S \longmapsto \mu_h(S) = (M(S)h|h)_{\mathcal{H}} = \|M(S)h\|_{\mathcal{H}}^2 ;$$

wegen $S \subseteq \sigma(A)$ für $S \in \mathcal{B}(\sigma(A))$ und $M(\sigma(A)) = I$ folgt nämlich

$$\forall S \in \mathcal{B}(\sigma(A)) : \mu_h(S) \leq \mu_h(\sigma(A)) = \|h\|_{\mathcal{H}}^2 = 1.$$

- (ii) *Stochastische Interpretation.* In der obigen Situation wird einer Teilmenge $S \in \mathcal{B}(\sigma(A))$ und einem gemessenen Wert Ah die Wahrscheinlichkeit

$$\mu_h(S) = \|M(S)h\|_{\mathcal{H}}^2 \in [0, 1]$$

zugeordnet.

- (iii) *Spezialfall (Eigenwert).* Ist $\lambda \in \sigma(A)$ ein mehrfacher Eigenwert mit zugehörigen ortho-normalen Eigenfunktionen $h_k \in D(A)$ für $k \in \{1, \dots, m\}$, so erhält man speziell

$$Ah_k = \lambda h_k, \quad \|h_k\|_{\mathcal{H}} = 1, \quad \mu_{h_k}(\{\lambda\}) = \|M(\{\lambda\})h_k\|_{\mathcal{H}}^2 = 1, \quad k \in \{1, \dots, m\};$$

die angegebene Relation folgt aus der Tatsache, daß die Projektion auf den entsprechenden Eigenraum durch

$$M(\{\lambda\}) : h_0 \mapsto \sum_{\ell=1}^m (h_0 | h_\ell)_{\mathcal{H}} h_\ell$$

gegeben ist, woraus sich insbesondere die Identität

$$M(\{\lambda\})h_k = h_k, \quad k \in \{1, \dots, m\},$$

ergibt.

- (iv) *Erwartungswert, Varianz.* Wie zuvor sei $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ eine Observable und $h \in \mathcal{H}$ mit $\|h\|_{\mathcal{H}} = 1$ ein reiner Zustand. In Übereinstimmung mit den Begriffen Erwartungswert und Varianz in der Stochastik bezeichnet man die Größen

$$E(A, h) = (Ah | h)_{\mathcal{H}} = \int_{\sigma(A)} \lambda \, d\mu_h(\lambda) \in \mathbb{R},$$

$$V(A, h) = \left((A - E(A, h)I)^2 h | h \right)_{\mathcal{H}} = \int_{\sigma(A)} (\lambda - E(A, h))^2 \, d\mu_h(\lambda),$$

als Erwartungswert bzw. Varianz von A im reinen Zustand $h \in D(A)$ bzw. $h \in D(A^2)$; die Standardabweichung

$$\sqrt{V(A, h)}$$

wird auch als Unschärfe bezeichnet.

- (v) *Bemerkung.* Man beachte, daß wegen der Selbstadjungiertheit von A sichergestellt ist, daß der Erwartungswert eine reelle Größe ist

$$E(A, h) = (Ah | h)_{\mathcal{H}} \in \mathbb{R};$$

weitere erhält man für Varianz und Unschärfe folgende Relationen

$$V(A, h) = \|Ah - E(A, h)h\|_{\mathcal{H}}^2, \quad \sqrt{V(A, h)} = \|Ah - E(A, h)h\|_{\mathcal{H}}.$$

- (vi) *Spezialfall (Eigenfunktion)*. Für eine normierte Eigenfunktion $h_0 \in D(A)$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_0 \in \sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ zeigen elementare Rechnungen, daß der Erwartungswert mit dem Eigenwert übereinstimmt und die Varianz Null ist (beachte $h_0 \in D(A^k)$ für $k \in \mathbb{N}$)

$$\begin{aligned} Ah_0 &= \lambda_0 h_0, & \|h_0\|_{\mathcal{H}} &= 1, \\ E(A, h_0) &= (Ah_0 | h_0)_{\mathcal{H}} = \lambda_0 = \int_{\sigma(A)} \lambda \, d\mu_{h_0}(\lambda), \\ V(A, h_0) &= \|Ah_0 - \lambda_0 h_0\|_{\mathcal{H}}^2 = 0 = \int_{\sigma(A)} (\lambda - E(A, h))^2 \, d\mu_{h_0}(\lambda). \end{aligned}$$

Vergleiche Lemma 1.32 in DENK (2012).

Hamilton-Operator und Schrödinger-Gleichung.

- (i) *Hamilton-Operator und Evolutionsoperator*. Ein grundlegendes Prinzip der Quantenmechanik besagt, daß es zu einem quantenmechanischen System mit Zuständen im separablen komplexen Hilbert-Raum $(\mathcal{H}, (\cdot | \cdot)_{\mathcal{H}}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ einen eindeutig bestimmten selbstadjungierten Operator, den Hamilton-Operator des Systemes, gibt

$$H : D(H) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Befindet sich das System zum Zeitpunkt $t_0 \in \mathbb{R}$ im reinen Zustand $h_0 \in \mathcal{H}$, so ist es zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ im Zustand

$$h(t) = e^{-i(t-t_0)H} h_0 \in \mathcal{H};$$

der Evolutionsoperators ist dabei durch die folgende Darstellung mittels des eindeutig bestimmten Spektral-Maßes des Hamilton-Operators gegeben

$$H = \int_{\sigma(H)} \lambda \, dM(\lambda), \quad e^{-itH} = \int_{\sigma(H)} e^{-it\lambda} \, dM(\lambda), \quad t \in \mathbb{R}.$$

- (ii) *Erhaltung der Norm*. Da der Evolutionsoperator unitär ist, folgt insbesondere die Erhaltung der Norm

$$\forall h_0 \in \mathcal{H} \quad \forall t \in \mathbb{R}: \quad \|h(t)\|_{\mathcal{H}} = \|e^{-i(t-t_0)H} h_0\|_{\mathcal{H}} = \|h_0\|_{\mathcal{H}};$$

in konkreten Anwendungen spricht man auch von Teilchenzahlerhaltung oder Masseerhaltung.

- (iii) *Schrödinger-Gleichung*. Erfüllt der betrachtete Anfangszustand die zusätzliche Bedingung $h_0 \in D(H)$, so stimmt der Zustand des Systemes

$$h(t) = e^{-i(t-t_0)H} h_0 \in D(H), \quad t \in \mathbb{R},$$

mit der Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\begin{cases} i h'(t) = H h(t), & t \in \mathbb{R}, \\ h(t_0) = h_0 \in D(H), \end{cases}$$

überein; ein früheres Resultat besagt nämlich, daß für $h_0 \in D(H)$ die zeitliche Ableitung $h'(t)$ wohldefiniert ist und die Evolutionsgleichung gilt.

- (iv) *Partielle Differentialgleichung.* In den später behandelten Anwendungen wird als zugrundeliegender Hilbert-Raum der Funktionenraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ gewählt; der Zustand des quantenmechanischen Systemes $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : (x, t) \mapsto \psi(x, t)$ wird meist als Wellenfunktion bezeichnet. Die zuvor angegebene abstrakte Evolutionsgleichung entspricht einer autonomen linearen partiellen Differentialgleichung (für eine autonome Gleichung reicht es aus, als Anfangszeitpunkt $t_0 = 0$ zu betrachten, wie üblich verwendet Kurzschreibweise $H\psi(x, t) = (H\psi(\cdot, t))(x)$)

$$\begin{cases} i \partial_t \psi(x, t) = H\psi(x, t), & x \in \mathbb{R}^3, \quad t \in \mathbb{R}, \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x). \end{cases}$$

- (v) *Bemerkung.* Es gibt keine Axiomatik, um den Hamilton-Operator eines Systemes zu finden; als Eselsbrücke zwischen elementaren Systemen der Quantenmechanik und der Klassischen Mechanik nützt man jedoch die Relationen

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Koordinatenfunktion } q = (q_1, q_2, q_3)^T : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3 : t \mapsto q(t) \\ \quad \longleftarrow \text{Ortsoperator bezüglich } k\text{-ter Koordinate für } k \in \{1, 2, 3\} \\ \quad Q_k : D(Q_k) \subset L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \mapsto [x \mapsto x_k \psi(x)], \\ \text{Impulsfunktion } p = (p_1, p_2, p_3)^T : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3 : t \mapsto p(t), \\ \quad \longleftarrow \text{Impulsoperator bezüglich } k\text{-ter Koordinate für } k \in \{1, 2, 3\} \\ \quad P_k : D(P_k) \subset L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \mapsto [x \mapsto -i\hbar \partial_{x_k} \psi(x)]. \end{array} \right.$$

Insbesondere vergleicht man die Hamilton-Funktion des klassischen harmonischen Oszillators (mit Masse $m > 0$ und Federkonstante $k = 1$)

$$\begin{aligned} H(p(t), q(t)) &= \frac{1}{2m} p(t) \cdot p(t) + \frac{1}{2} q(t) \cdot q(t) \\ &= \sum_{k=1}^3 \left(\frac{1}{2m} (p_k(t))^2 + \frac{1}{2} (q_k(t))^2 \right) \end{aligned}$$

mit dem Hamilton-Operator des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} (H\psi)(x) &= \sum_{k=1}^3 \left(\frac{1}{2m} (P_k^2 \psi)(x) + \frac{1}{2} (Q_k^2 \psi)(x) \right) \\ &= \sum_{k=1}^3 \left(-\frac{1}{2m} \partial_{x_k}^2 \psi(x) + \frac{1}{2} x_k^2 \psi(x) \right) \\ &= -\frac{1}{2m} \Delta \psi(x) + \frac{1}{2} \|x\|^2 \psi(x). \end{aligned}$$

Stationärer Zustand und Eigenfunktionen.

- (i) *Stationärer Zustand.* Von einem stationären Zustand des Systemes spricht man, wenn alle Zustände $h(t) = e^{-i(t-t_0)H} h_0$ für $t \in \mathbb{R}$ in dem durch $h_0 \in \mathcal{H}$ definierten Unterraum liegen

$$h(t) = e^{-i(t-t_0)H} h_0 \in_{\mathbb{C}} \langle h_0 \rangle, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Da die Norm erhalten bleibt, ist dies gleichbedeutend mit der Gültigkeit der Relation

$$h(t) = e^{i\rho(t-t_0)} h_0$$

mit einer reellen Funktion $\rho : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

- (ii) *Zusammenhang mit Eigenfunktionen.* Ist $h_0 \in \mathcal{H}$ eine Eigenfunktion des Hamilton-Operators mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_0 \in \mathbb{R}$, so folgt mittels des Funktionalkalküls die Identität

$$h(t) = e^{-i(t-t_0)H} h_0 = \int_{\sigma(H)} e^{-i(t-t_0)\lambda} dM(\lambda) h_0 = e^{-i(t-t_0)\lambda_0} h_0, \quad t \in \mathbb{R};$$

dies zeigt insbesondere, daß jede Eigenfunktion auf einen stationären Zustand führt. Das im Folgenden angegebene Resultat besagt umgekehrt, daß nur Eigenfunktionen auf einen stationären Zustand führen können.

- (iii) *Grundzustand und angeregte Zustände.* Der einer Eigenfunktion entsprechende Eigenwert gibt die Energie des Systemes an; beim kleinsten Energiewert befindet sich das System im Grundzustand, bei größeren Energiewerten spricht man von angeregten Zuständen. Beim Übergang von einem stationären Zustand h_2 mit Energie λ_2 in einen stationären Zustand h_1 mit geringerer Energie $\lambda_1 < \lambda_2$, wird eine elektromagnetische Strahlung, deren Frequenz proportional zur Differenz $\lambda_2 - \lambda_1$ ist, abgegeben.

Resultat (Stationärer Zustand). Ein Anfangszustand $h_0 \in \mathcal{H}$ führt genau dann auf einen stationären Zustand, wenn h_0 eine Eigenfunktion des Hamilton-Operators ist

$$\left(h(t) = e^{i\rho(t-t_0)} h_0 \text{ mit } \rho : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \right) \iff \left(\exists \lambda_0 \in \mathbb{R} : H h_0 = \lambda_0 h_0 \right).$$

Erklärung. Siehe DENK (2012), Satz 2.10. ◇

4.2 Heisenberg'sche Unschärferelation

Vorbemerkung. Die Heisenberg'sche Unschärferelation gibt eine Abschätzung für die Unschärfen zweier Observablen mittels des Erwartungswertes des Kommutators an.

Resultat (Heisenberg'sche Unschärferelation). Es bezeichnen $A_1 : D(A_1) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ und $A_2 : D(A_2) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ zwei auf einem separablen komplexen Hilbert-Raum definierte selbstadjungierte Operatoren, und es sei $h \in D(A_1^2) \cap D(A_2^2) \cap D(A_1 A_2) \cap D(A_2 A_1)$ mit $\|h\|_{\mathcal{H}} = 1$. Dann gilt die Abschätzung (mit Kommutator $[A_1, A_2] = A_1 A_2 - A_2 A_1$)

$$\sqrt{V(A_1, h) V(A_2, h)} \geq \frac{1}{2} |E(-i[A_1, A_2], h)|;$$

dies entspricht der Relation

$$\|A_1 h - E(A_1, h)h\|_{\mathcal{H}} \|A_2 h - E(A_2, h)h\|_{\mathcal{H}} \geq \frac{1}{2} |(-i[A_1, A_2] h | h)_{\mathcal{H}}| = |\Im(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}|.$$

Erklärung. Man beachte, daß es wegen (mit $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$)

$$[A_1 - c_1 I, A_2 - c_2 I] = [A_1, A_2]$$

ausreicht, die folgende Abschätzung zu zeigen

$$\|A_1 h\|_{\mathcal{H}} \|A_2 h\|_{\mathcal{H}} \geq \frac{1}{2} |(-i[A_1, A_2] h | h)_{\mathcal{H}}|.$$

Aufgrund der Selbstadjungiertheit der Operatoren vereinfacht sich die linke Seite (verwende $z = \Re z + i \Im z \in \mathbb{C}$ und somit $z - \bar{z} = 2i \Im z$)

$$\begin{aligned} ([A_1, A_2] h | h)_{\mathcal{H}} &= (A_1 A_2 h | h)_{\mathcal{H}} - (A_2 A_1 h | h)_{\mathcal{H}} \\ &= (A_2 h | A_1 h)_{\mathcal{H}} - (A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}} \\ &= -\left((A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}} - \overline{(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}} \right) \\ &= -2i \Im(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}, \\ \frac{1}{2} |(-i[A_1, A_2] h | h)_{\mathcal{H}}| &= |\Im(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}|; \end{aligned}$$

mittels der elementaren Abschätzung (Monotonie der Wurzelfunktion)

$$z = \Re z + i \Im z: \quad |\Im z| = \sqrt{(\Im z)^2} \leq \sqrt{(\Re z)^2 + (\Im z)^2} = |z|$$

und der Ungleichung von Cauchy-Schwarz

$$\frac{1}{2} |(-i[A_1, A_2] h | h)_{\mathcal{H}}| = |\Im(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}| \leq |(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}| \leq \|A_1 h\|_{\mathcal{H}} \|A_2 h\|_{\mathcal{H}}$$

ergibt sich die angegebene Relation. ◇

4.3 Ortsoperator und Impulsoperator

Vorbemerkungen.

- (i) *Zugrundeliegender Hilbert-Raum.* Als zugrundeliegender Funktionenraum wird der separable komplexe Hilbertraum

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$$

mit Skalarprodukt und induzierter Norm betrachtet

$$(f|g)_{L^2} = \int_{\mathbb{R}} f(\xi) \overline{g(\xi)} \, d\xi, \quad \|f\|_{L^2} = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} |f(\xi)|^2 \, d\xi}, \quad f, g \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}).$$

- (ii) *Ortsoperator.* Im Folgenden wird gezeigt, daß der eindimensionale Ortsoperator bei geeigneter Wahl des Definitionsbereiches

$$Q : \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : [x \mapsto x\psi(x)] \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \right\} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto x\psi(x)]$$

auf einen selbstadjungierten Operatoren führt und somit die Bezeichnung Observable gerechtfertigt ist. Man beachte, daß die Symmetrie offensichtlich ist

$$\begin{aligned} \forall \psi_1, \psi_2 \in D(Q) : \quad (Q\psi_1 | \psi_2)_{L^2} &= \int_{\mathbb{R}} x\psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} \, dx = \int_{\mathbb{R}} \psi_1(x) \overline{x\psi_2(x)} \, dx \\ &= (\psi_1 | Q\psi_2)_{L^2}, \end{aligned}$$

wobei die Wohldefiniertheit des Skalarproduktes mit Hilfe der Ungleichung von Cauchy-Schwarz folgt

$$\begin{aligned} \forall \psi_1, \psi_2 \in D(Q) : \quad |(Q\psi_1 | \psi_2)_{L^2}| &= \left| \int_{\mathbb{R}} x\psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} \, dx \right| \\ &\leq \int_{\mathbb{R}} x |\psi_1(x)| |\psi_2(x)| \, dx \\ &\leq \sqrt{\int_{\mathbb{R}} x |\psi_1(x)|^2 \, dx} \sqrt{\int_{\mathbb{R}} |\psi_2(x)|^2 \, dx} \\ &= \|Q\psi_1\|_{L^2} \|\psi_2\|_{L^2} < \infty. \end{aligned}$$

Die Bestimmung des Spektral-Maßes des Ortsoperators

$$M : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow L(L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})) : S \longmapsto M(S) = [\psi \mapsto \chi_S \psi], \quad Q = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dM(\lambda),$$

erklärt die Namensgebung und die stochastische Interpretation von

$$\mu_h(S) = \|M(S)\psi\|_{L^2}^2 = \|\chi_S \psi\|_{L^2}^2 = \int_S |\psi(x)|^2 \, dx \in [0, 1]$$

als Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Weiters wird gezeigt, daß das Spektrum des Ortsoperators mit den reellen Zahlen übereinstimmt

$$\sigma(Q) = \sigma_c(Q) = \mathbb{R}.$$

(iii) *Impulsoperator.* Mittels der Fourier-Transformation können die Überlegungen auf den Impulsoperator übertragen werden

$$P : D(P) = H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \partial_x \psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \right\} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto -i\hbar \partial_x \psi;$$

da der zusätzliche Faktor \hbar keinen Einfluß auf die Überlegungen hat, wird er zur Vereinfachung weggelassen. Man beachte, daß die Symmetrie mittels partieller Integration leicht nachzuweisen ist

$$\begin{aligned} \forall \psi_1, \psi_2 \in D(P) : \quad (P\psi_1 | \psi_2)_{L^2} &= \int_{\mathbb{R}} (-i \partial_x \psi_1(x)) \overline{\psi_2(x)} \, dx = \int_{\mathbb{R}} \psi_1(x) \overline{(-i \partial_x \psi_2(x))} \, dx \\ &= (\psi_1 | P\psi_2)_{L^2}; \end{aligned}$$

die Wohldefiniertheit des Skalarproduktes folgt mittels der Ungleichung von Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned} \forall \psi_1, \psi_2 \in D(P) : \quad |(P\psi_1 | \psi_2)_{L^2}| &\leq \int_{\mathbb{R}} |\partial_x \psi_1(x)| |\psi_2(x)| \, dx \\ &\leq \|P\psi_1\|_{L^2} \|\psi_2\|_{L^2} < \infty. \end{aligned}$$

(iv) *Bemerkung.* Der Raum der Testfunktionen liegt im Raum der Schwartz-Funktionen¹ und dieser in jedem Lebesgue-Raum mit Exponent $p \in [1, \infty)$ dicht

$$\forall p \in [1, \infty) : \quad \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}) \stackrel{d}{\subset} \mathcal{S}(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}) \stackrel{d}{\subset} L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{C});$$

ebenso liegt der Sobolev-Raum $W^{m,p}(\Omega, \mathbb{C})$ und speziell $H^m(\Omega, \mathbb{C}) = W^{m,2}(\Omega, \mathbb{C})$ für Exponenten $m \in \mathbb{N}$ dicht im entsprechenden Lebesgue-Raum

$$\begin{aligned} \forall p \in [1, \infty) \quad \forall m \in \mathbb{N} : \quad W^{m,p}(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}) &\stackrel{d}{\subset} L^p(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}), \\ \forall m \in \mathbb{N} : \quad H^m(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}) &\stackrel{d}{\subset} L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}). \end{aligned}$$

Insbesondere sind der Ortsoperator und der Impulsoperator dicht definierte lineare Operatoren auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$.

¹*Schwartz-Raum.* Der Schwartz-Raum, d.h. der Raum der rasch fallenden Funktionen, ist wie folgt definiert

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) = \left\{ f \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \text{für alle } \alpha, \beta \in \mathbb{N}_{\geq 0} \text{ gilt } \sup_{x \in \mathbb{R}} |x^\beta \partial_x^\alpha f(x)| < \infty \right\};$$

mittels der Familie der Semi-Normen

$$|\cdot|_{\alpha, \beta} : \mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : f \longmapsto \sup_{x \in \mathbb{R}} |x^\beta \partial_x^\alpha f(x)|, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{N}_{\geq 0},$$

wird auf dem Schwartz-Raum eine lokalkonvexe Topologie definiert und der Schwartz-Raum zu einem Fréchet-Raum.

Resultat (Selbstadjungiertheit des Ortsoperators). Der Multiplikationsoperator

$$Q : D(Q) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : [x \mapsto x\psi(x)] \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \right\} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto x\psi(x)]$$

ist selbstadjungiert.

Erklärung. Nach einem an früherer Stelle angegebenen Hilfsresultat folgt die Selbstadjungiertheit des dicht definierten linearen Operators Q aus der Symmetrie und den Bedingungen

$$\text{Bi}(Q + iI) = L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) = \text{Bi}(Q - iI).$$

- (i) *Surjektivität von $Q + iI$.* Um die Surjektivität des Operators $Q + iI : D(Q) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ zu zeigen, definiert man für ein beliebiges Element $\varphi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ die Funktion

$$\psi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C} : x \mapsto \psi(x) = \frac{1}{x+i} \varphi(x);$$

offensichtlich gilt wie gewünscht

$$(Q + iI)\psi = \varphi.$$

Die folgende Relation zeigt die Wohldefiniertheit

$$(Q\psi)(x) = x\psi(x) = \frac{x}{x+i} \varphi(x), \quad \frac{x^2}{x^2+1} \leq 1, \quad x \in \mathbb{R},$$

$$\|Q\psi\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{x}{x+i} \varphi(x) \right|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} \frac{x^2}{x^2+1} |\varphi(x)|^2 dx \leq \int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 dx = \|\varphi\|_{L^2}^2 < \infty,$$

d.h. es gilt $\psi \in D(Q)$.

- (ii) *Surjektivität von $Q - iI$.* Analoge Überlegungen gelten für $\psi(x) = \frac{1}{x-i} \varphi(x)$. ◇

Resultat (Spektraleigenschaften des Ortsoperators). Das Spektrum des Multiplikationsoperators

$$Q : D(Q) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : [x \mapsto x\psi(x)] \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \right\} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto x\psi(x)]$$

stimmt mit den reellen Zahlen überein

$$\sigma(Q) = \sigma_c(Q) = \mathbb{R}.$$

Erklärung. Es ist zu zeigen, daß das Punktspektrum leer ist und die Inklusion $\mathbb{R} \subseteq \sigma_c(Q)$ gilt.

- (i) *Punktspektrum.* Für einen Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$ mit zugehöriger Eigenfunktion $\psi \in D(Q)$ müßte die Relation

$$Q\psi = \lambda\psi$$

erfüllt sein, d.h. für fast alle $x \in \mathbb{R}$ müßte $(x - \lambda)\psi(x) = 0$ gelten; daraus folgt $\psi = 0$ in $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, was im Widerspruch zur Voraussetzung $\psi \neq 0$ in $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ für eine Eigenfunktion steht.

(ii) *Kontinuierliches Spektrum.* Für eine beliebige reelle Zahl $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ ist der Operator

$$Q - \lambda_0 I : D(Q) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$$

nicht surjektiv und somit gilt

$\lambda_0 \in \sigma_c(Q) = \{\lambda \in \mathbb{C} : \text{der Operator } Q - \lambda I : D(Q) \rightarrow \mathcal{H} \text{ ist injektiv jedoch nicht surjektiv}$

$\text{Bi}(Q - \lambda I) \neq \mathcal{H} \text{ mit dichtem Bild } \overline{\text{Bi}(Q - \lambda I)} = \mathcal{H}\}$.

Betrachtet man nämlich die Funktion $\varphi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, welche durch

$$\varphi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C} : x \longmapsto \varphi(x) = \chi_{[\lambda_0-1, \lambda_0+1]}(x) = \begin{cases} 1, & x \in [\lambda_0 - 1, \lambda_0 + 1], \\ 0, & x \notin [\lambda_0 - 1, \lambda_0 + 1], \end{cases}$$

definiert ist, ist die Gültigkeit der Relation (für fast alle $x \in \mathbb{R}$)

$$(Q - \lambda_0 I) \psi = \varphi,$$

$$(x - \lambda_0) \psi(x) = \varphi(x), \quad \psi(x) = \frac{1}{x - \lambda_0} \varphi(x) = \begin{cases} \frac{1}{x - \lambda_0}, & x \in [\lambda_0 - 1] \cup (\lambda_0 + 1], \\ 0, & x \notin [\lambda_0 - 1] \cup (\lambda_0 + 1], \end{cases}$$

sowie der Bedingung $\psi \in D(Q) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ widersprüchlich. \diamond

Spektral-Maß des Ortsoperators. Das Spektral-Maß des Ortsoperators ist durch die charakteristische Funktion gegeben (verwende $\sigma(Q) = \mathbb{R}$)

$$Q : D(Q) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : [x \mapsto x\psi(x)] \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})\} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto x\psi(x)],$$

$$M : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow L(L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})) : S \longmapsto M(S) = [\psi \mapsto \chi_S \psi], \quad Q = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dM(\lambda).$$

Einer Teilmenge $S \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ und einem gemessenen Wert $Q\psi$ wird somit die Wahrscheinlichkeit

$$\mu_h(S) = \|M(S)\psi\|_{L^2}^2 = \|\chi_S \psi\|_{L^2}^2 = \int_S |\psi(x)|^2 \, dx \in [0, 1]$$

zugeordnet, d.h. die Funktion $\varrho : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} : x \mapsto |\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte des Aufenthaltsortes.

Erklärung. Siehe DENK (2012), Satz 1.36. \diamond

Resultat (Selbstadjungiertheit und Spektraleigenschaften des Impulsoperators). Der Differentialoperator

$$P : D(P) = H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -i\partial_x \psi(x)]$$

ist selbstadjungiert mit Spektrum

$$\sigma(P) = \sigma_c(P) = \mathbb{R}.$$

Erklärung. Um die Selbstadjungiertheit und die Spektraleigenschaften zu zeigen, wird die Fourier-Transformation und insbesondere der Zusammenhang zwischen Differentiation und Multiplikation genutzt, siehe DENK (2012), Satz 1.19 und Satz 1.20. \diamond

Evolutionsoperatoren.

- (i) *Vorbemerkung.* In Hinblick auf numerische Berechnungen wird ein beschränktes Zeitintervall $[0, T]$ mit $T > 0$ betrachtet; die Resultate bleiben für Zeiten $t \in [0, \infty)$ bzw. $t \in \mathbb{R}$ gültig.
- (ii) *Ortsoperator.* Die Lösung der linearen partiellen Differentialgleichung (punktweise Auswertung bezüglich der Ortsvariable $x \in \mathbb{R}$, entspricht skalarer Differentialgleichung $i y'(t) = c y(t)$ mit Lösung $y(t) = e^{-itc}$ für $t \in \mathbb{R}$)

$$\begin{cases} i \partial_t \psi(x, t) = x \psi(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, T], \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

ist durch die folgende Darstellung gegeben

$$\psi(x, t) = e^{-itx} \psi_0(x), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T],$$

man beachte, daß diese Darstellung für beliebige Elemente $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ wohldefiniert ist und für alle Zeiten $t \in [0, T]$ auf ein Element $\psi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ führt, denn

$$\forall t \in [0, T]: \quad \|\psi(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}} |e^{-itx} \psi_0(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} |\psi_0(x)|^2 dx = \|\psi_0\|_{L^2}^2 < \infty.$$

Man beachte, daß die Lösungsdarstellung konsistent mit der Relation für den zugehörigen Evolutionsoperator mittels des Spektral-Maßes des Ortsoperators ist

$$\begin{aligned} M: \mathcal{B}(\mathbb{R}) &\longrightarrow L(L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})) : S \longmapsto M(S) = [\psi \mapsto \chi_S \psi], \\ Q = \int_{\mathbb{R}} \lambda dM(\lambda) : D(Q) &\longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}), \quad e^{-itQ} = \int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} dM(\lambda), \quad t \in [0, T], \\ \psi(x, t) &= (e^{-itQ} \psi_0)(x) = e^{-itx} \psi_0(x), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T]. \end{aligned}$$

- (iii) *Impulsoperator.* Die Lösung der linearen partiellen Differentialgleichung (vereinfachte $i \partial_t \psi(x, t) = -i \partial_x \psi(x, t)$)

$$\begin{cases} \partial_t \psi(x, t) = -\partial_x \psi(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, T], \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

ist durch die folgende Darstellung gegeben

$$\psi(x, t) = \psi_0(x - t), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T].$$

Für eine reguläre Anfangsbedingung ist diese Relation leicht durch Differenzieren zu überprüfen; da diese Darstellung für beliebige Elemente $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ wohldefiniert ist und für alle Zeiten $t \in [0, T]$ auf ein Element $\psi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ führt, muß diese Relation auch für den zugehörigen Evolutionsoperator gelten

$$\psi(x, t) = (e^{-itP} \psi_0)(x) = \psi_0(x - t), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T].$$

- (iv) *Kanonische Vertauschungsrelation.* Für eine Anfangsbedingung $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ zeigen elementare Rechnungen die Relationen (für $x \in \mathbb{R}$ und $s, t \in [0, T]$, Gleichheit in $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$)

$$\begin{aligned} (e^{-isQ} e^{-itP} \psi_0)(x) &= \left(e^{-isQ} \psi_0(\cdot - t) \right)(x) = e^{-itx} \psi_0(x - t), \\ (e^{-itP} e^{-isQ} \psi_0)(x) &= \left(e^{-itP} e^{-is(\cdot)} \psi_0 \right)(x) = e^{-is(x-t)} \psi_0(x - t), \end{aligned}$$

und somit die Kanonische Vertauschungsrelation nach Weyl

$$\forall \psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \quad \forall s, t \in [0, T]: \quad e^{ist} e^{-isQ} e^{-itP} \psi_0 = e^{-itP} e^{-isQ} \psi_0.$$

Kanonische Vertauschungsrelation und Orts-Impuls-Unschärferelation.

- (i) *Vorbemerkung.* Im Folgenden wird der Einfluß des reduzierten Planck'schen Wirkungsquantums

$$h \approx 6.626 \cdot 10^{-34} [Js], \quad \hbar = \frac{1}{2\pi} h \approx 1.055 \cdot 10^{-34} [Js],$$

welches bei der Definition des Impulsoperators auftritt, miteinbezogen.

- (ii) *Erinnerung.* Die Heisenberg'sche Unschärferelation besagt, daß für zwei selbstadjungierte Operatoren $A_1 : D(A_1) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ sowie $A_2 : D(A_2) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ und Elemente $h \in D(A_1^2) \cap D(A_2^2) \cap D(A_1 A_2) \cap D(A_2 A_1)$ mit $\|h\|_{\mathcal{H}} = 1$ die folgende Abschätzung gilt

$$\begin{aligned} \sqrt{V(A_1, h) V(A_2, h)} &\geq \frac{1}{2} |E(-i[A_1, A_2], h)|, \\ \|A_1 h - E(A_1, h)h\|_{\mathcal{H}} \|A_2 h - E(A_2, h)h\|_{\mathcal{H}} &\geq \frac{1}{2} |(-i[A_1, A_2] h | h)_{\mathcal{H}}| = |\Im(A_1 h | A_2 h)_{\mathcal{H}}|. \end{aligned}$$

- (iii) *Kanonische Vertauschungsrelation.* Betrachtet man speziell den Ortsoperator und den Impulsoperator, führt die Bestimmung des Kommutators auf (mittels Produktregel $\partial_x(x\psi(x)) = \psi(x) + x\partial_x\psi(x)$)

$$\forall \psi \in D(QP) \cap D(PQ): \quad ([Q, P]\psi)(x) = x(-i\hbar\partial_x\psi(x)) + i\hbar\partial_x(x\psi(x)) = i\hbar\psi(x);$$

dieses Resultat bezeichnet man als Kanonische Vertauschungsrelation nach Heisenberg

$$[Q, P] = i\hbar I : D(QP) \cap D(PQ) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto i\hbar\psi,$$

siehe DENK (2012), Satz 1.34.

- (iv) *Orts-Impuls-Unschärferelation.* Als direkte Folgerung aus der Heisenberg'sche Unschärferelation ergibt sich für Funktionen $\psi \in D(Q^2) \cap D(P^2) \cap D(QP) \cap D(PQ)$ mit $\|\psi\|_{L^2} = 1$ die Abschätzung

$$\sqrt{V(Q, \psi) V(P, \psi)} \geq \frac{1}{2} |E(-i[Q, P], \psi)| = \frac{1}{2} |(-i[Q, P]\psi | \psi)_{L^2}| = \frac{1}{2} \hbar \|\psi\|_{L^2}^2 = \frac{1}{2} \hbar,$$

was auf die bekannte Unschärferelation für Ort und Impuls führt

$$\sqrt{V(Q, \psi) V(P, \psi)} \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

4.4 Schrödinger-Gleichungen

Freie Schrödinger-Gleichung.

- (i) *Vorbemerkung.* In Hinblick auf numerische Berechnungen wird ein beschränktes Zeitintervall betrachtet.
- (ii) *Schrödinger-Gleichung.* Im Rahmen der Quantenmechanik wird ein Teilchen der Masse $m > 0$, auf welches keine zusätzlichen Kräfte wirken, durch den Hamilton-Operator

$$H : H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x)]$$

und die zugehörige zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{cases} i \partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times (0, T], \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

beschrieben.

- (iii) *Eindimensionaler Fall.* Als Vorbereitung für den relevanten dreidimensionalen Fall wird zunächst der eindimensionale Fall mit Hamilton-Operator (Betrachtung der normalisierten Formulierung ausreichend)

$$H : H^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\partial_{xx} \psi(x)]$$

untersucht. Offensichtlich gilt folgender Zusammenhang mit dem Impulsoperator

$$\begin{aligned} P : H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) &\longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -i \partial_x \psi(x)], \\ H = P^2 : H^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) &\longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\partial_{xx} \psi(x)]; \end{aligned}$$

aus der Selbstadjungiertheit und den Spektraleigenschaften des Impulsoperators

$$\sigma(P) = \sigma_c(P) = \mathbb{R}, \quad \sigma_p = \emptyset,$$

folgt, daß der Hamilton-Operator selbstadjungiert ist und das Spektrum durch die nicht-negativen reellen Zahlen gegeben ist²

$$\sigma(H) = \sigma_c(H) = [0, \infty), \quad \sigma_p = \emptyset.$$

²*Bemerkung.* Für eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{d \times d}$ mit Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ und zugehörigem Eigenvektor $v \in \mathbb{C}^d$ gilt offensichtlich die Implikation

$$\begin{aligned} Av = \lambda v, \quad A^2 v = \lambda Av = \lambda^2 v, \\ \lambda \in \sigma(A) \implies \lambda^2 \in \sigma(A^2). \end{aligned}$$

Ähnliche Überlegungen gelten für unbeschränkte Operatoren und Elemente des kontinuierlichen Spektrums.

Der Hamilton-Operator ist die abgeschlossene Erweiterung des im Wesentlichen selbstadjungierten Operators (Definitionsbereich gegeben durch Raum der Testfunktionen)

$$H_0 : \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\partial_{xx}\psi(x)], \quad H = \overline{H_0}.$$

Die Relation (verwende partielle Integration)

$$\forall \psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \quad (-\partial_{xx}\psi | \psi)_{L^2} = \|\partial_x \psi\|_{L^2}^2 \geq 0,$$

zeigt, daß der Operator H_0 und folglich der Hamilton-Operator H positiv sind.

- (iv) *Dreidimensionaler Fall.* Aus den Resultaten für den eindimensionalen Fall ergeben sich die entsprechenden Aussagen für den dreidimensionalen Fall

$$\begin{aligned} P_k &: H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow (\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -i\partial_{x_k}\psi(x)], \quad k \in \{1, 2, 3\}, \\ H &= P_1^2 + P_2^2 + P_3^2 : H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \subset L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\Delta\psi(x)], \\ \sigma(H) &= \sigma_c(H) = [0, \infty), \quad \sigma_p = \emptyset, \\ \forall \psi \in H^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) &: \quad (H\psi | \psi)_{L^2} \geq 0. \end{aligned}$$

Schrödinger-Gleichung mit quadratischen Potential.

- (i) *Schrödinger-Gleichung.* Im Rahmen der Quantenmechanik wird ein Teilchen der Masse $m > 0$ unter der Einwirkung eines quadratischen Potentials durch den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{1}{2}(\omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 + \omega_3 x_3^2), \quad x = (x_1, x_2, x_3)^T \in \mathbb{R}^3, \\ H &: D(H) \subset L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x)], \end{aligned}$$

und die zugehörige zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{cases} i\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R}^3 \times (0, T), \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}^3, \end{cases}$$

beschrieben.

- (ii) *Eindimensionaler Fall.* Als Vorbereitung für den relevanten dreidimensionalen Fall wird zunächst der eindimensionale Fall mit Hamilton-Operator (Betrachtung der normalisierten Formulierung ausreichend)

$$H : D(H) \subset L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) : \psi \longmapsto [x \mapsto -\partial_{xx}\psi(x) + x^2\psi(x)]$$

untersucht. Zur Bestimmung des Punktspektrums ist es hilfreich, die Operatoren (vergleiche mit Ortsoperator und Impulsoperator)

$$\begin{aligned} Q_0 &: D(Q_0) = \mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}) : \psi \longrightarrow [x \mapsto x\psi(x)], \\ P_0 &: D(P_0) = \mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R}) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}) : \psi \longrightarrow [x \mapsto -i\partial_x\psi(x)], \end{aligned}$$

einzuführen, wobei als Definitionsbereich der Schwartz-Raum gewählt wird; für den Kommutator und verschiedene Kombinationen gelten die folgenden Relationen (der Operator $H_0 = H|_{\mathcal{S}(\mathbb{R})}$ ist offensichtlich symmetrisch und strikt positiv, der Erzeugungsoperator A_+ und der Vernichtungsoperator A_- werden als Leiter-Operatoren bezeichnet, Teilchenzahl- bzw. Besetzungszahl-Operator A_+A_-)

$$\begin{aligned}
H_0 &= \frac{1}{2}(Q_0^2 + P_0^2) : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}) : \psi \longmapsto \left[x \mapsto -\frac{1}{2} \partial_{xx} \psi(x) + \frac{1}{2} x^2 \psi(x) \right], \\
\forall \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) : & \quad (H_0 \psi_1 | \psi_2)_{L^2} = (\psi_1 | H_0 \psi_2)_{L^2}, \\
\forall \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \text{ mit } \psi \neq 0 : & \quad (H_0 \psi | \psi)_{L^2} > 0, \\
A_+ &= A = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 - iP_0) : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}), \\
A_- &= A^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_0 + iP_0) : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}), \\
[Q_0, P_0] &= iI : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}) : \psi \longmapsto i\psi(x), \\
[A_+, A_-] &= I : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}), \\
H_0 &= A_+A_- + \frac{1}{2}I : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}), \\
A_+A_-A_+ &= A_+(A_+A_- + I) : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}), \\
A_+A_-A_- &= A_-(A_+A_- - I) : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}).
\end{aligned}$$

Mit Hilfe der Leiter-Operatoren werden die Hermite-Funktionen konstruiert, welche Eigenfunktionen von H_0 bilden (mit Eigenwerten $\lambda_k \propto k + \frac{1}{2}$)

$$H_0 \mathcal{B}_k(x) = \lambda_k \mathcal{B}_k(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad k \in \mathbb{N}_{\geq 0},$$

und auf ein vollständiges Orthonormalsystem des $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ führen. Der Hamilton-Operator H ergibt sich als Friedrichs-Erweiterung von H_0 , ist insbesondere selbstadjungiert, und es gelten die Spektraleigenschaften

$$\sigma(H) = \sigma_p(H) = \{\lambda_k : k \in \mathbb{N}_{\geq 0}\}, \quad \sigma_c = \emptyset.$$

- (iii) *Dreidimensionaler Fall.* Aus den Resultaten für den eindimensionalen Fall ergeben sich die entsprechenden Aussagen für den dreidimensionalen Fall. Ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenfunktionen erhält man mittels Tensorprodukt und die zugehörigen Eigenwerte durch Summation

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_k(x) &= \mathcal{B}_{(k_1, k_2, k_3)}(x_1, x_2, x_3) = \mathcal{B}_{k_1}(x_1) \mathcal{B}_{k_2}(x_2) \mathcal{B}_{k_3}(x_3), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad k \in \mathbb{N}_{\geq 0}^3, \\
\lambda_k &= \lambda_{(k_1, k_2, k_3)} = \lambda_{k_1} + \lambda_{k_2} + \lambda_{k_3}, \quad k \in \mathbb{N}_{\geq 0}^3.
\end{aligned}$$

- (iv) *Lösungsdarstellung.* Die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential ist durch die folgende Darstellung gegeben (Konvergenz der unendlichen Reihen in $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$)

$$\begin{aligned}
\psi_0(x) &= \sum_{k \in \mathbb{N}_{\geq 0}^3} (\psi_0 | \mathcal{B}_k)_{L^2} \mathcal{B}_k(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \\
\psi(x, t) &= \sum_{k \in \mathbb{N}_{\geq 0}^3} (\psi_0 | \mathcal{B}_k)_{L^2} e^{-it\lambda_k} \mathcal{B}_k(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad t \in [0, T].
\end{aligned}$$

Zusätzliche Überlegungen zur Konstruktion und Auswertung der Hermite-Basisfunktionen sind im Anhang angegeben; detaillierte Informationen zur numerischen Berechnung sind im Skriptum *Time-Splitting Spectral Methods for Nonlinear Schrödinger Equations* (2011) zu finden.

Lösungsdarstellung mittels Hermite-Basisfunktionen

Inhalt. Im Folgenden werden Überlegungen zur analytischen Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential angegeben; die betrachtete Schrödinger-Gleichung ist durch den linearen Differentialoperator

$$\mathcal{A}(x) = -\Delta + V_\gamma(x) I, \quad V_\gamma(x) = \sum_{j=1}^d \gamma_j^4 x_j^2, \quad \gamma_j > 0, \quad j \in \{1, \dots, d\}, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

definiert. Es wird nur der Spezialfall einer Raumdimension im Detail behandelt; die Erweiterung auf den mehrdimensionalen Fall basiert auf dem zuvor angegebenen Tensorprodukt der eindimensionalen Basisfunktionen. Zur Vereinfachung werden die Definitionsbereiche der auftretenden Differentialoperatoren nicht angegeben; dazu sei auf frühere Überlegungen verwiesen. Die im Folgenden verwendeten Bezeichnungen unterscheiden sich von den früher gewählten Bezeichnungen.

Situation. Die Hermite-Basisfunktionen $(\mathcal{H}_m^Y)_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}}$ sind Eigenfunktionen des linearen Differentialoperators

$$\mathcal{A}(x) = -\partial_{xx} + \gamma^4 x^2 I, \quad \gamma > 0, \quad x \in \mathbb{R},$$

mit zugehörigen Eigenwerten $(\lambda_m)_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}}$, d.h. es gilt

$$\mathcal{A} \mathcal{H}_m^Y = \lambda_m \mathcal{H}_m^Y, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0};$$

somit bilden sie ein vollständiges Orthonormalsystem des Lebesgue-Raumes $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Im Folgenden werden diese Funktionen mit Hilfe von Leiter-Operatoren konstruiert; in Hinblick auf die effiziente Auswertung der Hermite-Basisfunktionen wird zudem eine Dreiterm-Rekursion abgeleitet.

Leiter-Operatoren und grundlegende Relationen. Die algebraische Identität (für $a, b \in \mathbb{R}$)

$$(a + b)(a - b) = a^2 - b^2$$

legt die Betrachtung der linearen Differentialoperatoren (Leiter-Operatoren $\mathcal{A}_+, \mathcal{A}_-$)

$$\mathcal{A}_+(x) = \partial_x + \gamma^2 x I, \quad \mathcal{A}_-(x) = -\partial_x + \gamma^2 x I, \quad \mathcal{A}(x) = -\partial_{xx} + \gamma^4 x^2 I,$$

nahe. Elementare Rechnungen zeigen, daß die Operatoren \mathcal{A}_+ und \mathcal{A}_- nicht kommutieren und insbesondere ihr Produkt verschieden von \mathcal{A} ist

$$[\mathcal{A}_+, \mathcal{A}_-] \neq 0, \quad \mathcal{A} \neq \mathcal{A}_+ \mathcal{A}_-, \quad \mathcal{A} \neq \mathcal{A}_- \mathcal{A}_+.$$

Man kann jedoch die Tatsache, daß der Kommutator ein Vielfaches der Identität ist, nützen; genauer, wegen (mit regulärer Funktion $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$)

$$\begin{aligned} (\mathcal{A}_+ \mathcal{A}_- f)(x) &= (\partial_x + \gamma^2 x)(-\partial_x + \gamma^2 x)f(x) \\ &= \partial_x(-\partial_x f(x) + \gamma^2 x f(x)) + \gamma^2 x(-\partial_x f(x) + \gamma^2 x f(x)) \\ &= -\partial_{xx} f(x) + \gamma^2 f(x) + \gamma^2 x \partial_x f(x) - \gamma^2 x \partial_x f(x) + \gamma^4 x^2 f(x) \\ &= (\mathcal{A} + \gamma^2 I)f(x), \\ (\mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ f)(x) &= (-\partial_x + \gamma^2 x)(\partial_x + \gamma^2 x)f(x) \\ &= -\partial_x(\partial_x f(x) + \gamma^2 x f(x)) + \gamma^2 x(\partial_x f(x) + \gamma^2 x f(x)) \\ &= -\partial_{xx} f(x) - \gamma^2 f(x) - \gamma^2 x \partial_x f(x) + \gamma^2 x \partial_x f(x) + \gamma^4 x^2 f(x) \\ &= (\mathcal{A} - \gamma^2 I)f(x), \end{aligned}$$

erhält man die folgenden Relationen

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_+ \mathcal{A}_- &= \mathcal{A} + \gamma^2 I, & \mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ &= \mathcal{A} - \gamma^2 I, \\ [\mathcal{A}_+, \mathcal{A}_-] &= 2\gamma^2 I. \end{aligned}$$

Einsetzen dieser Identitäten ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_+ \mathcal{A} &= \mathcal{A}_+ (\mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ + \gamma^2 I) = (\mathcal{A}_+ \mathcal{A}_- + \gamma^2 I) \mathcal{A}_+ = (\mathcal{A} + 2\gamma^2 I) \mathcal{A}_+, \\ \mathcal{A}_- \mathcal{A} &= \mathcal{A}_- (\mathcal{A}_+ \mathcal{A}_- - \gamma^2 I) = (\mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ - \gamma^2 I) \mathcal{A}_- = (\mathcal{A} - 2\gamma^2 I) \mathcal{A}_-, \end{aligned}$$

und führt somit auf die Relationen

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_+ \mathcal{A} &= (\mathcal{A} + 2\gamma^2 I) \mathcal{A}_+, & \mathcal{A}_- \mathcal{A} &= (\mathcal{A} - 2\gamma^2 I) \mathcal{A}_-, \\ [\mathcal{A}_+, \mathcal{A}] &= 2\gamma^2 \mathcal{A}_+, & [\mathcal{A}_-, \mathcal{A}] &= -2\gamma^2 \mathcal{A}_-. \end{aligned}$$

Hermite-Basisfunktionen.

- (i) *Hermite-Basisfunktion* \mathcal{H}_0^γ . Die Hermite-Basisfunktion \mathcal{H}_0^γ ist durch (Gewichtsfunktion, zusätzliche Normierung)

$$\begin{aligned} w: \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}: x \longmapsto e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, & \quad \|w\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}} e^{-\gamma^2 x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma^2}}, \\ \mathcal{H}_0^\gamma = \frac{1}{\|w\|_{L^2}} w: \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}: x \longmapsto \sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \end{aligned}$$

gegeben und erfüllt die Eigenwertrelation

$$\mathcal{A} \mathcal{H}_0^\gamma = \lambda_0 \mathcal{H}_0^\gamma, \quad \lambda_0 = \gamma^2;$$

setzt man nämlich die Bedingung $\mathcal{A}_+ w = 0$, welche einer gewöhnlichen Differentialgleichung mit bekannter Lösung entspricht

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_+ w &= 0, \\ \forall x \in \mathbb{R}: \quad \partial_x w(x) &= -\gamma^2 x w(x), \\ \forall x \in \mathbb{R}: \quad w(x) &= e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \end{aligned}$$

voraus, so folgt dies aus der zuvor angegebenen Relation $\mathcal{A} = \mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ + \gamma^2 I$

$$\mathcal{A}_+ w = 0 \implies \mathcal{A} w = (\mathcal{A}_- \mathcal{A}_+ + \gamma^2 I) w = \gamma^2 w.$$

- (ii) *Vorbemerkung.* Es sei $m \in \mathbb{N}_{\geq 0}$. Wie später gezeigt wird, hat die m -te Hermite-Basisfunktion die Struktur

$$\mathcal{H}_m^\gamma : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : x \longmapsto C_m H_m(x) e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}$$

mit Normierungskonstante $C_m > 0$ und Polynomfunktion H_m vom Grad m . Mittels partieller Integration und Anwendung der Eigenwertrelation $\mathcal{A} \mathcal{H}_m^\gamma = \lambda_m \mathcal{H}_m^\gamma$ sowie der Normierungsbedingung $\|\mathcal{H}_m^\gamma\|_{L^2} = 1$ ergibt sich (Randterme verschwinden)

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} x \mathcal{H}_m^\gamma(x) \partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) dx &= \int_{\mathbb{R}} x \frac{1}{2} \partial_x (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\ &= -\frac{1}{2}, \\ \int_{\mathbb{R}} (\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 + \gamma^4 x^2 (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx &= \int_{\mathbb{R}} (\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx + \int_{\mathbb{R}} \gamma^4 x^2 (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_m^\gamma(x) \partial_{xx} \mathcal{H}_m^\gamma(x) dx + \int_{\mathbb{R}} \gamma^4 x^2 (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_m^\gamma(x) (-\partial_{xx} \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^4 x^2 \mathcal{H}_m^\gamma(x)) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_m^\gamma(x) \mathcal{A}(x) \mathcal{H}_m^\gamma(x) dx \\ &= \lambda_m \int_{\mathbb{R}} (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\ &= \lambda_m; \end{aligned}$$

insgesamt erhält man die Relationen

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma\|_{L^2}^2 &= \int_{\mathbb{R}} (\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^2 x \mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} (\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 + \gamma^4 x^2 (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx + 2\gamma^2 \int_{\mathbb{R}} x \mathcal{H}_m^\gamma(x) \partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) dx \\
&= \lambda_m - \gamma^2, \\
\|\mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma\|_{L^2}^2 &= \int_{\mathbb{R}} (-\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^2 x \mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} (\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 + \gamma^4 x^2 (\mathcal{H}_m^\gamma(x))^2 dx - 2\gamma^2 \int_{\mathbb{R}} x \mathcal{H}_m^\gamma(x) \partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) dx \\
&= \lambda_m + \gamma^2,
\end{aligned}$$

(iii) *Aufsteigen.* Ausgehend von der Eigenwertrelation für die m -te Hermite-Basisfunktion

$$\mathcal{A} \mathcal{H}_m^\gamma = \lambda_m \mathcal{H}_m^\gamma, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0},$$

ergibt sich bei Anwendung der zuvor abgeleiteten Identität $\mathcal{A}_- \mathcal{A} = (\mathcal{A} - 2\gamma^2 I) \mathcal{A}_-$ die Relation (für $m \in \mathbb{N}_{\geq 0}$)

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_- \mathcal{A} \mathcal{H}_m^\gamma &= \lambda_m \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma, \\
\mathcal{A} \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma - 2\gamma^2 \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma &= \lambda_m \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma, \\
\mathcal{A} \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma &= (2\gamma^2 + \lambda_m) \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma, \\
f = \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma: \quad \mathcal{A} f &= (2\gamma^2 + \lambda_m) f,
\end{aligned}$$

welche zeigt, daß die Funktion f ebenfalls eine Eigenfunktion von \mathcal{A} ist; bei zusätzlicher Normierung $\|\mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma\|_{L^2} = \sqrt{\gamma^2 + \lambda_m}$ erhält man (im Folgenden angegebene Überlegungen rechtfertigen die Bezeichnung)

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} \mathcal{H}_{m+1}^\gamma &= \lambda_{m+1} \mathcal{H}_{m+1}^\gamma, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0}, \\
\mathcal{H}_{m+1}^\gamma &= \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 + \lambda_m}} \mathcal{A}_- \mathcal{H}_m^\gamma, \quad \lambda_{m+1} = 2\gamma^2 + \lambda_m, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0}.
\end{aligned}$$

Einsetzen des Eigenwertes $\lambda_0 = \gamma^2$ führt auf

$$\lambda_m = (1 + 2m)\gamma^2, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0},$$

und die folgende Relation für die Hermite-Basisfunktionen

$$\mathcal{H}_{m+1}^\gamma(x) = \frac{1}{\sqrt{2(m+1)\gamma}} (-\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^2 x \mathcal{H}_m^\gamma(x)), \quad x \in \mathbb{R}, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0}.$$

(iv) *Absteigen.* Ähnliche Argumente und Anwendung der Relationen $\mathcal{A}_+ \mathcal{A} = (\mathcal{A} + 2\gamma^2 I) \mathcal{A}_+$ sowie $\|\mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma\|_{L^2} = \sqrt{-\gamma^2 + \lambda_m} = \sqrt{2m\gamma^2}$ zeigen (für $m \in \mathbb{N}_{\geq 0}$)

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} \mathcal{H}_m^\gamma &= \lambda_m \mathcal{H}_m^\gamma, \\
\mathcal{A}_+ \mathcal{A} \mathcal{H}_m^\gamma &= \lambda_m \mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma, \\
\mathcal{A} \mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma + 2\gamma^2 \mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma &= \lambda_m \mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma, \\
\mathcal{A} \mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma &= (-2\gamma^2 + \lambda_m) \mathcal{A}_+ \mathcal{H}_m^\gamma,
\end{aligned}$$

was somit auf die folgende Eigenwertrelation führt

$$\begin{aligned} \mathcal{A} \mathcal{H}_{m-1}^\gamma &= \lambda_{m-1} \mathcal{H}_{m-1}^\gamma, \quad m \in \mathbb{N}, \\ \mathcal{H}_{m-1}^\gamma(x) &= \frac{1}{\sqrt{2m\gamma}} (\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^2 x \mathcal{H}_m^\gamma(x)), \quad x \in \mathbb{R}, \quad m \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

(v) *Rekursion.* Summiert man die Auf- und Absteigerelationen (für $x \in \mathbb{R}$ und $m \in \mathbb{N}$)

$$\begin{aligned} \sqrt{2(m+1)\gamma} \mathcal{H}_{m+1}^\gamma(x) &= -\partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^2 x \mathcal{H}_m^\gamma(x), \\ \sqrt{2m\gamma} \mathcal{H}_{m-1}^\gamma(x) &= \partial_x \mathcal{H}_m^\gamma(x) + \gamma^2 x \mathcal{H}_m^\gamma(x), \end{aligned}$$

ergibt sich eine Dreiterm-Rekursion

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0^\gamma(x) &= \sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \quad \mathcal{H}_1^\gamma(x) = \sqrt[4]{\frac{4\gamma^6}{\pi}} x e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \\ \mathcal{H}_{m+1}^\gamma(x) &= \frac{1}{\sqrt{m+1}} (\sqrt{2}\gamma x \mathcal{H}_m^\gamma(x) - \sqrt{m} \mathcal{H}_{m-1}^\gamma(x)), \quad x \in \mathbb{R}, \quad m \in \mathbb{N}, \end{aligned}$$

welche zur Auswertung der Hermite-Basisfunktionen genützt wird. Man beachte, daß dies insbesondere zeigt, daß die m -te Hermite-Basisfunktion als Produkt einer Polynomfunktion vom Grad m , des m -ten Hermite-Polynomes, und der exponentiellen Gewichtsfunktion gegeben ist

$$\mathcal{H}_m^\gamma(x) = H_m^\gamma(x) e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0}.$$

Zusammenfassung.

(i) *Rekursive Berechnung.* Zur Auswertung der Hermite-Polynome $H_m^\gamma: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ für $m \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ nützt man die Rekursion

$$\begin{aligned} H_0^\gamma(x) &= \sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\pi}}, \quad H_1^\gamma(x) = \sqrt[4]{\frac{4\gamma^6}{\pi}} x, \\ H_{m+1}^\gamma(x) &= \frac{1}{\sqrt{m+1}} (\sqrt{2}\gamma x H_m^\gamma(x) - \sqrt{m} H_{m-1}^\gamma(x)), \quad x \in \mathbb{R}, \quad m \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Im eindimensionalen Fall sind die Hermite-Basisfunktionen durch die Relation

$$H_m^\gamma: \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}: x \longmapsto \mathcal{H}_m^\gamma(x) = H_m^\gamma(x) e^{-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2}, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0},$$

gegeben; in d Raumdimensionen führt die Bildung des Tensorproduktes auf (wie üblich bezeichne $m = (m_1, \dots, m_d) \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d$ und $x = (x_1, \dots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$)

$$\mathcal{H}_m^\gamma: \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}: x \longmapsto \mathcal{H}_{m_1}^{\gamma_1}(x_1) \cdots \mathcal{H}_{m_d}^{\gamma_d}(x_d), \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d.$$

- (ii) *Vollständiges Orthonormalsystem.* Die Familie $(\mathcal{H}_m^Y)_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d}$ bildet ein vollständiges Orthonormalsystem des Lebesgue-Raumes $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, insbesondere gilt

$$(\mathcal{H}_k^Y | \mathcal{H}_m^Y)_{L^2} = \delta_{km}, \quad k, m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d;$$

folglich sind für jedes Element $f \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ die Relationen (Konvergenz der unendlichen Reihe in $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, Parseval'sche Identität)

$$f = \sum_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d} (f | \mathcal{H}_m^Y)_{L^2} \mathcal{H}_m^Y, \quad \|f\|_{L^2} = \sqrt{\sum_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d} |(f | \mathcal{H}_m^Y)_{L^2}|^2},$$

gültig.

- (iii) *Eigenfunktionen und Eigenwerte.* In Hinblick auf die Darstellung der Lösung der Schrödinger-Gleichung mit quadratischem Potential ist zudem wesentlich, daß die Hermite-Basisfunktionen $(\mathcal{H}_m^Y)_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d}$ Eigenfunktionen des definierenden Differentialoperators mit zugehörigen positiven Eigenwerten $(\lambda_m)_{m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d}$ bilden

$$\mathcal{A} \mathcal{H}_m^Y = \lambda_m \mathcal{H}_m^Y,$$

$$\mathcal{A}(x) = -\Delta + V_\gamma(x) I, \quad V_\gamma(x) = \sum_{j=1}^d \gamma_j^4 x_j^2, \quad \gamma_j > 0, \quad j \in \{1, \dots, d\}, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

$$\lambda_m = \lambda_{m_1} + \dots + \lambda_{m_d} = \gamma_1^2 (1 + 2m_1) + \dots + \gamma_d^2 (1 + 2m_d) > 0, \quad m \in \mathbb{N}_{\geq 0}^d,$$

vergleiche früher angegebene Überlegungen.