

Analysis der Schrödinger-Gleichung in Streusituationen

Bachelorarbeit

Andreas Buttlinger-Kreuzhuber

Betreuer: Univ. Prof. Anton Arnold

TU Wien

7. November 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Notationen	5
3	Die lineare stationäre Schrödingergleichung	6
3.1	Ein einfaches Modell	7
4	Vorbereitungen	10
4.1	Sobolevräume	10
4.2	Halbgruppentheorie	10
5	Die Schrödingergleichung mit gegebenem Potential	12
6	Die Schrödingergleichung mit zeitabhängigem Potential	13
6.1	Generelle Annahmen	13
6.2	Lösung auf den Leitern Ω_l und Ω_r	14
6.3	Existenz- und Eindeutigkeitsaussage	15
6.4	TBC und Dissipationsabschätzungen	17
7	Die nichtlineare Schrödingergleichung - SPS	21
7.1	Lokale Existenz und Eindeutigkeit	21
7.2	Globale Existenz und Eindeutigkeit	25

1 Einleitung

Die vorliegende Bachelorarbeit befasst sich mit der Analysis der eindimensionalen Schrödingergleichung in Streusituationen. Die Untersuchung dieses mathematischen Modells wird vor allem durch die moderne Halbleitertechnologie motiviert. Moderne Halbleiterbauelemente, wie zum Beispiel Transistoren und Dioden, werden durch die fortschreitende Miniaturisierung immer kleiner. Mittlerweile sind die Größenordnungen vergleichbar mit der De-Broglie Wellenlänge von Elektronen. Es kommt also zu quantenmechanischen Effekten. Dadurch wird eine quantenmechanische Beschreibung, wie sie die Schrödingergleichung bietet, unerlässlich.

In Halbleiterbauelementen sind vor allem Situationen interessant, wo Strom fließt, auch Streusituationen genannt. Stromfluss ist durch Ladungstransport definiert. Der Ladungstransport erfolgt in den zu untersuchenden Situationen vor allem durch Elektronen. Wir nehmen an, dass die Elektronen beim Durchgang keine Stöße erleiden, das heißt, der Elektronentransport durch die aktive Region erfolgt ballistisch. Diese Annahme ist durch den geringen Durchmesser der aktiven Region gerechtfertigt.

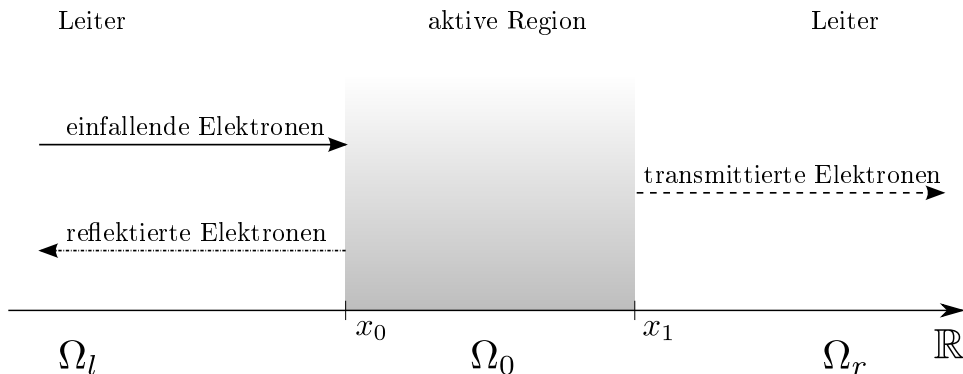
Es gibt drei verschiedene mathematische Herangehensweisen um dieses Problem zu lösen: die Dichtematrixformulierung, die Schrödingerformulierung und die Wignerformulierung. Wir verwenden nachfolgend die Schrödingerformulierung, das heißt, unendlich viele Schrödingergleichungen beschreiben das System. Diese Menge von Gleichungen wird auch als Schrödingergleichung gemischter Zustände bezeichnet. Ein anschaulicher Beweis zur Äquivalenz des Dichtematrixformalismus und der Schrödingergleichung gemischter Zustände, findet sich in [Jün09, Chapter 10].

Im Folgenden betrachten wir ein Modellproblem, erstmals gestellt durch [LK90]. Ursprünglich war dieses Problem zweidimensional formuliert, wir beschränken uns auf den eindimensionalen Fall. Dann sieht das Problem folgendermaßen aus:

Das gesamte Gebiet \mathbb{R} wird unterteilt in 3 Gebiete. Zwei Leiterregionen umschließen ein aktives Gebiet Ω_0 . Die Ränder der Leiter bezeichnen wir mit x_l und x_r . Wir suchen nun Lösungen der Schrödingergleichungen bei gegebenem Potential V .

Wir lassen nun Strom zwischen den zwei Leitern fließen, das heißt, es herrscht ein ständiger Elektronenfluss. Das gesamte System befindet sich also in einem Ungleichgewicht, während hingegen sich die Leiter jeweils im Gleichgewicht befinden. Man spricht von einem offenen Quantensystem. Dieses ist durch getrennte Teilchenreservoirs charakterisiert, sodass man insgesamt gesehen diesen Ungleichgewichtszustand aufrechterhalten kann.

Um dieses Problem numerisch günstiger lösen zu können, setzt man voraus, dass die aktive Region beschränkt ist und nur durch Randbedingungen an x_l und x_r mit der Umgebung wechselwirkt. Dadurch reicht es aus, die aktive Region zu modellieren. Natürlich stellt sich die Frage nach der Wahl



der Randbedingungen. Frensey analysierte in [Fre90] verschiedene Randbedingungen und zeigte, dass nur zeitirreversible Randbedingungen in offenen Quantensystemen physikalisch relevant sind. Diese können simuliert werden indem man von den Leitern fordert, dass sie vollkommen absorbieren. Das heißt, von der aktiven Region nach außen laufende Wellen haben keinen Einfluss mehr auf die aktive Region. Man spricht dann von absorbierenden Randbedingungen.

Analog zu [LK90] benützen wir gemischte Randbedingungen, dies ist auch als QTBM (quantum transmitting boundary method) bekannt. Die numerisch geeigneten gemischten Randbedingungen bezeichnet man auch als transparente Randbedingungen, kurz TBC. Diese ermöglichen eine korrekte numerische Lösung des Problems, hier sei auf die Revision [AAB⁺08] hingewiesen.

In dieser Bachelorarbeit sind wir insofern an den Randbedingungen interessiert, als sie uns bei der Analysis des Problems behilflich sein werden.

Im Laufe der Bachelorarbeit werden die Modelle mehr der physikalischen Realität angepasst und allgemeinere Problemstellungen zugelassen. Wir beginnen mit einem einfachen stationären Modell, kommen dann zu linearen Modellen und enden mit einem nichtlinearen Modell, dem Schrödinger-Poisson System (SPS). Unter einem SPS versteht man ein System, in welchem die Poissongleichung die Wechselwirkung zwischen den Elektronen berücksichtigt. Zum ursprünglich gegebenen Potential addiert man im SPS das mittlere Potential, welches von den Elektronen erzeugt und als selbstkonsistentes Potential bezeichnet wird.

Das Ziel dieser Bachelorarbeit ist ein globaler Existenz- und Eindeigkeitsatz für das eindimensionale Schrödinger-Poisson System auf dem ganzen Raum \mathbb{R} (siehe Satz 7.4).

2 Notationen

Re	Realteil einer komplexen Zahl
Im	Imaginärteil einer komplexen Zahl
\bar{z}	z komplex konjugiert, $z \in \mathbb{C}$
Ω	Gebiet in \mathbb{R}
$L^p(\Omega)$	Lebesgueraum auf der offenen Menge Ω , $1 \leq p \leq \infty$
$H^k(\Omega)$	Sobolevraum auf Ω mit Differentiationsindex $k \in \mathbb{Z}$, Integrabilitätsindex 2
$W^{k,p}(\Omega)$	Sobolevraum auf Ω mit Differentiationsindex $k \in \mathbb{Z}$, Integrabilitätsindex p , $1 \leq p \leq \infty$
$C^k(\Omega, X)$	Raum der k -fach differenzierbaren Funktionen auf Ω mit Werten im Banachraum X , $k \in \mathbb{N}_0$
$C^\infty(\Omega)$	Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen auf Ω
$\hat{\varphi}$	Fouriertransformierte der Funktion φ
x	Ortskoordinate, $x \in \mathbb{R}$
t	Zeit, $t \in \mathbb{R}$
\hbar	Reduzierte Planckkonstante
m	Masse des Teilchens, $m > 0$
q	Ladung des Teilchens
E	Energie des Teilchens
k	Kreiswellenzahl, $k \in \mathbb{R}$
p	Impuls, $p \in \mathbb{R}$
R	Reflexionskoeffizient, $R \in \mathbb{R}$
T	Transmissionskoeffizient, $T \in \mathbb{R}$
H	Hamiltonoperator
$V(x, t)$	Zeit- und ortsabhängiges elektrostatisches Potential, $V \in \mathbb{R}$
$\psi(x, t)$	komplexwertige Schrödingerwellenfunktion, also $\psi \in \mathbb{C}$
$\rho(x, y, t)$	Dichtematrixfunktion
$n(x, t)$	räumliche Dichteverteilung, $n \geq 0$
$J(x, t)$	(Teilchen)Stromdichte
$f(k)$	Elektronenimpulsdichtefunktion
$D(A)$	Definitionsbereich von A
\hookrightarrow	stetige Einbettung in normierten Räumen
∂_t	partielle Ableitung nach der Zeit
Δ	Laplaceoperator, zweifache partielle Ableitung nach dem Ort
$\mathcal{I}^{1/2}$	Abelintegral von halber Ordnung
$\partial^{1/2}$	partielle Zeitableitung von halber Ordnung

3 Die lineare stationäre Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung in \mathbb{R} lautet:

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = H\psi(x,t), \quad t > 0, \quad \psi(\cdot, 0) = \psi_0 \quad (3.1)$$

Hier ist $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$ und H der Hamiltonoperator. Die komplexe Funktion $\psi(x,t)$ repräsentiert dabei in gewisser Weise die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons. Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen n ist durch $n(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ gegeben. Der Hamiltonoperator nimmt zum Beispiel für ein Elektron bei stationärem Potential V folgende Form an:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - qV(x)$$

Wir wollen noch ein paar allgemeine Begriffe einführen. Die Dichtematrix ρ ist definiert durch

$$\rho(x,y,t) = \int_0^\infty f(k)\psi_k(x,t)\overline{\psi_k(y,t)}dk$$

die Elektronendichte n folgt aus $n(x,t) = \rho(x,x,t)$ und ist damit gleich

$$n(x,t) = \int_0^\infty f(k)|\psi_k(x,t)|^2dk \quad (3.2)$$

Weiters können wir nun auch den elektrischen Strom J festlegen:

$$J(x,t) = \int_0^\infty f(k) \operatorname{Im}(\overline{\psi_k(x,t)}\partial_x\psi_k(x,t))dk \quad (3.3)$$

Wir führen nun eine formale Rechnung durch, um die stationäre Schrödingergleichung zu erhalten. Wir wählen für ψ den Ansatz $\psi(x,t) = \exp(-iEt/\hbar)\phi(x)$, das heißt wir separieren ψ in einen zeitabhängigen Phasenfaktor und in eine ortsabhängige Funktion $\phi(x)$. Dann folgt nach Einsetzen in (3.1):

$$H\psi = E\psi$$

und anschließender Division durch $e^{-iEt/\hbar}$ die stationäre Schrödingergleichung:

$$H\phi(x) = E\phi(x)$$

Die stationäre Schrödingergleichung repräsentiert also eine Eigenwertgleichung für ϕ , die im Falle eines Elektrons so aussieht:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\phi - qV(x)\phi = E\phi \quad (3.4)$$

Eine äquivalente Formulierung dieser Gleichung (3.4) ergibt sich, indem man die Kreiswellenzahl k einführt. Da diese im direkten Verhältnis zum Impuls p steht, $p = \hbar k$, gilt $E = k^2(\hbar^2/2m)$ und dadurch folgt unmittelbar, indem man das Potential geeignet skaliert:

$$-\phi''(x) - V\phi(x) = k^2\phi(x)$$

Da man meist ein ganzes Ensemble von Elektronen betrachtet, wählen wir, wie in der Einleitung schon erwähnt, eine Beschreibung als Schrödingersystem gemischter Zustände. Da die Elektronen aber in verschiedenen, vom Impuls abhängigen Zuständen vorliegen, wollen wir die Schrödingerwellenfunktionen des zu k gehörigen Zustands mit dem Index k kennzeichnen. Im stationären Fall bedeutet dies, das System ist durch abzählbar viele Gleichungen der Form

$$-\phi_k''(x) - V\phi_k(x) = k^2\phi_k(x) \quad (3.5)$$

gegeben.

3.1 Ein einfaches Modell

Nach diesen Bemerkungen gehen wir nun auf ein einfaches Modellproblem im stationären Fall ein. Zur weiteren Vereinfachung soll unsere aktive Region das Intervall $(0, 1)$ sein, d.h. $x_l = 0$ und $x_r = 1$. Wir unterteilen \mathbb{R} also in 3 Gebiete:

$$\Omega_l := (-\infty, 0), \quad \Omega_0 := (0, 1), \quad \Omega_r := (1, \infty)$$

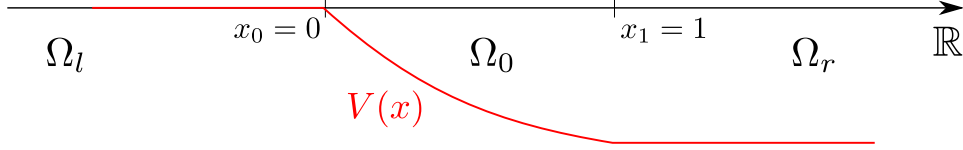
Das stationäre Potential $V(x)$ soll konstant außerhalb der aktiven Region Ω_0 sein. Außerdem setzen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit das linke Potential V_l Null, also:

$$V(x) = \begin{cases} V(0) =: V_l \equiv 0 & \text{für } x \leq 0 \\ V(x) & \text{für } x \in (0, 1) \\ V(1) =: V_r & \text{für } x \geq 1 \end{cases} \quad (3.6)$$

Wir betrachten nun für ein $k > 0$ die korrespondierende Schrödingergleichung (3.5). Die Wahl von $k > 0$ bedeutet nichts anderes als, dass die Welle von links einläuft, da sie positiven Impuls hat. Wir lassen nun die von ϕ_k repräsentierte Welle mit Amplitude 1 einlaufen. Was nun passieren wird, ist, dass die Welle in der aktiven Region zum Teil reflektiert und zum Teil transmittiert wird. Dazu lösen wir zuerst die Schrödingergleichung (3.5) in Ω_l und Ω_r . Wir erhalten, da $V_l = 0$:

$$\phi_k(x) = 1e^{ixk} + R_k e^{-ixk} \quad x \in \Omega_l \quad (3.7a)$$

$$\phi_k(x) = T_k e^{ix\sqrt{V_r+k^2}} + 0e^{-ix\sqrt{V_r+k^2}} \quad x \in \Omega_r \quad (3.7b)$$



Die Koeffizienten $1, T_k, R_k, 0$ drücken dabei die Amplitude der jeweiligen Welle aus, das Vorzeichen im Exponenten die Ausbreitungsrichtung der Welle. Wir wollen nun T_k, R_k bestimmen. Für die Randbedingungen demonstrieren wir die QTB Methode, um deren Eleganz zu verdeutlichen. Wir bestimmen also an $x = 0$ die Werte der Wellenfunktion und ihrer Ableitung:

$$\begin{aligned}\phi_k(0) &= 1 + R_k \\ \phi'_k(0) &= ik(1 - R_k)\end{aligned}$$

Nach R_k auflösend, findet man:

$$R_k = \frac{1}{2} \left(\phi(0) - \frac{i}{k} \phi'(0) \right)$$

Analog findet man für T_k :

$$T_k = \frac{1}{2} \left(\phi(1) - \frac{i}{\sqrt{V_r + k^2}} \phi'(1) \right)$$

Man erhält auch Randbedingungen unabhängig von R_k, T_k :

$$2ik = ik\phi(0) + \phi'(0) \quad (3.8a)$$

$$0 = -i\sqrt{V_r + k^2}\phi(1) + \phi'(1) \quad (3.8b)$$

Wir werden nun einen Existenz- und Eindeutigkeitssatz für dieses Problem gekoppelt mit der Poissongleichung zitieren (siehe Theorem 2.1 und 2.2 in [BADM97]). Als Poissonkopplung versteht man, dass das Potential von der Elektronendichte abhängt, wobei der Zusammenhang durch die Poissongleichung beschrieben wird. In Formeln gegossen bedeutet das:

$$\begin{cases} -V''(x) = n(x), & \text{für } x \in [0, 1], & n \text{ wie in (3.2) angegeben} \\ V(0) = 0 \text{ und } V(1) = V_r \end{cases} \quad (3.9)$$

Wir werden folgende Annahmen bezüglich der Dichtefunktion $f(k)$ und V_r treffen:

$$f \geq 0, \quad \int_0^\infty (1 + k^2)f(k)dk \leq \infty \quad (3.10)$$

$$\int_0^\infty f(k)dk \leq -\frac{V_1}{4} \quad V_r < 0 \quad (3.11)$$

Bemerkung 3.1. Der nächste Satz löst bereits die nichtlineare Schrödingergleichung mit Poissonkopplung. Wir zitieren dieses Theorem bereits jetzt, da sich das Theorem nur auf das Intervall Ω_0 beschränkt und obige einfache Randbedingungen verwendet. \boxtimes

Satz 3.2. *Sei die obige Voraussetzung (3.10) erfüllt. Dann existiert eine Lösung $V \in W^{2,\infty}(0,1)$, $\phi_k \in W^{4,\infty}(0,1)$ für die Schrödingergleichung $-\phi_k''(x) + V\phi_k(x) = k^2\phi_k(x)$ mit der Poissonkopplung (3.9) und den Randbedingungen (3.8a) und (3.8b). Verlangt man zusätzlich (3.11), dann gilt, dass eine in $(0,1)$ monoton fallende Lösung V existiert. Die Regularitätseigenschaften bleiben bestehen.*

Beweis. Für den Beweis verweisen wir auf [BADM97] \square

Bemerkung 3.3. Ein ähnliches Resultat wurde in [BAP02] bewiesen: Sei f nichtnegativ und in L^1 , außerdem soll f einen kompakten Träger besitzen. Weiters sei $V_e \in L^\infty$. Dann hat das System (3.5), (3.7a) - (3.8b) eine Lösung $\phi_k \in H^2(\Omega_0)$, $V_s \in W^{2,\infty}(\Omega_0)$. \boxtimes

4 Vorbereitungen

4.1 Sobolevräume

Für die Definition und grundlegende Eigenschaften von Sobolevräumen siehe [Ada75], bzw. für eine kürzere Einführung siehe [Eva98]. Wir wollen in diesem Abschnitt nur kurz auf komplexe und fraktale Sobolevräume auf \mathbb{R} eingehen, da wir von diesen später Gebrauch machen werden. Man kann mit Hilfe der Fouriertransformation diese Räume definieren.

Satz 4.1 (Charakterisierung von Sobolevräumen). *Sei $k \in \mathbb{N}_0$ und $u \in L^2(\mathbb{R})$. Insbesondere kann u komplexwertig sein. Dann gilt:*

- (i) *Die Funktion u ist in $H^k(\mathbb{R})$ genau dann, wenn $(1 + |y|^k)\hat{u} \in L^2(\mathbb{R})$*
- (ii) *Die Normen $\|u\|_{H^k(\mathbb{R})}$ und $\|(1 + |y|^k)\hat{u}\|_{L^2(\mathbb{R})}$ sind äquivalent für $u \in H^k(\mathbb{R})$*

Beweis. Ein rigoroser Beweis findet sich in [Eva98, Section 5.8.4]. Der Beweis basiert auf der algebraisierenden Eigenschaft der Fouriertransformation und dem Satz von Plancherel. \square

Definition 4.2. Sei $0 < s < \infty$ und $u \in L^2(\mathbb{R})$. Wir sagen, u ist in $H^s(\mathbb{R})$, falls

$$(1 + |y|^s)\hat{u} \in L^2(\mathbb{R}).$$

Für $s \notin \mathbb{N}_0$ definiere $\|u\|_{H^s(\mathbb{R})} = \|(1 + |y|^s)\hat{u}\|_{L^2(\mathbb{R})}$. \boxtimes

Wir wollen noch eine häufig verwendete Soboleveinbettung zitieren.

Bemerkung 4.3. Für $\Omega \subset \mathbb{R}$ und $p > 1$ gilt, $W^{1,p}(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$, siehe [Caz03, Theorem 1.3.3]. Daraus ist leicht zu folgern, dass für ein Ω mit endlicher Länge $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^q(\Omega)$ für alle $q \in [1, \infty]$ gilt. \boxtimes

4.2 Halbgruppentheorie

Wir wollen kurz die Halbgruppentheorie im Bezug auf die Schrödingergleichungen erläutern. Dabei halten wir uns an [Caz03, Section 1.6].

Sei X ein komplexer Hilbertraum mit Norm $\|\cdot\|_X$ und Sesquilinearform $\langle \cdot, \cdot \rangle_X$. Wir betrachten X als reellen Hilbertraum mit Skalarprodukt $(x, y)_X = \operatorname{Re}\langle \cdot, \cdot \rangle_X$. Sei nun $A: D(A) \subset X \rightarrow X$ ein \mathbb{C} -linearer Operator. Man nimmt weiter an, dass A selbstadjungiert ist, sodass $D(A)$ eine dichte Teilmenge von X ist und dass $A \leq 0$, also $(Ax, x) \leq 0$ für alle $x \in D(A)$. Dann generiert A eine Halbgruppe von Kontraktionen $(S(t))_{t \geq 0}$ auf X . $D(A)$ wird auch zu einem Hilbertraum, wenn man ihn mit dem Skalarprodukt $(x, y)_{D(A)} = (Ax, Ay)_X + (x, y)_X$ versieht. Mit X_A bezeichnen wir die Vervollständigung

von $D(A)$ bezüglich des Skalarprodukts $(x, y)_{X_A} = (x, y)_X - (Ax, y)_X$ für $x, y \in D(A)$. Schließlich haben wir

$$D(A) \hookrightarrow X_A \hookrightarrow X \hookrightarrow X_A^* \hookrightarrow (D(A))^*,$$

wobei alle Einbettungen dicht sind und X^* den topologischen Dualraum vom topologischen Raum X bezeichnet.

Da A selbstadjungiert ist, ist iA definiert durch $iA: D(A) \subset X \rightarrow X$: $(iA)x = iAx$ für $x \in D(A)$ \mathbb{C} -linear und schieferhermitesch. Insbesondere generiert iA eine isometrische Gruppe $(\mathcal{T}(t))_{t \in \mathbb{R}}$ auf X , welche $\mathcal{T}(t)^* = \mathcal{T}(-t)$ für alle $t \in \mathbb{R}$ erfüllt, wobei hier $\mathcal{T}(t)^*$ den zu $\mathcal{T}(t)$ adjungierten Operator bezeichnet.

Man kann nun den Operator A bzw. iA auf $(D(A))^*$ mit Definitionsbereich X fortsetzen und erhält dadurch eine isometrische Gruppe $\tilde{\mathcal{T}}(t)$ welche $\mathcal{T}(t)$ nach $(D(A))$ fortsetzt und auf X mit $\mathcal{T}(t)$ übereinstimmt. Zur Vereinfachung benutzen wir die selbe Notation für \mathcal{T} und seine Fortsetzung $\tilde{\mathcal{T}}$. Ebenso benutzen wir die selbe Notation für A und seine Fortsetzung.

Nun gilt: Für $u_0 \in X$ ist $u(t) = \mathcal{T}(t)x$ ist die eindeutige Lösung von

$$\begin{cases} u \in C(\mathbb{R}, (X)) \cap C^1(\mathbb{R}, (D(A))^*), \\ i \frac{du}{dt} + Au = 0 \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}, \\ u(0) = u_0. \end{cases}$$

Wir wenden uns gleich auch noch dem inhomogenen Problem zu, siehe [Caz03, Remark 1.6.1(vi)].

Lemma 4.4. *Sei $g \in C([0, T], X)$ und $u_0 \in D(A)$. Falls $u \in C^1([0, T], X)$ oder $u \in C([0, T], D(A))$, dann erfüllt u die Gleichung*

$$u(t) = \mathcal{T}(t)x + i \int_0^t \mathcal{T}(t-s)g(s)ds \quad \text{für alle } t \in [0, T].$$

genau dann, wenn u die inhomogene Gleichung

$$\begin{cases} u \in C([0, T], D(A)) \cap C^1([0, T], X), \\ i \frac{du}{dt} + Au + g = 0 \quad \text{für alle } t \in [0, T], \\ u(0) = x \end{cases}$$

erfüllt.

5 Die Schrödingergleichung mit gegebenem Potential

Wir werden in diesem Abschnitt die Lösung der linearen Schrödingergleichung im Rahmen der Halbgruppentheorie untersuchen. Nachdem das Problem ein abstraktes Cauchyproblem darstellt, suchen wir nach einer Lösung u des homogenen Anfangswertproblems

$$\begin{cases} \partial_t u = Au, & t > 0, \quad A = i\Delta - iV \\ u(0) = u_0, \end{cases} \quad (5.1)$$

Die Schwierigkeit bei der Lösung dieses Problems liegt in der Wahl der Räume. Wir lassen uns von [Caz03, Chapter 2] leiten und definieren A auf $X = L^2(\Omega)$ folgendermaßen

$$\begin{cases} D(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega), \\ Au = \Delta u \quad \text{für } u \in D(A) \end{cases}$$

Wir bemerken, dass $X_A = H_0^1(\Omega)$ und somit $X_A^* = H^{-1}(\Omega)$. Der Operator A wird über seine selbstadjungierte Fortsetzung definiert, also

$$(Au, v)_{(D(A))^*, D(A)} = (u, \Delta v)_{L^2(\Omega)} \quad \text{für } u \in L^2(\Omega) \text{ und } v \in D(A)$$

Mit dem Satz von Stone folgt, wie oben schon angegeben, dass iA eine Gruppe von Isometrien $\mathcal{T}(t)$ generiert.

Wir wollen nun den Operator A durch ein Potential V stören. Man kann dann zeigen, dass das Potential relativ zu A beschränkt ist, siehe [Paz83, Lemma 7.5.4]. Wir stellen folgendes Resultat vor, welches eine Spezialisierung von [Paz83, Theorem 7.5.5] ist.

Satz 5.1. *Sei $V(x)$ reell und $V \in L^2(\mathbb{R})$. Dann gilt: $i\Delta - iV$ ist der infinitesimale Generator einer Gruppe unitärer Operatoren auf $L^2(\mathbb{R})$. Eine weitere Störung durch ein reelles Potential $V_0 \in L^\infty(\mathbb{R})$ ändert das Resultat nicht.*

Nach obigem Satz wissen wir, dass A der infinitesimale Generator einer Gruppe von unitären Operatoren ist und somit gilt $u(t) := \mathcal{T}(t)u_0$ ist Lösung von (5.1), für diese gilt $\|u\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}$ siehe [Jün01, Korollar 7.11].

6 Die Schrödingergleichung mit zeitabhängigem Potential

Wir gehen nun ähnlich wie in [BADM97, Section 3] vor. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der linearen Schrödingergleichung, wobei nun das Potential V zusätzlich von der Zeit und nicht nur vom Ort abhängt. Wir betrachten also Potentiale der Form $V: \mathbb{R}^+ \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Dabei werden unitäre Propagatoren die Rolle der unitären Operatoren übernehmen.

Wir sind interessiert an der Lösung des Problems:

$$\begin{aligned} i\partial_t \psi_\lambda &= \mathcal{H}(t)\psi_\lambda, & \psi_\lambda(0, \cdot) &= \psi_\lambda^0, & \text{für alle } x \in \Omega \\ \mathcal{H}(t) &= -\Delta + V(t, x) \end{aligned} \quad (6.1)$$

Hier soll $\lambda \in \Lambda$, wobei wir weiter unten näher auf λ und Λ eingehen. Wir werden nun einige Annahmen treffen.

6.1 Generelle Annahmen

Diese Hypothesen sind gültig für die Abschnitte 6 und 7.

Wie in der Einleitung erwähnt, teilen wir das Gebiet $\Omega = \mathbb{R}$ in Ω_l, Ω_0 , und Ω_r auf. Im Folgenden sei j stets aus $\{l, r\}$ und mit $x \in \Omega_{l,r}$ meinen wir x in Ω_l oder x in Ω_r . Wir führen nun eine glatte Zerlegung der Eins dieser Gebiete ein. Das sind konkret zwei Funktionen $(\eta_j(x))_{j \in \{l,r\}} \in C^\infty(\Omega)$ welche

$$\begin{cases} 0 \leq \eta_j \leq 1, & \eta_l + \eta_r \equiv 1 \quad \text{auf } \Omega \\ \eta_l \equiv 1 \text{ auf } \Omega_l \text{ und } \eta_l \equiv 0 \text{ auf } \Omega_r & (\eta_r := 1 - \eta_l) \end{cases}$$

erfüllen.

Weiters sei (Λ, μ) eine Menge mit nichtnegativem beschränktem Maß μ , so dass

$$\mu(\Lambda) = \int_\Lambda d\mu < \infty \quad (6.2)$$

gilt. Wir denken hierbei an $\lambda = k$, $\Lambda = \mathbb{R}^+$, $E(\lambda) = k^2/2$ und $d\mu(\lambda) = f(k)dk$. Die kinetische Energie der Elektronen wird durch $k^2/2$ repräsentiert und $f(k)$ stellt die Dichtefunktion des Impulses der einfallenden Elektronen dar, vergleiche hierzu auch Abschnitt 3. Außerdem sei

$$\mathcal{H}^0 = -\Delta + V^0 \quad (\text{A - 0})$$

wobei für V^0 gilt, dass

$$V^0 \in L^\infty(\Omega) \quad \text{und } V^0|_{\Omega_j} = V_j^0 = \text{const.}$$

Wir verlangen von den Anfangsdaten

$$\psi_\lambda^0 \in H_{loc}^2(\Omega)$$

und treffen außerdem noch die Annahmen:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Für fast alle } \lambda \in \Lambda \text{ soll eine Konstante } E(\lambda) \text{ existieren,} \\ \text{welche für } x \in \Omega_{l,r} \\ \mathcal{H}^0 \psi_\lambda^0 = E(\lambda) \psi_\lambda^0 \text{ erfüllt.} \end{array} \right. \quad (\text{A - 1})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Wir fordern} \\ \sup_{\lambda \in \text{supp}(\mu)} |E(\lambda)| = M_E < \infty. \end{array} \right. \quad (\text{A - 2})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Für alle kompakten Mengen } K \subset \Omega \text{ soll eine Konstante} \\ C_K \geq 0 \text{ existieren, sodass} \\ \int_\Lambda \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(K)}^2 d\mu(\lambda) \leq C_K. \end{array} \right. \quad (\text{A - 3})$$

Wir werden später oft das Potential $V(t, x)$ in eine Form

$$V(t, x) = V_e(t, x) + V_s(t, x), \quad \text{wobei } \text{supp}(V_s) \subset \Omega_0 \quad (6.3)$$

aufspalten. Hier sei erwähnt, dass V_e das externe Potential und V_s das selbst-konsistente Potential mit Träger in Ω_0 bezeichnet. V_s wird im nächsten Kapitel eine prominente Rolle spielen. Wir führen nun die Potentialklasse \mathcal{V} ein. Wir definieren \mathcal{V} als die Menge aller Potentiale V , welche

$$\left\{ \begin{array}{l} V \in C^1([0, T], L^\infty(\Omega)) \text{ und } V \text{ lässt sich aufspalten in} \\ V(t, x) = V_j^0 + V_j(t) \text{ für } x \in \Omega_j, \quad j \in \{l, r\} \end{array} \right. \quad (\text{A - } \mathcal{V})$$

erfüllen. Weiters nehmen wir an, dass V_e in der Potentialklasse \mathcal{V} liegt, also

$$V_e \in \mathcal{V} \quad (\text{A - 4})$$

Bemerkung 6.1. Weil wir $\text{supp}(V_s) \subset \Omega_0$ vorausgesetzt haben, gilt $V_s(t, x) = 0$ für $x \in \Omega_{l,r}$. Somit ist V_s genau dann in der Potentialklasse \mathcal{V} , falls

$$V_s \in C^1([0, T], L^\infty(\Omega)) \quad \boxtimes$$

6.2 Lösung auf den Leitern Ω_l und Ω_r

Man beachte, dass das Problem (6.1) auf ganz Ω gestellt ist. Die Lösung auf den Leitern ist einfach. Mit Hilfe von (A - 0), (A - 1) und (A - 4) gilt auf den Leitern:

$$\mathcal{H}(t) \psi_\lambda^0 = (\mathcal{H}^0 - V_j(t)) \psi_\lambda^0 = (E(\lambda) - V_j(t)) \psi_\lambda^0$$

Wir definieren nun den Phasenfaktor auf dem jeweiligen Leiter durch:

$$\theta_\lambda^j = \exp \left(-i \int_0^t (E(\lambda) - V_j(s)) ds \right). \quad (6.4)$$

Indem wir ψ_λ^{pw} als eine um den entsprechenden Phasenfaktor modulierte ebene Welle der Anfangsdaten definieren, das heißt

$$\psi_\lambda^{pw} = \psi_\lambda^0 \left(\eta_l(x) \theta_\lambda^l(t) + \eta_r \theta_\lambda^r(t) \right). \quad (6.5)$$

Bemerkung 6.2. Es ist unschwer zu erkennen, dass ψ_λ^{pw} Gleichung (6.1) für $x \in \Omega_{l,r}$ und darüber hinaus $\psi_\lambda^{pw}(0, x) = \psi_\lambda^0(x)$ auf ganz Ω erfüllt. \square

6.3 Existenz- und Eindeutigkeitsaussage

Wir wollen in diesem Abschnitt die L^2 -Theorie des inhomogenen Anfangswertproblems der Schrödingergleichung (6.1) wiederholen. Wir bemerken, dass es noch weiterer Resultaten bedarf, da wir ja $\psi_\lambda^0 \in H_{loc}^2$ vorausgesetzt haben und wir somit nicht im klassischen L^2 Rahmen arbeiten, der $\psi_\lambda^0 \in H^2(\mathbb{R})$ wäre. Im Folgenden gibt C eine Konstante an, welche von M_E , η_j , $\|V_j\|_{C^1}$ und $\|V^0\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ abhängt, falls nicht explizit anders erwähnt. Um die Notation einfacher zu halten, bezeichne \mathcal{C} folgenden Raum:

$$\mathcal{C} = C^0([0, T], H^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)) \quad (6.6)$$

Lemma 6.3. Sei $V \in C^1([0, T], L^\infty(\mathbb{R}))$, $g \in C^1([0, T], L^2(\mathbb{R}))$ und $\Psi_0 \in H^2(\mathbb{R})$. Dann gilt: Das Problem

$$\begin{cases} i\partial_t \Psi = -\Delta \Psi + V(t, x)\Psi + g(t, x) & \text{für } x \in \mathbb{R} \\ \Psi(t = 0, x) = \Psi_0(x), \\ \Psi(t, x) = 0 & \text{für } |x| \rightarrow \infty \text{ und } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.7)$$

hat eine eindeutige Lösung $\Psi \in C^0([0, T], H^2(\mathbb{R})) \cap C^1([0, T], L^2(\mathbb{R}))$, also $\Psi \in \mathcal{C}$ und Ψ erfüllt folgende Abschätzungen:

Für alle $T \geq 0$ und für alle $t \in [0, T]$ gilt:

$$\|\Psi(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|\Psi_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|g\|_{L^1((0,t), L^2(\mathbb{R}))} \quad (6.8)$$

$$\begin{aligned} \|\partial_x \Psi(t)\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &\leq \|\partial_x \Psi_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C(1+t^3) \left(\|\Psi_0\|_{H^2(\mathbb{R})}^2 + \|g\|_{C^1([0,t], L^2(\mathbb{R}))}^2 \right) \times \\ &\quad \times (1 + \|V\|_{C^1([0,t], L^\infty(\mathbb{R}))}) \end{aligned} \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned} \|\Psi(t)\|_{H^2(\mathbb{R})} &\leq C(1+t^2) \left(\|\Psi_0\|_{H^2(\mathbb{R})} + \|g\|_{C^1([0,t], L^2(\mathbb{R}))} \right) \times \\ &\quad \times (1 + \|V\|_{C^1([0,t], L^\infty(\mathbb{R}))}) \end{aligned} \quad (6.10)$$

Beweis. Nach [RS75, Section X.12] gilt, dass $i\Delta - iV$ einen stark differenzierbaren unitären Propagator $U(t, s)$ generiert, da V in $C^1([0, T], L^\infty(\mathbb{R}))$ liegt. Deshalb hat Ψ eine Darstellung der Form

$$\Psi(t) = U(t, 0)\Psi_0 + \int_0^t U(t, s)g(s)ds \in L^2(\mathbb{R}) \quad (6.11)$$

Um die Regularität zu zeigen, bemerken wir, dass $u(t) = \partial_t \Psi(t)$ folgende Gleichung erfüllt:

$$u(t) = U(t, s)u_0 + \int_0^t U(t, s)(\partial_s V(s)\Psi(s) + \partial_s g(s))ds \quad (6.12)$$

$$u_0 = (i\Delta - iV(0))\Psi_0 - ig(0)$$

Mit unseren Regularitätsvoraussetzungen an V , g und Ψ_0 erhalten wir, dass $u_0 \in L^2(\Omega)$ und $\partial_s V(s)\Psi(s) + \partial_s g(s) \in C^0([0, T], L^2(\Omega))$, und somit folgt $u \in C^1([0, T], L^2(\Omega))$. Mit Hilfe von Lemma 4.4 können wir schließen, dass u besagte Regularität erfüllt.

Abschätzung (6.8) folgt unmittelbar aus (6.11), da U unitär ist. Als nächstes zeigen wir (6.10). Dazu betrachten wir die $L^2(\mathbb{R})$ -Norm von $u(t)$:

$$\begin{aligned} \|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} &\leq \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \left\| \int_0^t U(t, s)\partial_s V(s)\Psi(s)ds \right\|_{L^2(\mathbb{R})} + \left\| \int_0^t U(t, s)\partial_s g(s)ds \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \\ &\leq \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|V\|_{C^1([0, t], L^\infty(\mathbb{R}))} \int_0^t \|\Psi(s)\|_{L^2(\mathbb{R})} ds + t\|g\|_{C^1([0, t], L^2(\mathbb{R}))} \end{aligned}$$

Mit obiger Ungleichung (6.8) für ψ gilt schließlich

$$\begin{aligned} \|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} &\leq \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|g\|_{C^1([0, t], L^2(\mathbb{R}))} + \\ &\quad + \|V\|_{C^1([0, t], L^\infty(\mathbb{R}))} (t\|\Psi_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + t^2\|g\|_{C^1([0, t], L^2(\mathbb{R}))}) \end{aligned}$$

Anwendung folgender einfacher Abschätzung für u_0

$$\|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|\Psi_0\|_{H^2(\mathbb{R})} (1 + \|V\|_{C^1([0, t], L^\infty(\mathbb{R}))}) + \|g\|_{C^1([0, t], L^2(\mathbb{R}))}$$

zeigt, dass wir $u = \partial_t \Psi$ folgendermaßen abschätzen können:

$$\|\partial_t \Psi(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C(1 + t^2) (1 + \|V\|_{C^1([0, t], L^\infty(\mathbb{R}))}) (\|\Psi_0\|_{H^2(\mathbb{R})} + \|g\|_{C^1([0, t], L^2(\mathbb{R}))})$$

Wir formen nun (6.7) um, nehmen die $L^2(\mathbb{R})$ -Norm und benützen (6.8)

$$\begin{aligned} \|\Psi(t)\|_{H^2(\mathbb{R})} &\leq \|\partial_t \Psi(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|g(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} + \\ &\quad + \|V(t)\|_{L^\infty(\mathbb{R})} (\|\Psi_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|g\|_{L^1([0, t], L^2(\mathbb{R}))}) \end{aligned}$$

Daraus folgt schließlich behauptete Abschätzung (6.10).

Um die letzte Abschätzung zu erhalten nehmen wir das $L^2(\mathbb{R})$ -Skalarprodukt von (6.7) mit $\partial_t \bar{\Psi}$ und nehmen den Realteil der Gleichung. Anschließendes partielles Integrieren im Ort und Ausnützung der Randbedingungen, wie in (6.7) angegeben, gibt nach Integration über das Zeitintervall $[0, t]$ Abschätzung (6.9). \square

Satz 6.4 (Linearer Existenz- und Eindeutigkeitsatz). Sei $\psi_\lambda^0 \in H_{loc}^2(\mathbb{R})$ sowie (A - 1) und (A - 2) erfüllt. Weiters sei $V \in \mathcal{V}$, siehe (A - \mathcal{V}). Dann gilt: Das Problem (6.1) hat eine eindeutige Lösung in $\psi_\lambda^{pw} + \mathcal{C}$. Hier ist \mathcal{C} wie in (6.6) definiert und ψ_λ^{pw} wie in (6.5). Außerdem gelten folgende Abschätzungen:

$$\|\psi_\lambda(t) - \psi_\lambda^{pw}\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq Ct \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)} (1 + \|V\|_{C^0([0,t], L^\infty(\mathbb{R}))}) \quad (6.13)$$

$$\|\psi_\lambda(t) - \psi_\lambda^{pw}\|_{H^2(\mathbb{R})} \leq C(1 + t^2) \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)} \left(1 + \|V\|_{C^1([0,t], L^\infty(\mathbb{R}))}^2\right) \quad (6.14)$$

Beweis. Definiere die Hilfsfunktion $\phi_\lambda := \psi_\lambda - \psi_\lambda^{pw}$. Wir setzen diese Funktion in (6.1) ein und erhalten für alle $x \in \mathbb{R}$:

$$i\partial_t \phi_\lambda = (-\Delta + V(t, x))\phi_\lambda - S_\lambda(V) \quad (6.15)$$

Mit 6.2 sieht man sofort, dass $S_\lambda(V) = 0$ sein muss, auf Ω_l bzw. Ω_r . $S_\lambda(V)$ gibt also die zusätzliche Inhomogenität an, um den Fehler ϕ_λ auf Ω_0 zu korrigieren. Wir definieren also:

$$\begin{aligned} S_\lambda(V) &= (-\Delta + V(t, x) - i\partial_t)\psi_\lambda^{pw} \quad (6.16) \\ &= 2\partial_x \psi_\lambda^0 \left[\partial_x(\eta^l \theta_\lambda^l + \eta^r \theta_\lambda^r) \right] + \psi_\lambda^0 \left[(\Delta + V_l)\eta^l \theta_\lambda^l + (\Delta + V_r)\eta^r \theta_\lambda^r \right] + \\ &\quad + \left[\Delta \psi_\lambda^0 + (E(\lambda) - V(t, x))\psi_\lambda^0 \right] (\eta^l \theta_\lambda^l + \eta^r \theta_\lambda^r) \end{aligned}$$

Wir bemerken, dass $\text{supp } S_\lambda(V) \subset \Omega_0$. Da $\psi_\lambda^0 \in H_{loc}^2(\mathbb{R})$ gilt und $\text{supp } S_\lambda$ eine kompakte Menge ist, folgt $S_\lambda(V) \in L^2(\mathbb{R})$ für festes t . Unter Beachtung von $V \in C^1([0, T], L^\infty(\mathbb{R}))$ folgt schließlich $S_\lambda(V) \in C^1([0, T], L^2(\mathbb{R}))$. Somit ist Lemma 6.3 anwendbar, wobei S_λ die Rolle von g übernimmt und wir erhalten unmittelbar die Regularitätsaussagen. Die angegebenen Abschätzungen folgen auch aus dem Satz, da

$$\|S_\lambda(V)\|_{C^1([0,T], L^2(\mathbb{R}))} \leq C \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)} (1 + \|V\|_{C^1([0,T], L^\infty(\mathbb{R}))}). \quad (6.17)$$

Die Konstante C ist wegen (A - 2) nicht von λ abhängig. \square

6.4 TBC und Dissipationsabschätzungen

Wir wollen nun transparente Randbedingungen herleiten und diese kurz analysieren. Diese werden wir zur Lösung des nichtlinearen Schrödingerproblems benötigen, um eine a-priori Abschätzung erhalten zu können. Wir werden Dissipationsabschätzungen an den Rändern herleiten. Nachdem der Fokus dieser Arbeit nicht auf TBC liegt, werden wir dieses Thema oberflächlicher behandeln. Zuerst geben wir einige Definitionen.

Definition 6.5. Für eine Funktion $h \in H^\alpha(0, T)$, $\alpha \geq 0$, definiert man das Abel Integral von halber Ordnung (siehe [GV91]) von h als

$$\mathcal{I}^{1/2}h = \pi^{-1/2} \int_0^t \frac{h(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau$$

sowie die halbe Zeitableitung von h als distributionelle Ableitung von $\mathcal{I}^{1/2}h$ als

$$\partial^{1/2}h = \frac{d}{dt}\mathcal{I}^{1/2}h = \pi^{-1/2} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{h(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau$$

Man bemerke, dass $\mathcal{I}^{1/2}h \in H^{1/2+\alpha}(0, T)$ und dass das Integral offensichtlich als Faltung geschrieben werden kann. \square

Wir definieren für $j \in \{l, r\}$ und alle nichtnegativen Zeiten t den Phasenfaktor χ^j folgendermaßen

$$\chi^j(t) = \exp\left(-i \int_0^t (V_j(s) + V_j^0) ds\right) \quad (6.18)$$

Lemma 6.6. *Seien die Annahmen (A - 1) und (A - 2) erfüllt. Sei weiters $\psi_\lambda \in \mathcal{C} + \Psi_\lambda^{pw}$ mit ψ_λ definiert in (6.5). Dann gilt: ψ_λ ist die eindeutige Lösung des Randwertproblems auf Ω_0 bestehend aus einer Dirichlet Randbedingung auf x_l und x_r und einer der folgenden äquivalenten Randbedingungen an x_l*

$$\begin{aligned} \partial_x(\psi_\lambda - \psi_\lambda^{pw})(x_l) &= -e^{-i\pi/4} \chi^l(t) \partial^{1/2} \left[(\psi_\lambda - \psi_\lambda^{pw}) \overline{\chi^l(t)} \right]_{x=x_l} \\ (\psi_\lambda - \psi_\lambda^{pw})(x_l) &= -e^{i\pi/4} \chi^l(t) \mathcal{I}^{1/2} \left[\partial_x(\psi_\lambda - \psi_\lambda^{pw}) \overline{\chi^l(t)} \right]_{x=x_l} \end{aligned}$$

beziehungsweise analog für x_r . Man beachte aber, dass sich das Vorzeichen für x_r ändert. Man bezeichnet die erste Gleichung als *Dirichlet-to-Neumann map* und die zweite als *Neumann-to-Dirichlet map*.

Beweis. Da $\chi^j(t) \overline{\chi^j(t)} = 1$, können wir ϕ_λ , definiert wie im vorigen Beweis von Satz 6.4, als $\phi_\lambda(t, x) = (\phi_\lambda(t, x) \overline{\chi^j(t)}) \chi^j(t) =: \varphi(t, x) \chi(t)$ schreiben. Eine einfache Rechnung ausgehend von (6.15) zeigt für $x \in \Omega_{l,r}$ unter Berücksichtigung von (A - V)

$$i\partial_t \varphi(x, t) = -\Delta \varphi + (-i\partial_t \chi + (V^j(t) + V_j^0) \chi) \overline{\chi}, \quad \varphi(0, \cdot) = 0$$

Wir bemerken, dass $-i\partial_t \chi + (V^j(t) + V_j^0) \chi = 0$ gilt und V_j^0 konstant auf den Leitern ist. Die Einführung von $\chi^j(t)$ bringt den Vorteil, dass für φ das Potential zeitunabhängig ist. Aus [Arn90] wissen wir, dass für φ auf x_l und x_r entsprechende Randbedingungen gelten. Da $\varphi(t, x) = \phi(t, x) \overline{\chi(t)}$ gelten obige Randbedingungen. Damit diese Randbedingungen Sinn machen, sei auf nachfolgende Bemerkung und auf Spureigenschaften verwiesen. Die Eindeutigkeit folgt aus dem nächsten Satz. \square

Bemerkung 6.7. Es gilt folgendes Interpolationsresultat: Für $0 \leq \sigma \leq 1$, $s \leq 1 - \sigma$ gilt

$$\mathcal{C} \subset H^s((0, T), H^{2\sigma}(\Omega_0)) = [L^2((0, T), H^2(\Omega_0)), H^1((0, T), L^2(\Omega_0))]_\sigma$$

Für die Definition der Interpolationsklammern siehe [Ada75, SectionVII]. \square

Bemerkung 6.8. Wir können mit Hilfe von Lemma 3.4 in [BAMP05] zeigen, dass

$$|\partial_t^{1/2} [\psi_\lambda^{pw}(t, x) \overline{\chi^j(t)}]_{x=x_j}| \leq \|\psi_\lambda^0\|_{H^1(\Omega_0)} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi t}} + C_E \right) \quad \square$$

Lemma 6.9. Für $h \in H^{1/4}((0, T), \mathbb{C})$ gilt, dass

$$\int_0^T \bar{h} \partial^{1/2} h dt \in S^{\pi/4}$$

$$S^{\pi/4} := \{z \in \mathbb{C} : \text{Arg}(z) \in [-\pi/4, \pi/4]\}$$

Ein ähnliches Resultat gilt für $h \in L^2((0, T), \mathbb{C})$ und $\mathcal{I}^{1/2}$, nämlich

$$\int_0^T \bar{h} \mathcal{I}^{1/2} h dt \in S^{\pi/4}$$

Beweis. Wir geben nur eine Skizze des Beweises. Man setzt h auf ganz \mathbb{R} fort und nützt dann die Faltungseigenschaft von $\mathcal{I}^{1/2}$ und den Satz von Plancherel. Für die Fouriertransformation von Abel Integral Operatoren sei auf [GV91, Section 6.3] hingewiesen. \square

Satz 6.10 (Dissipationsabschätzungen). Seien die Annahmen (A - 1), (A - 2) und (A - \mathcal{V}) erfüllt. Sei weiters $\psi_\lambda \in \mathcal{C} + \psi_\lambda^{pw}$ die eindeutige Lösung von (6.1). Dann gilt für T positiv, für alle $t \in (0, T]$ und fast alle λ für eine von T abhängige Konstante C :

$$\|\psi_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 \leq \|\psi_\lambda^0\|_{L^2(\Omega_0)}^2 + C \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)} \int_0^t \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi s}} \right) \|\psi_\lambda(s)\|_{H^1(\Omega_0)} ds \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} \|\psi_\lambda(t)\|_{H^1(\Omega_0)}^2 &\leq \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)}^2 + C \int_0^t \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi s}} \right) \|\psi_\lambda(s)\|_{H^1(\Omega_0)}^2 ds + \\ &+ C \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)} \int_0^t \|V(s)\|_{L^2(\Omega_0)} (\|\psi_\lambda^0\|_{L^2(\Omega_0)} + \|\psi_\lambda(s)\|_{L^2(\Omega_0)}) ds - \\ &- \int_0^t \int_{\Omega_0} V \partial_t |\psi_\lambda|^2 dx ds \end{aligned} \quad (6.20)$$

Beweis. Dieser Beweis basiert stark auf den Dissipationsrelationen in Lemma 6.9. Wir führen nur exemplarisch den Beweis für die erste Abschätzung vor. Der Beweis von (6.20) ist ähnlich und kann auch im Beweis von Proposition 3.7 in [BAMP05] unter Anpassung an die eindimensionale Situation nachgelesen werden.

Indem wir das $L^2(\Omega_0)$ -Skalarprodukt von (6.1) mit $\overline{\psi_\lambda(t)}$ nehmen, von 0 bis t integrieren und davon den Imaginärteil nehmen haben wir schließlich

$$\|\psi_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 = \|\psi_\lambda^0\|_{L^2(\Omega_0)}^2 - 2 \operatorname{Im} \int_0^t \left[\partial_x \psi_\lambda(s) \overline{\psi_\lambda(s)} \right]_{x=x_l}^{x_r} ds$$

Wir bringen nun den zweiten Term in eine für uns angenehmere Form, indem wir die Randbedingungen aus Lemma 6.6 verwenden.

$$\begin{aligned} \int_0^t \left[\partial_x \psi_\lambda(s) \overline{\psi_\lambda(s)} \right]_{x=x_l}^{x_r} ds &= - \int_0^t e^{-i\pi/4} \left[\chi \overline{\psi_\lambda} (\partial^{1/2} \psi \overline{\chi}) \right]_{x=x_l}^{x_r} ds + \\ &+ \int_0^t \left[\partial_x \psi_\lambda^{pw} \overline{\psi_\lambda} \right]_{x=x_l}^{x_r} ds + \int_0^t e^{-i\pi/4} \left[\chi \overline{\psi_\lambda^{pw}} \partial^{1/2} \psi_\lambda^{pw} \overline{\chi} \right]_{x=x_l}^{x_r} ds \end{aligned}$$

Nachdem $\psi_\lambda \overline{\chi} \in \mathcal{C}$ gilt, gibt Lemma 6.9, dass der erste Imaginärteil des ersten Terms nichtpositiv ist. Gebrauch von Bemerkung 6.8 und simple Abschätzungen für die beiden anderen Terme geben schließlich das Resultat. \square

7 Die nichtlineare Schrödinger-Gleichung - SPS

In diesem Kapitel wenden wir uns der nichtlinearen Schrödinger-Gleichung zu. Die Nichtlinearität tritt durch Kopplung des Potentials an die Elektronendichte in Form der Poisson-Gleichung auf. Solche Systeme bezeichnet man, wie in der Einleitung erwähnt, als Schrödinger-Poisson Systeme, kurz SPS. Das offene SPS besteht aus der Lösung des Systems

$$i\partial_t\psi_\lambda = \mathcal{H}(t)\psi_\lambda, \quad \psi_\lambda(0, \cdot) = \psi_\lambda^0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (7.1)$$

$$\mathcal{H}(t) = -\Delta + V_e(t, x) + V_s(t, x), \quad \text{supp}(V_s) \subset \Omega_0 \quad (7.2)$$

$$\Delta V_s = n = \int_\Lambda |\psi_\lambda|^2 d\mu(\lambda), \quad x \in \Omega_0, \quad V_s|_{\partial\Omega_0} \equiv 0 \quad (7.3)$$

nach ψ_λ und V_s . Gleichung (7.3) bezeichnet man als Poissonkopplung für das Potential V im Gebiet Ω_0 . Wir zeigen am Ende des Kapitels, dass das System global eine eindeutige Lösung hat. Der Beweis wird mit Hilfe eines Fixpunktarguments für V_s geführt. In diesem Kapitel halten wir uns an [BAMP05, Section 4] und [BAMP05, Section 5].

Bemerkung 7.1. In einem vorangegangenen Artikel [BAP02] gaben Ben-Abdallah und Pinaud für das eindimensionale Problem, beschränkt auf Ω_0 , folgende Existenz und Eindeutigkeitsaussage für das nichtlineare Problem. Dabei wurde das Potential als zum Zeitpunkt 0 sich sprunghaft ändernd auf den Leitern angenommen. Bis zum Zeitpunkt 0, also für $t \leq 0$, ist das Potential V jeweils konstant $V_l^<$ bzw. $V_r^<$ auf Ω_l bzw. Ω_r . Danach, für $t > 0$, gilt, V ist konstant $V_l^>$ bzw. $V_r^>$, wobei man ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen kann, dass sich das Potential nur auf einem Leiter ändert. \square

Satz 7.2. *Unter den Annahmen von 3.3 gilt, dass das Evolutionsproblem (7.1) - (7.3) eine eindeutige Lösung in $C([0, T], W^{2,\infty}(\Omega_0)) \cap C^1([0, T], L^\infty(\Omega_0))$ für beliebig große T hat.*

7.1 Lokale Existenz und Eindeutigkeit

Für ein gegebenes V_s und für alle $t \in [0, T]$ fest definieren wir die Abbildung \mathcal{F} auf V_s durch

$$\begin{cases} -\Delta \mathcal{F}(V_s) = n[V_s] = \int_\Lambda |\psi_\lambda(V_s)|^2 d\mu(\lambda), & x \in \Omega_0 \\ \mathcal{F}(V_s)|_{\partial\Omega_0} \equiv 0 \end{cases} \quad (7.4)$$

wobei man $\psi_\lambda[V_s]$ als Lösung von (7.1) - (7.2) erhält.

Um die Notation einfacher zu halten, bezeichne Y folgenden Raum

$$Y = C^1([0, t_0], L^\infty(\Omega_0)) \cap C^0([0, t_0], H_0^1(\Omega_0))$$

Wir geben nun folgendes lokales Existenz- und Eindeutigkeitsresultat (vergleiche [BAMP05, Proposition 4.1])

Satz 7.3. *Unter den Annahmen (A - 1) - (A - 4) existiert ein $t_0 \geq 0$ sodass \mathcal{F} eine Kontraktion auf Y ist.*

Beweis. Wir beginnen den Beweis mit der Aussage, dass \mathcal{F} eine Selbstabbildung auf Y ist, also $\mathcal{F}(Y) \subset Y$. Dazu geben wir uns ein $V_s \in Y$ vor. Unmittelbar folgt mit Bemerkung 6.1, dass dann $V \in \mathcal{V}$ und da $\psi_\lambda^0 \in H_{loc}^2$ sind alle Voraussetzungen von Satz 6.4 erfüllt. Nach diesem Satz erlaubt (7.1) - (7.2) eine eindeutige Lösung $\psi[V_s] \in \mathcal{C} + \psi_\lambda^{pw}$, sodass für alle $t \in [0, t_0]$ gilt

$$\int_\Lambda \|\psi_\lambda(t)\|_{H_{loc}^2(\Omega)}^2 d\mu(\lambda) \leq C(V_s). \quad (7.5)$$

In obiger Gleichung geht auch (A - 3) ein. Mit Hilfe der Soboleveinbettung $H^2(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$ erhalten wir, dass $n[V_s] \in C([0, t_0], L^\infty(\Omega_0))$. Elliptische Regularität gibt schließlich

$$\mathcal{F}(V_s) \in C^0([0, t_0], H^2(\Omega_0)) \cap C^0([0, t_0], H_0^1(\Omega_0))$$

Das lokale Erhaltungsgesetz für Ladungen im eindimensionalen Fall für ein festes λ lautet

$$\partial_t n_\lambda + \partial_x j_\lambda = 0$$

mit $n_\lambda = |\psi_\lambda|^2$ und $j_\lambda = \text{Im}(\overline{\psi_\lambda} \partial_x \psi_\lambda)$. Eingesetzt in (7.4) erhält man

$$\Delta \partial_t \mathcal{F}(V_s) = \partial_x J(V_s) \quad (7.6)$$

Hier ist J das Integral über Λ von j_λ , vergleiche dazu auch (3.3). Wir betrachten nun die L^2 -Norm von J über Ω_0 :

$$\begin{aligned} \|J(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 &= \int_{\Omega_0} \left| \int_\Lambda |j_\lambda(t)| d\mu(\lambda) \right|^2 dx \\ &\leq C \int_{\Omega_0} \int_\Lambda |j_\lambda(t)|^2 d\mu dx \\ &= C \int_\Lambda \|j_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 d\mu \end{aligned}$$

Für obige erste Ungleichung benützt man die Jensensche Ungleichung. Die darauffolgende Gleichheit folgt mit dem Satz von Fubini.

$$\|J(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 \leq \left(\int_\Lambda \|\psi_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\mu \right) \left(\int_\Lambda \|\psi_\lambda(t)\|_{H^\infty(\Omega)}^2 d\mu \right)$$

Mit Hilfe der üblichen Soboleveinbettung $H^2(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$ und $H^2(\Omega_0) \hookrightarrow L^2(\Omega_0)$ und Gleichung (7.5) können wir schließen, dass $J \in C([0, t_0], L^2(\Omega_0))$. Wiederum mit der elliptischen Regularität aus Gleichung (7.6) erhalten wir

$\partial_t \mathcal{F}(V_s) \in C([0, t_0], H_0^1(\Omega_0))$. Schließlich bemühen wir noch die Soboleveinbettung $H_0^1(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$, um die gewünschte Regularität

$$\partial_t \mathcal{F}(V_s) \in C([0, t_0], L^\infty(\Omega_0))$$

zu zeigen. Also gilt $\mathcal{F}(V_s) \in Y$.

Nun zeigen wir, dass \mathcal{F} eine Kontraktion ist für t_0 klein genug. Dazu nehmen wir an, dass 2 Potentiale V_s und \tilde{V}_s gegeben sind. Diese Potentiale sollen in einer offenen Umgebung von Y mit Radius R liegen. Wir bezeichnen mit $\psi_\lambda, \tilde{\psi}_\lambda \in \mathcal{C} + \psi_\lambda^{pw}$ die dazugehörigen Wellenfunktionen. Wir untersuchen nun die Poissongleichung und das Erhaltungsgesetz für Ladungen unter der Abbildung \mathcal{F}

$$-\Delta \left(\mathcal{F}(V_s) - \mathcal{F}(\tilde{V}_s) \right) = n(V_s) - n(\tilde{V}_s) \quad (7.7)$$

$$\Delta \partial_x \left(\mathcal{F}(V_s) - \mathcal{F}(\tilde{V}_s) \right) = J(V_s) - J(\tilde{V}_s) \quad (7.8)$$

Wir müssen also die rechten Seiten dieser Gleichungen kontrollieren, um zeigen zu können, dass \mathcal{F} eine Kontraktion ist. Zunächst definiere die Hilfsfunktion $w_\lambda := \psi_\lambda - \tilde{\psi}_\lambda$. Da die jeweiligen Wellenfunktionen (7.1) und (7.2) erfüllen, gilt

$$i\partial_t w_\lambda = (-\Delta + V_e + V_s)w_\lambda + (V_s - \tilde{V}_s)\tilde{\psi}_\lambda, \quad w_\lambda(0, \cdot) = 0$$

Da $V_s \in Y$, gilt insgesamt $V_s + V_e \in \mathcal{V}$. Wir haben auch $(V_s - \tilde{V}_s)\tilde{\psi}_\lambda \in C^1([0, t_0], L^2(\mathbb{R}))$, daher können wir die Ergebnisse aus Abschnitt 6 anwenden. Wir betrachten dabei $(V_s - \tilde{V}_s)\tilde{\psi}_\lambda$ als Inhomogenität. Es folgt mit Lemma 6.3 und Abschätzung (6.8) zuerst

$$\|w_\lambda\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|w_\lambda(0, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|(V_s - \tilde{V}_s)\tilde{\psi}_\lambda\|_{L^1((0, t_0), L^2(\mathbb{R}))}$$

Man beachte die Anfangsbedingung, der erste Term rechts verschwindet. Durch nochmaliges Abschätzen des zweiten Terms auf der rechten Seite erhält man schließlich, weil $\tilde{\psi}_\lambda$ die homogene Gleichung erfüllt, die Abschätzung

$$\|w_\lambda\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq t_0 \|\psi_\lambda^0\|_{L^2(\mathbb{R})} \|V_s - \tilde{V}_s\|_{C^0([0, t_0], L^\infty(\mathbb{R}))} \quad (7.9)$$

Ebenso kann man folgende H^2 Abschätzung erhalten, indem man den Beweis in Lemma 6.3 genauer analysiert und im Hinblick auf t_0 klein abschätzt.

$$\|w_\lambda\|_{H^2(\mathbb{R})} \leq C_R t_0 \|\psi_\lambda^0\|_{L^2(\mathbb{R})} \|V_s - \tilde{V}_s\|_{C^1([0, t_0], L^\infty(\mathbb{R}))} \quad (7.10)$$

Nun wenden wir uns (7.7) zu. Wir benützen die Soboleveinbettung $H^2(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$ und dass $L^\infty(\Omega_0) \subset L^2(\Omega_0)$. Wir erhalten damit unter Berücksich-

tigung von (6.13), (7.5) und (7.9) diese Ungleichungskette:

$$\begin{aligned}
\|n(V_s) - n(\tilde{V}_s)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 &= \int_{\Omega_0} \left| \int_{\Lambda} |\psi_\lambda|^2 - |\tilde{\psi}_\lambda|^2 d\mu(\lambda) \right|^2 dx \leq \\
&\leq \int_{\Lambda} \|(\psi_\lambda + \tilde{\psi}_\lambda) w_\lambda\|_{L^2(\Omega_0)}^2 d\mu \\
&\leq \left(\int_{\Lambda} \|\psi_\lambda + \tilde{\psi}_\lambda\|_{L^\infty(\Omega_0)}^2 d\mu \right) \left(\int_{\Lambda} \|w_\lambda\|_{L^2(\Omega)}^2 d\mu \right) \\
&\leq C_R \left(\int_{\Lambda} \|\psi_\lambda^0\|_{H^2(\Omega_0)}^2 d\mu \right) \left(\int_{\Lambda} \|w_\lambda\|_{L^2(\Omega)}^2 d\mu \right) \\
&\leq C_R t_0 \|\psi_\lambda^0\|_{H_{loc}^2(\mathbb{R})} \|V_s - \tilde{V}_s\|_{C^0([0,t_0], L^\infty(\mathbb{R}))} \tag{7.11}
\end{aligned}$$

Behandeln wir nun den Term $J(V_s) - J(\tilde{V}_s)$. Dabei benutzen wir die Soboleveinbettungen $H^2(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$, sowie $H^2(\Omega_0) \hookrightarrow H^1(\Omega_0)$ und $H^1(\Omega_0) \hookrightarrow L^2(\Omega_0)$.

$$\begin{aligned}
\|J(V_s) - J(\tilde{V}_s)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 &\leq \\
&\leq C \left(\int_{\Lambda} \|\psi_\lambda(t) + \tilde{\psi}_\lambda\|_{L^\infty(\Omega_0)}^2 d\mu \right) \left(\int_{\Lambda} \|\partial_x w_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 d\mu \right) \\
&\leq C \left(\int_{\Lambda} \|\psi_\lambda(t) + \tilde{\psi}_\lambda\|_{H^2(\Omega_0)}^2 d\mu \right) \left(\int_{\Lambda} \|\partial_x w_\lambda(t)\|_{H^2(\Omega_0)}^2 d\mu \right)
\end{aligned}$$

Mit Hilfe von (7.5) und (7.10) folgt

$$\|J(V_s) - J(\tilde{V}_s)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 \leq C_R t_0 \|V_s - \tilde{V}_s\|_{C^1([0,t_0], L^\infty(\Omega_0))} \tag{7.12}$$

Nun können wir leicht zeigen, dass \mathcal{F} eine Kontraktion auf Y ist. Dazu betrachten wir (7.7) und nützen (7.11) aus um

$$\|\mathcal{F}(V_s) - \mathcal{F}(\tilde{V}_s)\|_{C^0([0,t_0], H^2(\Omega_0))} \leq C_R t_0 \|\psi_\lambda^0\|_{L^2(\mathbb{R})} \|V_s - \tilde{V}_s\|_{C^0([0,t_0], L^\infty(\mathbb{R}))}$$

zu erhalten. Wir machen nun Gebrauch von (7.8) und (7.12) und der Einbettung $H^1(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$ um

$$\begin{aligned}
\|\partial_t(\mathcal{F}(V_s) - \mathcal{F}(\tilde{V}_s))\|_{C^0([0,t_0], L^\infty(\Omega_0))} &\leq C \|\partial_t \mathcal{F}(V_s) - \partial_t \mathcal{F}(\tilde{V}_s)\|_{C^0([0,t_0], H^1(\Omega_0))} \\
&\leq C_R t_0 \|V_s - \tilde{V}_s\|_{C^1([0,t_0], L^\infty(\Omega_0))}
\end{aligned}$$

zu erhalten. Der Beweis ist vollbracht, indem man t_0 klein genug wählt. \square

7.2 Globale Existenz und Eindeutigkeit

Wir geben nun das Hauptresultat der Bachelorarbeit. Man findet diesen Satz für zwei und drei Dimensionen in [BAMP05] als Theorem 2.5.

Satz 7.4 (Globaler Existenz- und Eindeutigkeitsatz). Seien die Annahmen (A - 1) - (A - 4) aus Abschnitt 6 erfüllt. Dann gilt:

Das Schrödinger-Poisson System, wie in (7.1) - (7.3) angegeben, besitzt eine eindeutige Lösung (ψ_λ, V_s) sodass

$$V_s \in C^0([0, T], H_0^1(\Omega_0)) \cap C^0([0, T], H^4(\Omega_0)) \cap C^1([0, T], H^2(\Omega_0))$$

und $\psi_\lambda^{pw} + C$ für fast alle $\lambda \in \Lambda$ mit C wie in (6.6) angegeben und T beliebig groß.

Beweis. Der Beweis für globale Existenz- und Eindeutigkeit etabliert eine A-priori Abschätzung der H^1 -Norm von ψ_λ für beliebige positive Zeiten. Dabei nützt man die physikalischen Gesetze der Ladungs- und Energieerhaltung. Damit ist es dann möglich, die lokale Lösung global fortzusetzen.

Zuerst definieren wir die Gesamtenergie \mathcal{E} über Ω_0 folgendermaßen

$$\mathcal{E}(t) = \int_\Lambda \|\psi_\lambda(t)\|_{H^1(\Omega_0)}^2 d\mu(\lambda) + \frac{1}{2} \|\partial_x V_s(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 \quad (7.13)$$

Wir betrachten nun die lokale Lösung ψ_λ aus dem letzten Abschnitt. Jene erfüllt die Abschätzungen (6.19) und (6.20). Eine Integration der ersten Abschätzung gibt unter Beachtung von (A - 3)

$$\|n(t)\|_{L^1(\Omega)} = \int_\Lambda \|\psi_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 d\mu \leq C + C \left(\int_0^t \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi s}} \right) \mathcal{E}(s) ds \right)^{1/2} \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(t) &\leq C + C \int_0^t \left(1 + \frac{1}{\pi s} \right) \mathcal{E}(s) ds - \int_0^t \int_{\Omega_0} V_e \partial_t n \, dx \, ds + \\ &+ C \int_0^t \|V_s(s)\|_{L^2(\Omega)} \left(1 + \|n(s)\|_{L^1(\Omega_0)}^{1/2} \right) ds + \\ &+ \frac{1}{2} \|\partial_x V_s(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 - \int_0^t \int_{\Omega_0} V_s \partial_t n \, dx \, ds \end{aligned} \quad (7.15)$$

Wir schätzen nun die einzelnen Terme ab. Wir bemerken, dass wir aus der Regularität der Poissongleichung $\|V_s(t)\|_{W^{1,1}(\Omega_0)} \leq C \|n(t)\|_{L^1(\Omega_0)}$ erhalten und mit der Soboleveinbettung $W^{1,1} \hookrightarrow L^2(\Omega_0)$ weiters $\|V_s(t)\|_{L^2(\Omega_0)} \leq C \|n(t)\|_{L^1(\Omega_0)}$ folgern können. Damit und mit (7.14) schließen wir

$$\int_0^t \|V_s(s)\|_{L^2(\Omega)} \left(1 + \|n(s)\|_{L^1(\Omega_0)}^{1/2} \right) ds \leq C + C \left(\int_0^t \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi s}} \right) \mathcal{E}(s) ds \right)^{3/4}$$

Die Poissongleichung lautet nach einmaligem partiellen Integrieren

$$(n(t), V_s(t))_{L^2(\Omega_0)} = \|\partial_x V_s\|_{L^2(\Omega_0)}^2$$

sodass

$$\frac{1}{2} \|\partial_x V_s(t)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 - \int_0^t \int_{\Omega_0} V_s \partial_t n dx ds = \frac{1}{2} \|\partial_x V_s(0)\|_{L^2(\Omega_0)}^2$$

gilt. Für den übrig gebliebenen Term integrieren wir partiell nach der Zeit und beachten (A - 4) sowie (7.14)

$$\int_0^t \int_{\Omega_0} V_e \partial_t n dx ds \leq C + C \left(\int_0^t \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi s}} \right) \mathcal{E}(s) ds \right)^{1/2}$$

Nach Sammeln aller abgeschätzten Terme liest sich die Ungleichung für $\mathcal{E}(t)$ so:

$$\mathcal{E}(t) \leq C + \frac{1}{2} \|\partial_x V_s(0)\|_{L^2(\Omega_0)}^2 + C \left(\int_0^t \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\pi s}} \right) \mathcal{E}(s) ds \right)^{3/4}$$

Die Poissongleichung und $V_0 \in L^\infty(\Omega)$ geben $\|\partial_x V_s(0)\|_{L^2(\Omega_0)} \leq C$, sodass man mit einem Gronwallargument schließlich die gewünschte Abschätzung

$$\mathcal{E}(t) \leq C_T$$

erreicht hat.

Wir kommen nun zum Beweis der Regularität von ψ_λ und V_s . Dabei werden wir Schritt für Schritt höhere Differentiationsordnungen erhalten. Obige Abschätzung für $\mathcal{E}(t)$ wird dabei wesentlich eingehen. Daraus erhalten wir nämlich, dass das Integral über Λ von der $H^1(\Omega_0)$ -Norm der $\psi_\lambda(t)$ beschränkt ist, genauso wie die Beschränktheit der $L^2(\Omega_0)$ -Norm von $\partial_x V_s(t)$. Mit Hilfe der üblichen Soboleveinbettungen kann man

$$n \in C^0([0, T]), H^1(\Omega_0))$$

zeigen. Daraus folgt dann mit der Poissongleichung und der Erhaltungsgleichung für Ladungen

$$\begin{aligned} J &\in C^0([0, T]), L^2(\Omega_0)) \\ V &\in C^0([0, T]), H^3(\Omega_0)) \\ \partial_t V &\in C^0([0, T]), H^1(\Omega_0)) \end{aligned} \tag{7.16}$$

Indem wir $u_\lambda(t) := \partial_t \phi_\lambda$ einführen und bemerken, dass ϕ_λ wegen (6.15) folgende Gleichung löst

$$\begin{cases} i \partial_t u_\lambda = (-\Delta + V) u_\lambda + \partial_t V \phi_\lambda - \partial_t S_\lambda(V) & \text{in } \Omega \\ u_\lambda(0, x) = i S_\lambda(V)(0, x) \end{cases}$$

erhalten wir direkt

$$\|\partial_t \phi_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)} \leq \|S_\lambda(V)(0, x)\|_{L^2(\Omega_0)} + \|\partial_t V \phi_\lambda - \partial_t S_\lambda(V)\|_{L^1((0, T), L^2(\Omega_0))}.$$

Wir wenden wieder die Soboleveinbettungen $H^1(\Omega_0) \hookrightarrow L^\infty(\Omega_0)$ und $H^1(\Omega_0) \hookrightarrow L^2(\Omega_0)$ an und erhalten

$$\int_{\Lambda} \|\partial_t V \phi_\lambda\|_{L^1((0,T),L^2(\Omega_0))}^2 d\mu(\lambda) \leq C$$

Aus (6.17) und (7.16) erhält man

$$\|\partial_t S_\lambda(V)\|_{L^1((0,T),L^2(\Omega_0))} \leq C$$

Wir kommen also zu folgender Ungleichung

$$\int_{\Lambda} \|\partial_t \phi_\lambda(t)\|_{L^2(\Omega_0)} d\mu \leq C, \quad \forall t \in [0, T]$$

Indem wir (6.15) berücksichtigen, haben wir schließlich

$$\int_{\Lambda} \|\psi_\lambda(t)\|_{H^2(\Omega_0)}^2 d\mu \leq C$$

Wir haben also nun eine Differentiationsordnung mehr erreicht als nach der a-priori Energieabschätzung. Damit können wir

$$n \in C^0([0, T], H^2(\Omega_0))$$

schließen. Mit Hilfe der regularisierenden Eigenschaft der Poissongleichung folgt die behauptete Regularität von V_s wie im Satz angegeben. \square

Literatur

- [AAB⁺08] Xavier Antoine, Anton Arnold, Christophe Besse, Matthias Ehrhardt, and Achim Schädle. A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Comput. Phys.*, 4(4):729–796, 2008.
- [Ada75] Robert A. Adams. *Sobolev spaces*. Academic Press [A subsidiary of Harcourt Brace Jovanovich, Publishers], New York-London, 1975. Pure and Applied Mathematics, Vol. 65.
- [Arn90] Anton Arnold. Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. *VLSI Design*, 6:313–319, 1990.
- [BADM97] Naoufel Ben Abdallah, Pierre Degond, and Peter A. Markowich. On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model. *Z. Angew. Math. Phys.*, 48(1):135–155, 1997.
- [BAMP05] Naoufel Ben Abdallah, Florian Méhats, and Olivier Pinaud. On an open transient Schrödinger-Poisson system. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 15(5):667–688, 2005.
- [BAP02] Naoufel Ben Abdallah and Olivier Pinaud. A mathematical model for the transient evolution of a resonant tunneling diode. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(4):283–288, 2002.
- [Caz03] Thierry Cazenave. *Semilinear Schrödinger equations*, volume 10 of *Courant Lecture Notes in Mathematics*. New York University Courant Institute of Mathematical Sciences, New York, 2003.
- [Eva98] Lawrence C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1998.
- [Fre90] William R. Frensley. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium. *Rev. Modern Phys.*, 62(3):745–791, 1990.
- [GV91] Rudolf Gorenflo and Sergio Vessella. *Abel integral equations*, volume 1461 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1991. Analysis and applications.
- [Jün01] Ansgar Jüngel. *Eine Einführung in die Halbgruppentheorie*. Universität Konstanz, 2001.
- [Jün09] A. Jüngel. *Transport equations for semiconductors*, volume 773 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 2009.

- [LK90] C.S. Lent and D.J. Kirkner. The quantum transmitting boundary method. *J. Appl. Phys.*, 67:6353–6359, 1990.
- [Paz83] A. Pazy. *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, volume 44 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [RS75] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of modern mathematical physics. II. Fourier analysis, self-adjointness*. Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1975.