

Westfälische Wilhelms-Universität
Münster

Die lineare Wigner-Fokker-Planck Gleichung

Diplomarbeit

im Studiengang Mathematik

von

Bastian Südfeld

bei Prof. Dr. Anton Arnold

am Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
des Fachbereichs Mathematik und Informatik

Münster, 2. November 2007

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	3
Abkürzungs- und Symbolverzeichnis	4
1 Einleitung	6
2 Vorbemerkungen	8
2.1 Operatoren	8
2.2 Wignertransformation	12
3 Die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung	15
3.1 Umformulierung der Evolutionsgleichung auf die Wigner-Fokker-Planck-Gleichung	15
3.2 Harmonisches Oszillator-Potential	18
3.3 Greensche Funktion für die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung	19
3.3.1 Definition der Greenschen Funktion	19
3.3.2 Berechnung der Greenschen Funktion	19
3.4 Die Lösung der linearen Wigner-Fokker-Planck-Gleichung	27
4 Dichte-Matrix-Funktion und Dichte-Matrix-Operator	29
4.1 Rücktransformation der Wigner-Funktion	29
4.2 Betrachtung des Operators $R(t)$ in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$	33
4.2.1 Positivität	33
4.2.2 Halbgruppeneigenschaft	36
4.2.3 Zeitstetigkeit bezüglich der $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm	38
4.2.4 Zusammenfassung einiger Eigenschaften in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$	39
4.3 Betrachtung des Operators $R(t)$ in $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$	40
4.3.1 Spurklasse-Norm-Erhaltung	40
4.3.2 Zeitstetigkeit bezüglich der $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm	44
4.3.3 Zusammenfassung einiger Eigenschaften in $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$	45
4.4 Betrachtung des Operators $R(t)$ im Energieraum \mathcal{E}	46
4.4.1 Energieraum-Erhaltung	47
4.4.2 Zeitstetigkeit bezüglich der Energienorm	53

4.4.3	Zusammenfassung einiger Eigenschaften im Energieraum	59
5	Zusammenfassung	61
	Literaturverzeichnis	67
A	Ausführlicher Beweis zu Lemma 3.2	71
B	Halbgruppeneigenschaft im dritten Fall	74
C	Ausführlicher Beweis zur Proposition 4.17	85
D	Berechnungen für $\dot{\alpha} = 0$	98
D.1	Positivität von $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$	99
D.2	$\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm von $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$	103
D.3	Kinetische und potentielle Energie von $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$	103
D.4	Stetigkeit der Energienorm in $t = \frac{k\pi}{\omega}$	107

Abbildungsverzeichnis

5.1	Energie und $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im 1. Fall	63
5.2	Energie und $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im 2. Fall	64
5.3	Energie und $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im 3. Fall	64
5.4	Energie im 1. Fall (Variation von D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} - 1. Variante) . . .	65
5.5	Energie im 1. Fall (Variation von D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} - 2. Variante) . . .	65
5.6	Energie im 1. Fall (Variation von und ω_0)	66
5.7	Energie im 1. Fall (Variation von γ)	66
5.8	Wigner-Funktion im 1. Fall zu den Zeiten $t = 0$ und $t = 0,02$	67
5.9	Wigner-Funktion im 1. Fall zu den Zeiten $t = 0,1$ und $t = 0,2$	67
5.10	Wigner-Funktion im 1. Fall zu den Zeiten $t = 0,5$ und $t = 1$	68
5.11	Zeitverlauf von $\rho(x, x, t)$	68

Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

\hbar	Plancksches Wirkungsquantum
$\Re(z)$	Realteil von $z \in \mathbb{C}$
$\Im(z)$	Imaginärteil von $z \in \mathbb{C}$
\bar{z}	komplex Konjugierte von $z \in \mathbb{C}$
x^2	$:= x ^2$ für $x \in \mathbb{R}^d$
x^T	transponierter Vektor zu $x \in \mathbb{R}^d$
M^T	transponierte Matrix zu $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$
$\delta(a)$	Diracsche Deltadistribution an der Stelle $a \in \mathbb{R}$
$\mathcal{F}_{x \rightarrow k}$	Fouriertransformation von x nach k
\hat{f}	Fouriertransformierte von f , definiert durch $\hat{f}(k) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ix \cdot k} dx$
$\mathcal{F}_{k \rightarrow x}^{-1}$	inverse Fouriertransformation von k nach x
$\frac{d^k f}{dt^k}$	k -te Differentiation der Funktion f nach t
∂_t	partielle Differentiation nach t
\dot{f}	Differentiation der Funktion f nach t
\ddot{f}	Zweite Differentiation der Funktion f nach t
∇_x	Gradient bezüglich x
div_x	Divergenz bezüglich x
Δ_x	Laplace-Operator bezüglich x
A^*	adjungierter Operator zu $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$
$ A $	$:= \sqrt{A^* A}$ für $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$
$Tr(\cdot)$	Spur
\mathbb{N}	Menge der natürlichen Zahlen = $\{1, 2, 3, \dots\}$
\mathbb{R}_0^+	Menge der nicht-negativen reellen Zahlen
$C_0^p(\mathbb{R}^d)$	Raum der p -mal stetig differenzierbaren Funktionen auf \mathbb{R}^d mit kompaktem Träger, $0 \leq p \leq \infty$
l^p	Folgenraum, $1 \leq p \leq \infty$
$L^p(\mathbb{R}^d)$	Lebesgue-Raum auf \mathbb{R}^d , $1 \leq p \leq \infty$
$H^1(\mathbb{R}^d)$	Sobolevraum auf \mathbb{R}^d , in dem sowohl die Funktion als auch die 1. schwache Ableitung in $L^2(\mathbb{R}^d)$ liegt

$C(\mathbb{R}_0^+; L^p(\mathbb{R}^d))$	Raum der stetigen Funktionen auf \mathbb{R}_0^+ mit Werten in $L^p(\mathbb{R}^d)$, $1 \leq p \leq \infty$
$C^1(\mathbb{R}^+; C^p(\mathbb{R}^d))$	Raum der stetig differenzierbaren Funktionen auf \mathbb{R}^+ mit Werten in $C^p(\mathbb{R}^d)$, $0 \leq p \leq \infty$
$\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$	Raum der linearen, stetigen Operatoren von $L^2(\mathbb{R}^d)$ nach $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$	Raum der Spurklasse-Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$	Unterraum der selbstadjungierten Spurklasse-Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$	Raum der Hilbert-Schmidt-Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$	Unterraum der selbstadjungierten Hilbert-Schmidt- Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$	Skalarprodukt auf $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\ \cdot \ _{L^2(\mathbb{R}^d)}$	durch $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ induzierte Norm auf $L^2(\mathbb{R}^d)$
$\ \cdot \ $	Operatornorm auf $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$
$\ \cdot \ _1$	Spurklasse-Norm auf $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$
$\langle \cdot, \cdot \rangle_2$	Skalarprodukt auf $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$
$\ \cdot \ _2$	Hilbert-Schmidt-Norm auf $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$
$\ \cdot \ _{\mathcal{E}}$	Energienorm auf dem Energieraum \mathcal{E}

Kapitel 1

Einleitung

Die Quantenmechanik zählt zu den modernen Disziplinen der Theoretischen Physik ([No04]) und ergänzt bei der Betrachtung und Erklärung bestimmter Naturerscheinungen die Gebiete der klassischen Physik ([Sc02]).

Um quantenmechanische Phänomene, zum Beispiel in der Quantenoptik ([Da76], [Ha70]), in der Mikroelektronik ([St86]), in der Halbleitermodellierung ([GGKS93]) oder in der Betrachtung der Brownschen Quantenbewegung ([Di93]) kinetisch beschreiben zu können, kommen quantenkinetische Transportgleichungen, wie zum Beispiel die Wigner-Gleichung ([Ta83]), zum Einsatz.

Gegenstand dieser Diplomarbeit ist die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung als Beispiel für ein Quantensystem unter dem Einfluss eines harmonischen Oszillator-Potentials und einem Hitzebad von harmonischen Oszillatoren in thermischem Gleichgewicht.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich neben dieser Einleitung in vier Teile:

In Kapitel zwei werden wir einige grundlegende mathematische Vorbemerkungen machen. Wir werden zum einen einige Eigenschaften von Operatoren definieren, wie zum Beispiel die Positivität und die Selbstadjungiertheit eines Operators, um anschließend die Begriffe Spurklasse-Operator, Hilbert-Schmidt-Operator und Dichte-Matrix-Operator einzuführen. Zum anderen stellen wir die Wignertransformation vor. Mit Hilfe dieser lässt sich die Dichte-Matrix-Funktion $\rho(x, y, t)$ eines Dichte-Matrix-Operators $R(t)$ auf die Wigner-Funktion $w(x, \xi, t)$ transformieren.

Im dritten Abschnitt werden wir die Evolutionsgleichung (auch Master-Gleichung genannt) für den Dichte-Matrix-Operator $R(t)$ betrachten und die zugehörige Evolutionsgleichung für die Dichte-Matrix-Funktion $\rho(x, y, t)$ mit Hilfe der in Kapitel zwei vorgestellten Wignertransformation in die Wigner-Fokker-Planck-Gleichung ummodellieren. Dann werden wir den Spezialfall eines harmonischen Oszillators genauer untersuchen. Durch die Wahl des quadratischen Potentials bekommen wir die lineare Wigner-

Fokker-Planck-Gleichung, die wir anschließend durch die Berechnung einer Greenschen Funktion lösen werden.

Wenn wir danach in Kapitel vier die inverse Wignertransformation anwenden, erhalten wir eine Funktion $\rho(x, y, t)$ beziehungsweise einen Operator $R(t)$. Neben dieser Rücktransformation werden wir in diesem Abschnitt Eigenschaften dieser Funktion beziehungsweise dieses Operators genauer untersuchen. Um das Kapitel vier abzuschließen, werden wir zeigen, unter welchen Voraussetzungen an die Anfangsbedingung unsere Lösung der Master-Gleichung ein selbstadjungierter Hilbert-Schmidt-Operator, ein Spurklasse-Operator, ein Dichte-Matrix-Operator oder ein Operator aus dem Energieraum \mathcal{E} ist.

Im fünften Kapitel werden wir dann die gezeigten Ergebnisse kurz zusammenfassen, ein einfaches Beispiel geben und für dieses Beispiel einige Grafiken, die mit MATLAB 7.0.1 erstellt wurden, einbinden.

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei Roberta Bosi für die hervorragende Unterstützung bei mathematischen Fragestellungen bedanken.

Kapitel 2

Vorbemerkungen

2.1 Operatoren

Da wir in dieser Diplomarbeit an vielen Stellen mit Operatoren arbeiten werden, empfiehlt es sich, einige grundlegende Definitionen beziehungsweise Eigenschaften von Operatoren darzustellen.

Um diese Ausarbeitungen nicht zu allgemein zu fassen, werden wir die Aussagen so darstellen, wie wir sie später benötigen.

Für genauere Details empfehlen wir [RS80].

Wir betrachten den Raum $L^2(\mathbb{R}^d)$. Dieser Raum ist ein Hilbertraum (siehe [El02]), also auch ein Banachraum.

Mit $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ bezeichnen wir die Menge aller linearen, stetigen Operatoren von $L^2(\mathbb{R}^d)$ nach $L^2(\mathbb{R}^d)$.

$\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ wird mit der Operator-Norm $\|A\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|A\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}}{\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}}$ für ein

$A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ selbst zu einem Banachraum.

Hierbei ist $\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \langle \psi, \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi}(x) \psi(x) dx$ für ein $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

Damit können wir nun die starke und die schwache Konvergenz einführen.

Definition 2.1 Konvergenzbegriffe

Seien A_n (für $n \in \mathbb{N}$) und A aus $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. Dann definieren wir:

A_n konvergiert für $n \rightarrow \infty$ (stark) gegen A ($A_n \rightarrow_{n \rightarrow \infty} A$) genau dann, wenn

$$\forall_{\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)} \|A_n \psi - A \psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \rightarrow_{n \rightarrow \infty} 0.$$

A_n konvergiert für $n \rightarrow \infty$ schwach gegen A ($A_n \rightharpoonup_{n \rightarrow \infty} A$) genau dann, wenn

$$\forall_{\psi, \phi \in L^2(\mathbb{R}^d)} \langle \psi, A_n \phi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \rightarrow_{n \rightarrow \infty} \langle \psi, A \phi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Als nächstes benötigen wir die Adjungiertheit und die Selbstdjungiertheit eines beschränkten Operators.

Definition 2.2 Adjungiertheit und Selbstadjungiertheit

Sei $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ ein beschränkter Operator, das heißt

$$\exists c > 0 \forall \psi \in L^2(\mathbb{R}^d) \quad \|A\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq c \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Durch $\langle \psi, A\phi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \langle A^*\psi, \phi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ für $\phi, \psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ wird A^* definiert, welchen wir als adjungierten Operator zu A bezeichnen.

A heißt selbstadjungiert, wenn $A = A^*$ ist.

Mit der Adjunktion ergeben sich unter anderem folgende Rechenregeln

$$\forall_{A,B \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} (AB)^* = B^*A^*, \quad (A^*)^* = A$$

Definition 2.3 Positivität

Sei $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. A wird positiv genannt, genau dann, wenn $\langle \psi, A\psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \geq 0$ für alle $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

Als Kurzbezeichnung schreiben wir $A \geq 0$.

Es lässt sich zeigen, dass jeder beschränkte, positive Operator auf einem Hilbertraum selbstadjungiert ist. Speziell ist für ein beschränktes $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ der Operator A^*A beschränkt, positiv und selbstadjungiert.

Wir möchten nun gerne mit $|A| = \sqrt{A^*A}$ die Wurzel aus einem positiven Operator definieren. Dass wir dies in dieser Form machen dürfen, erlaubt uns der nächste Satz.

Satz 2.4

Sei A ein positiver Operator aus $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. Dann existiert ein eindeutiger, positiver Operator B aus $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ mit $B^2 = A$.

Definition 2.5 Kompaktheit

Ein Operator $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ heißt kompakt, genau dann, wenn A beschränkte Mengen von $L^2(\mathbb{R}^d)$ auf präkompakte Mengen in $L^2(\mathbb{R}^d)$ abbildet.

Für kompakte Operatoren kann man eine kanonische Darstellung finden.

Satz 2.6

Sei A ein kompakter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Dann existieren orthonormale Mengen $\{\psi_n\}_{n=1,\dots,N} \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ und $\{\phi_n\}_{n=1,\dots,N} \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ und positive Zahlen $\{\lambda_n\}_{n=1,\dots,N}$, so dass gilt:

$$A = \sum_{n=1}^N \lambda_n \langle \psi_n, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \phi_n$$

Die endliche oder unendliche Summe ist hierbei normkonvergent und die λ_n sind hierbei die Eigenwerte von $|A|$.

Betrachtet man positive, selbstadjungierte, kompakte Operatoren, so lässt sich auch der folgende Satz zeigen.

Satz 2.7

Sei A ein positiver, selbstadjungierter, kompakter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Dann existiert eine orthonormale Basis $\{\phi_n\}_n$ und positive Zahlen $\{\lambda_n\}_n$, so dass gilt:

$$A = \sum_n \lambda_n \langle \phi_n, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \phi_n$$

Die λ_n sind hierbei die Eigenwerte von A und die Funktionen ϕ_n sind die Eigenvektoren zu λ_n .

Als nächstes definieren wir die Spur eines Operators sowie die Menge der Spurklasse-Operatoren und die Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren.

Definition 2.8 Spur

Sei $\{\psi_n\}_{n=1, \dots, \infty}$ eine Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{R}^d)$. Für einen positiven Operator $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ definieren wir die Spur von A durch

$$\text{tr}(A) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n, A\psi_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

Damit diese Definition überhaupt möglich ist, muss (und kann auch) gezeigt werden, dass die Spur unabhängig von der Wahl der Orthonormalbasis ist.

Mit Hilfe der Spur bekommen wir nun zwei wichtige Familien von Operatoren, nämlich die Spurklasse-Operatoren und die Hilbert-Schmidt-Operatoren.

Definition 2.9 Spurklasse-Operator und Hilbert-Schmidt-Operator

Sei $A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$. Der Operator A ist ein Spurklasse-Operator genau dann, wenn $\text{tr}(|A|) < \infty$. Die Familie der Spurklasse-Operatoren bezeichnen wir im Folgenden mit $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Die Menge der selbstadjungierten Spurklasse-Operatoren nennen wir $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

A wird als Hilbert-Schmidt-Operator bezeichnet, genau dann, wenn $\text{tr}(A^*A) < \infty$. Mit $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ wird die Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren bezeichnet.

Mit $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ bezeichnen wir die Menge der selbstadjungierten Hilbert-Schmidt-Operatoren.

Für die Menge der Spurklasse-Operatoren lassen sich nun zwei wichtige Sätze formulieren.

Satz 2.10

Mit $\|\cdot\|_1$ (definiert durch $\|A\|_1 = \text{tr}(|A|)$ für ein $A \in \mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$) wird $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ zu einem Banachraum, in dem gilt, dass $\|A\| \leq \|A\|_1$ für alle $A \in \mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Satz 2.11

Jedes $A \in \mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist kompakt.

Andersherum gilt, dass ein kompakter Operator A in $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ liegt, genau dann, wenn $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n < \infty$, wobei die λ_n die Eigenwerte von $|A|$ sind.

Ähnliches lässt sich auch für die Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren zeigen. Also möchten wir auch hier zwei Sätze angeben.

Satz 2.12

Für eine Orthonormalbasis $\{\psi\}_{n=1, \dots, \infty} \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ und $A, B \in \mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist der Ausdruck $\langle A, B \rangle_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_n, A^* B \psi_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ absolut summierbar und unabhängig von der Wahl der Orthonormalbasis.

Mit $\langle \cdot, \cdot \rangle_2$ wird $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ zu einem Hilbertraum, in dem gilt:

$$\|A\| \leq \|A\|_2 = \sqrt{\langle A, A \rangle_2} \leq \|A\|_1, \quad \|A\|_2 = \|A^*\|_2$$

Satz 2.13

Jedes $A \in \mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist kompakt.

Ein kompakter Operator A liegt in $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$, genau dann, wenn $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 < \infty$. Hierbei sind die λ_n die Eigenwerte von $|A|$.

Die Menge der Hilbert-Schmidt-Operatoren auf $L^2(\mathbb{R}^d)$ lässt sich mit der Menge $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ vergleichen.

Satz 2.14

$A \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist ein Hilbert-Schmidt-Operator genau dann, wenn es eine Funktion $g \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ gibt mit

$$\forall_{\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)} (A\psi)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x, y) \psi(y) dy$$

Es gilt weiterhin:

$$\|A\|_2 = \|g\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}$$

Da wir ab dem nächsten Kapitel den Begriff Dichte-Matrix-Operator benötigen, möchten wir diesen hier auch definieren.

Definition 2.15 Dichte-Matrix-Operator

Ein Dichte-Matrix-Operator A ist ein positiver, selbstadjungierter Spurklasse-Operator.

Aufgrund der Positivität eines Dichte-Matrix-Operators A gilt, dass

$\|A\|_1 = \text{Tr}(A)$ ist.

Mit dem Satz 2.7 lässt sich ein Dichte-Matrix-Operator A in der Form

$$A = \sum_n \lambda_n \langle \phi_n, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \phi_n$$

schreiben.

Andererseits hat $A\psi$ für ein $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ nach dem Satz 2.14 die Gestalt

$$(A\psi)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x, y) \psi(y) dy$$

Somit lässt sich $g(x, y)$ als $\sum_n \lambda_n \phi_n(x) \overline{\phi_n(y)}$ schreiben. Wir definieren:

Definition 2.16

Für einen Dichte-Matrix-Operator A heißt die Funktion g aus dem Satz 2.14 eine Dichte-Matrix-Funktion oder der Kern von A .

Es lässt sich für eine Dichte-Matrix-Funktion g die Eigenschaft $\overline{g(x, y)} = g(y, x)$ zeigen.

2.2 Wignertransformation

Von E. Wigner wurde 1932 die sogenannte Wigner-Transformation eingeführt ([Wi32], [LP93], [MRS90]).

Mit Hilfe dieser Transformation lässt sich die Dichte-Matrix-Funktion $\rho \in L^2(\mathbb{R}_{x,y}^{2d})$ in die Wigner-Funktion $w \in L^2(\mathbb{R}_{x,\xi}^{2d})$ umschreiben.

$$w(x, \xi) = \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m}y, x - \frac{\hbar}{2m}y\right) e^{-i\xi \cdot y} dy \quad (2.1)$$

Somit können wir unser quantenmechanisches Modell in eine kinetische Transportgleichung für die Wigner-Funktion w umformen.

Um von der Wigner-Funktion auf die Dichte-Matrix-Funktion zu schließen, benötigen wir die inverse Wigner-Transformation.

$$\rho(x, y) = \hbar \int_{\mathbb{R}^d} w\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) e^{i\frac{m}{\hbar}\xi \cdot (x-y)} d\xi \quad (2.2)$$

Im Folgenden wollen wir einige Eigenschaften der Wigner-Transformierten $w(x, \xi)$ von $\rho(x, y)$ zeigen.

Lemma 2.17

Die Wigner-Funktion w ist eine reellwertige Funktion.

Beweis:

$$\begin{aligned}
 \overline{w(x, y)} &= \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \overline{\int_{\mathbb{R}^d} \rho \left(x + \frac{\hbar}{2m} y, x - \frac{\hbar}{2m} y \right) e^{-i\xi \cdot y} dy} \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\rho \left(x + \frac{\hbar}{2m} y, x - \frac{\hbar}{2m} y \right)} e^{i\xi \cdot y} dy \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \rho \left(x - \frac{\hbar}{2m} y, x + \frac{\hbar}{2m} y \right) e^{i\xi \cdot y} dy \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \rho \left(x + \frac{\hbar}{2m} y, x - \frac{\hbar}{2m} y \right) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
 &= w(x, y)
 \end{aligned}$$

Hierbei wurde ausgenutzt, dass für die Dichte-Matrix-Funktion $\overline{\rho(x, y)} = \rho(y, x)$ gilt. \square

Bemerkung: Im Allgemeinen gilt nicht, dass die Wigner-Funktion w nur Werte aus \mathbb{R}_0^+ annimmt.

Wir können die $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ -Norm von ρ mit der $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ -Norm von w vergleichen.

Lemma 2.18

Sei $\rho \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ oder sei $w \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Dann gilt die Formel:

$$\|\rho\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = (2\pi)^d \left(\frac{\hbar}{m}\right)^{\frac{d}{2}} \hbar \|w\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \quad (2.3)$$

Beweis:

Sei $\rho \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

$$\begin{aligned}
 \|\rho\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2 &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} |\rho(x, y)|^2 dx dy \\
 &\stackrel{x:=v-\frac{\hbar}{2m}z, y:=v+\frac{\hbar}{2m}z}{=} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left| \rho \left(v - \frac{\hbar}{2m}z, v + \frac{\hbar}{2m}z \right) \right|^2 dv dz \\
 &= \left(\frac{\hbar}{m}\right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left| \hbar \int_{\mathbb{R}^d} w(v, \xi) e^{-i\xi \cdot z} \right|^2 dv dz \\
 &= \left(\frac{\hbar}{m}\right)^d \hbar^2 \int_{\mathbb{R}^{2d}} |\mathcal{F}_{\xi \rightarrow z}(w)(v, z)|^2 dv dz \\
 &= \left(\frac{\hbar}{m}\right)^d \hbar^2 \|\mathcal{F}_{\xi \rightarrow z}(w)\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2 \\
 &= (2\pi)^{2d} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^d \hbar^2 \|w\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2
 \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde die Parsevalsche Gleichung (siehe [El02]) benutzt. Also ist auch $w \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ und die Gleichung der Behauptung ist erfüllt.

Sei nun $w \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Mit analoger Rechnung zeigt man, dass ρ in $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ liegt und dass die Gleichung aus der Behauptung wahr ist.

□

Kapitel 3

Die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung

In diesem Kapitel werden wir zunächst auf die Evolutionsgleichung für den Dichte-Matrix-Operator $R(t)$ eingehen und diese dann in die Wigner-Fokker-Planck-Gleichung umformen. Anschließend werden wir diese partielle Differentialgleichung für den Spezialfall eines harmonischen Oszillators mit Hilfe einer Greenschen Funktion lösen.

3.1 Umformulierung der Evolutionsgleichung auf die Wigner-Fokker-Planck-Gleichung

Wir betrachten in dieser Arbeit die Bewegung eines Ensembles aus Quantenpartikeln, bei dem der Einfluss der Umgebung durch einen Fokker-Planck-Term modelliert wird. Als Beispiel nehmen wir die Bewegung von Elektronen unter dem Einfluss eines elektrostatischen Potentials V und einem Hitzebad aus harmonischen Oszillatoren in thermischem Gleichgewicht.

Für den Dichte-Matrix-Operator $R(t)$ erhalten wir die zugehörige von Neumann-Gleichung

$$\frac{d}{dt}R(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, R(t)] + A(R(t)) = \mathcal{L}(R(t)) \quad (3.1)$$

mit der Anfangsbedingung

$$R(t=0) = R_0 \quad (3.2)$$

Hierbei beschreibt A den Effekt, der durch den äußeren Einfluss hervorgerufen wird. Dieser Fokker-Planck-Operator lautet:

$$\begin{aligned} A(R(t)) = & -\gamma [x, [\nabla, R(t)]_+] + D_{qq} [\nabla, [\nabla, R(t)]] \\ & - \frac{D_{pp}}{\hbar^2} [x, [x, R(t)]] - \frac{2iD_{pq}}{\hbar} [x, [\nabla, R(t)]] \end{aligned} \quad (3.3)$$

$[B, C] = BC - CB$ beziehungsweise $[B, C]_+ = BC + CB$ sind der Kommutator beziehungsweise der Antikommutator der Operatoren B und C ([Sc02]).

Der Operator H ist der Hamilton-Operator für das System (siehe [Sc02]) und $\mathcal{L}(R(t))$ ist der Differentialoperator der Gleichung (3.1).

Von dieser Gleichung ausgehend, bekommen wir eine Evolutionsgleichung für $\rho(t) \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$, den Kern von $R(t)$.

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= -\frac{i}{\hbar} (H_x - H_y) \rho - \gamma (x - y) \cdot (\nabla_x - \nabla_y) \rho \\ &\quad + D_{qq} |\nabla_x + \nabla_y|^2 \rho - \frac{D_{pp}}{\hbar^2} |x - y|^2 \rho \\ &\quad - \frac{2iD_{pq}}{\hbar} (x - y) \cdot (\nabla_x + \nabla_y) \rho \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\rho(x, y, t = 0) = \rho_0(x, y) \quad x, y \in \mathbb{R}^d \quad (3.5)$$

Hierbei ist H_x (beziehungsweise H_y), definiert durch

$$H_x := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(x),$$

der Hamilton-Operator bezüglich der Variablen x (beziehungsweise y).

Eine notwendige Bedingung, damit unser System bestimmte Eigenschaften des Dichtematrix-Operators erhält (also quantentheoretisch richtig ist), ist die folgende Lindblad-Bedingung für unsere Konstanten D_{pp} , D_{qq} , D_{pq} und γ (siehe [AL07],[CF93], [AS04]).

$$D_{pp} > 0 \quad (3.6)$$

$$D_{qq} \geq 0 \quad (3.7)$$

$$D_{pq} \geq 0 \quad (3.8)$$

$$D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2 \geq \frac{\hbar^2\gamma^2}{4} \quad (3.9)$$

Zusätzlich nehmen wir an, dass

$$\gamma \geq 0 \quad (3.10)$$

ist.

Bemerkung: Die Konstanten sind für gewöhnlich durch

$$\gamma = \frac{\lambda}{2m}, \quad D_{pp} = \lambda k_B T, \quad D_{qq} = \frac{\lambda \hbar^2}{12m^2 k_B T}, \quad D_{pq} = \frac{\lambda \Omega \hbar^2}{12\pi m k_B T}$$

gegeben. $\lambda > 0$ ist die Kopplungskonstante für das Hitzebad, k_B die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur des Bades und Ω die Cut-Off-Frequenzen der Oszillatoren im Reservoir (siehe [SCDM04], [ALMS04], [No04]).

Da unsere Konstanten im weiteren Verlauf dieser Diplomarbeit die Bedingungen (3.6)-(3.10) erfüllen sollen, lässt sich die Dynamik unseres Quantensystems durch eine quantendynamische Halbgruppe beschreiben (siehe [AS04]).

Definition 3.1

Sei $X \subset \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ mit der Spurklasse-Norm $\|\cdot\|_1$ ein Banachraum. Eine konservative quantendynamische Halbgruppe auf X ist eine stark stetige Halbgruppe ([Pa83]) $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ von linearen beschränkten Operatoren auf X , so dass die beiden Bedingungen

1. $\forall_{A \in X, A \geq 0} \quad S(t) A \geq 0$
2. $\forall_{A \in X} \quad \text{Tr}(S(t) A) = \text{Tr}(A)$

für alle $t \geq 0$ erfüllt sind.

Mit Hilfe dieser Halbgruppen definieren wir später Lösungen für (3.1).

Zunächst betrachten wir aber die Wigner-Fokker-Planck-Gleichung. Auf dem Niveau der Wigner-Funktionen liest sich die Gleichung (3.4) als Wigner-Fokker-Planck-Gleichung

$$\partial_t w + \xi \cdot \nabla_x w + \Theta[V] w = Q w \quad x, \xi \in \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}^+ \quad (3.11)$$

mit der Anfangsbedingung

$$w(x, \xi, t = 0) = w_0(x, \xi) \quad (3.12)$$

Der Diffusions-Operator Q hat die Gestalt

$$Q w := \underbrace{\frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi w}_{\text{klass. Diffusion}} + \underbrace{2\gamma \text{div}_\xi(\xi w)}_{\text{Reibung}} + \underbrace{D_{qq} \Delta_x w + 2 \frac{D_{pq}}{m} \text{div}_x(\nabla_\xi w)}_{\text{Quantendiffusion}} \quad (3.13)$$

und beschreibt die Wechselwirkung des Quantensystems mit seiner Umgebung. Der Pseudo-Differential-Operator $\Theta[V]$, definiert durch

$$\Theta[V] w(x, \xi) := \frac{i}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left[V\left(x + \frac{\hbar}{2m} y\right) - V\left(x - \frac{\hbar}{2m} y\right) \right] w(x, \xi') e^{-iy \cdot (\xi - \xi')} d\xi' dy, \quad (3.14)$$

erklärt den Einfluss des elektrostatischen Potentials V auf das Quantensystem.

Lemma 3.2

Die partiellen Differentialgleichungssysteme (3.4), (3.5) und (3.11), (3.12) sind äquivalent.

Beweis:

Wir werten die Gleichung (3.4) an der Stelle $v := x + \frac{\hbar}{2m}y$ und $z := x - \frac{\hbar}{2m}y$ aus, multiplizieren mit $\frac{1}{(2\pi)^d \hbar} e^{-i\xi \cdot y}$ und integrieren über y .

Anschließend vergleichen wir die einzelnen Terme.

□

Bemerkung: Der Vergleich der einzelnen Terme aus dem Beweis des obigen Lemmas befindet sich in Anhang A.

3.2 Harmonisches Oszillator-Potential

Zur Vereinfachung der Rechnungen setzen wir im folgenden $\hbar = m = 1$.

Außerdem betrachten wir im folgenden Verlauf dieser Diplomarbeit ein harmonisches Oszillator-Potential (siehe [No04], [Sc02]).

$$V(x) = \frac{\omega_0^2}{2} |x|^2 + a \cdot x + b, \quad a \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}, \omega_0 \geq 0$$

Der Pseudo-Differential-Operator $\Theta[V]$ lässt sich dann wie folgt berechnen.

$$\begin{aligned} \Theta[V] f(x, \xi) &= \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left[V\left(x + \frac{y}{2}\right) - V\left(x - \frac{y}{2}\right) \right] f(x, \xi') e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy \\ &= \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} (\omega_0^2 x + a) \cdot y f(x, \xi') e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy \\ &= -(\omega_0^2 x + a) \int_{\mathbb{R}^d} \delta^{(1)}(\xi - \xi') f(x, \xi') d\xi' \\ &= (\omega_0^2 x + a) \int_{\mathbb{R}^d} \delta(\xi - \xi') \nabla_{\xi - \xi'} f(x, \xi') d\xi' \\ &= -(\omega_0^2 x + a) \nabla_{\xi} f(x, \xi) \end{aligned}$$

Hierbei ist δ die Diracsche Deltadistribution und $\delta^{(1)}$ deren erste distributionelle Ableitung.

Die Gleichung (3.11) vereinfacht sich somit zu

$$\partial_t \tilde{w} + \xi \cdot \nabla_x \tilde{w} - (\omega_0^2 x + a) \cdot \nabla_{\xi} \tilde{w} = Q \tilde{w} \quad (3.15)$$

Mit der Definition $w(x, \xi, t) := \tilde{w}\left(x - \frac{a}{\omega_0^2}, \xi, t\right)$ lässt sich a aus (3.15) eliminieren.

Somit erhalten wir für ein harmonisches Oszillator-Potential das folgende partielle Differentialgleichungssystem

$$\partial_t w + \xi \cdot \nabla_x w - \omega_0^2 x \cdot \nabla_{\xi} w = Q w \quad x, \xi \in \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}^+ \quad (3.16)$$

$$w(x, \xi, t = 0) = w_0(x, \xi) \quad (3.17)$$

wobei Q dem Q aus (3.13) entspricht.

Die Gleichung (3.16) ist unsere lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung.

3.3 Greensche Funktion für die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung

Greensche Funktionen (benannt nach dem Physiker und Mathematiker George Green) sind Hilfsmittel, um gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen zu lösen.

In unserem Fall werden wir eine Greensche Funktion für unsere lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung (3.16) berechnen, um dann anschließend eine Lösung der partiellen Differentialgleichung anzugeben.

3.3.1 Definition der Greenschen Funktion

In der nächsten Definition werden wir die Greensche Funktion noch für den allgemeinen Fall der Wigner-Fokker-Planck-Gleichung definieren, da sich dies mit dem Fall der linearen Wigner-Fokker-Planck-Gleichung deckt.

Außerdem werden wir erklären, was wir unter einer milden beziehungsweise klassischen Lösung verstehen.

Definition 3.3

Eine Funktion $G(t, x, \xi, x_0, \xi_0)$, die (3.11) für alle festen $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2d}$ und alle $t > 0$ erfüllt und gleichzeitig der Anfangsbedingung

$$\lim_{t \searrow 0} G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) = \delta(x - x_0, \xi - \xi_0)$$

in einem schwachen Sinne genügt, heißt eine Greensche Funktion für die Gleichung (3.11).

Eine Funktion $w \in C(\mathbb{R}_0^+; L^p(\mathbb{R}^{2d}))$ mit $1 \leq p < \infty$ ist eine milde Lösung des partiellen Differentialgleichungssystem (3.11), (3.12), wobei $w_0 \in L^p(\mathbb{R}^{2d})$, genau dann, wenn

$$w(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} w_0(x_0, \xi_0) G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) dx_0 d\xi_0 \quad (3.18)$$

Wir nennen w eine klassische Lösung, falls zusätzlich gilt, dass $w \in C^1(\mathbb{R}^+; C^2(\mathbb{R}^{2d}))$.

3.3.2 Berechnung der Greenschen Funktion

Um die Greensche Funktion für (3.16) zu berechnen, ordnen wir zunächst die partielle Differentialgleichung nach Termen mit Differentiationen 1. Ordnung und nach den

übrigen Termen.

$$\begin{aligned} & \partial_t G + \xi \cdot \nabla_x G - (\omega_0^2 x + 2\gamma\xi) \cdot \nabla_\xi G \\ = & D_{pp} \Delta_\xi G + 2\gamma dG + D_{qq} \Delta_x G + 2D_{pq} \operatorname{div}_x (\nabla_\xi G) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die zugehörige Anfangsbedingung

$$\lim_{t \searrow 0} G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) = \delta(x - x_0, \xi - \xi_0) \quad (3.20)$$

ist aus der Definition 3.3 entnommen.

Fouriertransformation der Gleichung

Mit Hilfe der Fouriertransformation $x \rightarrow k, \xi \rightarrow \eta$

$$\mathcal{F}_{x \rightarrow k, \xi \rightarrow \eta} f(k, \eta) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} f(x, \xi) e^{-i(x \cdot k + \xi \cdot \eta)} dx d\xi$$

lassen sich Differentiationen vor der Fouriertransformation in Multiplikationen nach der Fouriertransformation (und umgekehrt) umformen.

Die Fouriertransformation angewendet auf (3.19) ergibt die folgende Gleichung.

$$\begin{aligned} & \partial_t \hat{G} + i^2 k \cdot \nabla_\eta \hat{G} - \omega_0^2 i^2 \eta \cdot \nabla_k \hat{G} - 2\gamma \underbrace{i^2 \operatorname{div}_\eta (\eta \hat{g})}_{=-d\hat{G} - \eta \cdot \nabla_\eta \hat{G}} \\ = & i^2 D_{pp} |\eta|^2 \hat{G} + i^2 D_{qq} |k|^2 \hat{G} + 2D_{pq} i^2 \eta \cdot k \hat{G} + 2d\gamma \hat{G} \end{aligned}$$

Diese Gleichung lässt sich weiter zusammenfassen und wir erhalten die folgende partielle Differentialgleichung für $\hat{G}(t, k, \eta)$.

$$\begin{aligned} & \partial_t \hat{G} + \omega_0^2 \eta \cdot \nabla_k \hat{G} + (2\gamma\eta - k) \cdot \nabla_\eta \hat{G} \\ = & - (D_{pp} |\eta|^2 + D_{qq} |k|^2 + 2D_{pq} \eta \cdot k) \hat{G} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Die Fouriertransformation auf die Anfangsbedingung (3.20) angewendet, liefert eine Anfangsbedingung für (3.21).

$$\begin{aligned} \hat{G}(0, x, \xi, x_0, \xi_0) &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta(x - x_0, \xi - \xi_0) e^{-i(x \cdot k + \xi \cdot \eta)} dx d\xi \\ &= e^{-i(x_0 \cdot k + \xi_0 \cdot \eta)} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Charakteristikenmethode

Unter Anwendung der Charakteristikenmethode auf (3.21) ergibt sich das folgende Differentialgleichungssystem

$$\partial_t s = 1, \quad s(0) = 0 \quad (3.23)$$

$$\partial_t y = \omega_0^2 z, \quad y(0) = k \quad (3.24)$$

$$\partial_t z = 2\gamma z - y, \quad z(0) = \eta \quad (3.25)$$

$$\partial_t \hat{G} = - (D_{pp} |z|^2 + D_{qq} |y|^2 + 2D_{pq} z \cdot y) u, \quad \hat{G}(0) = e^{-i(x_0 \cdot k + \xi_0 \cdot \eta)} \quad (3.26)$$

Aus (3.23) bekommt man sofort $s = t$.

Mit (3.24) und (3.25) erhält man eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung in t und eine dazugehörige charakteristische Gleichung für λ

$$\begin{aligned} \partial_t^2 y &= \omega_0^2 \partial_t z = 2\gamma \underbrace{\omega_0^2 z}_{\partial_t y} - \omega_0^2 y = 2\gamma \partial_t y - \omega_0^2 y \\ \lambda^2 - 2\gamma\lambda + \omega_0^2 &= 0 \end{aligned}$$

Somit ergibt sich $\lambda_{1,2} = \gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$ und eine damit verbundene Fallunterscheidung in drei Fälle.

Bemerkung: Falls im weiteren Verlauf vom 1. Fall, 2. Fall oder 3. Fall die Rede sein sollte, so bezieht sich dies jeweils auf einen der drei folgenden Fälle.

1. $0 \leq \gamma < \omega_0$

$$\Rightarrow \lambda_{1,2} = \gamma \pm i \underbrace{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}}_{\omega}$$

Mit Hilfe des Ansatzes $y(t) = Ae^{\gamma t} e^{i\omega t} + Be^{\gamma t} e^{-i\omega t}$ und der Betrachtung der Anfangsbedingungen von (3.24) und (3.25), ergibt sich ein lineares Gleichungssystem für A und B .

$$\begin{aligned} k &= y(0) = A + B \\ \eta &= z(0) = \frac{1}{\omega_0^2} \dot{y}(0) = \frac{1}{\omega_0^2} [(\gamma + i\omega)A + (\gamma - i\omega)B] \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} k \\ \eta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{\omega_0^2}(\gamma + i\omega) & \frac{1}{\omega_0^2}(\gamma - i\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \\ \Leftrightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \frac{\omega_0^2}{-2i\omega} \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega_0^2}(\gamma - i\omega) & -1 \\ -\frac{1}{\omega_0^2}(\gamma + i\omega) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ \eta \end{pmatrix} \\ &= \frac{\omega_0^2}{-2i\omega} \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega_0^2}(\gamma - i\omega)k - \eta \\ -\frac{1}{\omega_0^2}(\gamma + i\omega)k + \eta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Setzen wir die Werte für A und B in den Ansatz für $y(t)$ ein, so bekommen wir $y(t)$ und $z(t)$ geliefert.

$$\begin{aligned} y(t) &= \frac{e^{\gamma t}}{-2i\omega} [((\gamma - i\omega)k - \omega_0^2 \eta) (\cos(\omega t) + i \sin(\omega t))] \\ &\quad + \frac{e^{\gamma t}}{-2i\omega} [(-(\gamma + i\omega)k + \omega_0^2 \eta) (\cos(\omega t) - i \sin(\omega t))] \\ &= \frac{e^{\gamma t}}{-2i\omega} [-2i\omega k \cos(\omega t) + (2\gamma k - 2\omega_0^2 \eta) i \sin(\omega t)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{e^{\gamma t}}{\omega} [k(\omega \cos(\omega t) - \gamma \sin(\omega t)) + \eta \omega_0^2 \sin(\omega t)] \\
 z(t) &= \frac{1}{\omega_0^2} \partial_t y(t) \\
 &= \frac{1}{\omega_0^2} \frac{e^{\gamma t}}{\omega} [\gamma k(\omega \cos(\omega t) - \gamma \sin(\omega t)) + \gamma \eta \omega_0^2 \sin(\omega t)] \\
 &\quad + \frac{1}{\omega_0^2} \frac{e^{\gamma t}}{\omega} [k(-\omega^2 \sin(\omega t) - \gamma \omega \cos(\omega t)) + \eta \omega_0^2 \omega \cos(\omega t)] \\
 &= \frac{1}{\omega_0^2} \frac{e^{\gamma t}}{\omega} \left[-k \sin(\omega t) \underbrace{(\gamma^2 + \omega^2)}_{=\omega_0^2} + \eta \omega_0^2 (\gamma \sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)) \right] \\
 &= \frac{e^{\gamma t}}{\omega} [\eta(\gamma \sin(\omega t) + \omega \cos(\omega t)) - k \sin(\omega t)]
 \end{aligned}$$

2. $\gamma > \omega_0$

$$\Rightarrow \lambda_{1,2} = \gamma \pm \underbrace{\sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}}_{=\omega}$$

Diesmal wird der Ansatz $y(t) = Ae^{(\gamma+\omega)t} + Be^{(\gamma-\omega)t}$ benutzt.

$$\begin{aligned}
 y(t) &= \frac{e^{\gamma t}}{\omega} [k(\omega \cosh(\omega t) - \gamma \sinh(\omega t)) + \eta \omega_0^2 \sinh(\omega t)] \\
 z(t) &= \frac{e^{\gamma t}}{\omega} [-k \sinh(\omega t) + \eta(\omega \cosh(\omega t) + \gamma \sinh(\omega t))]
 \end{aligned}$$

3. $\gamma = \omega_0$

$$\Rightarrow \lambda = \gamma$$

In diesem Fall ist der Ansatz $y(t) = Ae^{\gamma t} + Bte^{\gamma t}$ zu wählen.

$$\begin{aligned}
 y(t) &= e^{\gamma t} [k(1 - \gamma t) + \eta \gamma^2 t] \\
 z(t) &= e^{\gamma t} [\eta(1 + \gamma t) - kt]
 \end{aligned}$$

$y(t)$ und $z(t)$ lassen sich für alle drei Fälle in einer einheitlichen Form schreiben.

$$y(t) = \alpha(t)k + \beta(t)\eta \quad (3.27)$$

$$z(t) = \frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2}k + \frac{\dot{\beta}(t)}{\omega_0^2}\eta \quad (3.28)$$

$\alpha(t)$ und $\beta(t)$ sind dabei in den einzelnen Fällen definiert durch

1.

$$\alpha(t) = \frac{e^{\gamma t}}{\omega} (\omega \cos(\omega t) - \gamma \sin(\omega t)), \quad \beta(t) = \frac{\omega_0^2 e^{\gamma t}}{\omega} \sin \omega t \quad (3.29)$$

2.

$$\alpha(t) = \frac{e^{\gamma t}}{\omega} (\omega \cosh(\omega t) - \gamma \sinh(\omega t)), \quad \beta(t) = \frac{\omega_0^2 e^{\gamma t}}{\omega} \sinh \omega t \quad (3.30)$$

3.

$$\alpha(t) = e^{\gamma t} (1 - \gamma t), \quad \beta(t) = \gamma^2 t e^{\gamma t} \quad (3.31)$$

Mit der Methode der Separation der Variablen (siehe [Wa00]) lässt sich auch (3.26) sehr einfach lösen.

$$\hat{G}(t) = \hat{G}(0) e^{-\int_0^t D_{pp}|z|^2 + D_{qq}|y|^2 + 2D_{pq}z \cdot y ds} \quad (3.32)$$

Benutzt man (3.27) und (3.28), so lässt sich das Integral in der Exponentialfunktion von $\hat{G}(t)$ in der Form

$$\int_0^t D_{pp} |z|^2 + D_{qq} |y|^2 + 2D_{pq} z \cdot y ds = r_1(t) |k|^2 + r_2(t) |\eta|^2 + r_3(t) k \cdot \eta$$

schreiben.

Hierbei wurden

$$r_1(t) := \int_0^t D_{pp} \frac{\dot{\alpha}(s)^2}{\omega_0^4} + D_{qq} \alpha(s)^2 + 2D_{pq} \frac{\alpha(s) \dot{\alpha}(s)}{\omega_0^2} ds \quad (3.33)$$

$$r_2(t) := \int_0^t D_{pp} \frac{\dot{\beta}(s)^2}{\omega_0^4} + D_{qq} \beta(s)^2 + 2D_{pq} \frac{\beta(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^2} ds \quad (3.34)$$

$$r_3(t) := 2 \int_0^t D_{pp} \frac{\dot{\alpha}(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^4} + D_{qq} \alpha(s) \beta(s) + D_{pq} \left(\frac{\alpha(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^2} + \frac{\beta(s) \dot{\alpha}(s)}{\omega_0^2} \right) ds \quad (3.35)$$

gesetzt.

$$\hat{G}(t, k, \eta, x_0, \xi_0) = e^{-i(x_0 \cdot k + \xi_0 \cdot \eta)} e^{-(r_1(t)|k|^2 + r_2(t)|\eta|^2 + r_3(t)k \cdot \eta)}$$

ist unsere Lösung für (3.21) mit der Anfangsbedingung (3.22).

Inverse Fouriertransformation

Um eine Greensche Funktion für (3.19) mit der Anfangsbedingung (3.20) zu erhalten, müssen wir nur noch einen letzten Schritt, nämlich die inverse Fouriertransformation $y \rightarrow x, z \rightarrow \xi$ von $\hat{G}(t, k, \eta, x_0, \xi_0)$, vollziehen.

Mit Hilfe einer Variablentransformation $(y, z) \rightarrow (k, \eta)$ und zweimaligem Anwenden der Formel

$$\int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix \cdot y} e^{-a|y|^2} dy = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{1}{4a}|x|^2}, \quad a > 0 \quad (3.36)$$

erhält man die Greensche Funktion für (3.16)

$$\begin{aligned} & G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) \\ &= (2\pi)^{-2d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \hat{G}(t, k, \eta, x_0, \xi_0) e^{i(x \cdot y + \xi \cdot z)} dy dz \\ &= \left(\frac{e^{2\gamma t}}{2\pi}\right)^d \left(\frac{1}{4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2}\right)^{\frac{d}{2}} \\ & \quad e^{-\frac{r_1(t)|\xi_0 - \beta(t)x - \frac{\dot{\beta}(t)}{\omega_0^2}\xi|^2 + r_2(t)|x_0 - \alpha(t)x - \frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2}\xi|^2 - r_3(t)\left(\xi_0 - \beta(t)x - \frac{\dot{\beta}(t)}{\omega_0^2}\xi\right) \cdot \left(x_0 - \alpha(t)x - \frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2}\xi\right)}{4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2}} \end{aligned} \quad (3.37)$$

An dieser Stelle müssen wir noch zeigen, dass der Term $4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2 > 0$ ist. Dieses werden wir im folgenden Lemma erledigen. Desweiteren liefert uns das Lemma eine Aussage über die Positivität von $r_1(t)$ und $r_2(t)$.

Lemma 3.4

Sei $D_{pp} > 0$, $D_{qq} \geq 0$, $D_{pq} \geq 0$ und $D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2 \geq \frac{\gamma^2}{4}$. Dann gilt für alle $t > 0$:

$$r_1(t) > 0 \quad (3.38)$$

$$r_2(t) > 0 \quad (3.39)$$

$$4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2 > 0 \quad (3.40)$$

Beweis: Wir definieren für $s \geq 0$

$$a(s) := \begin{pmatrix} \alpha(s) \\ \frac{\dot{\alpha}(s)}{\omega_0^2} \end{pmatrix}, \quad b(s) := \begin{pmatrix} \beta(s) \\ \frac{\dot{\beta}(s)}{\omega_0^2} \end{pmatrix}, \quad A := \begin{pmatrix} D_{qq}\mathbb{I}_d & D_{pq}\mathbb{I}_d \\ D_{pq}\mathbb{I}_d & D_{pp}\mathbb{I}_d \end{pmatrix}$$

Hierbei ist \mathbb{I}_d die d -dimensionale Einheitsmatrix.

Mit dieser Schreibweise lassen sich $r_1(t)$, $r_2(t)$ und $r_3(t)$ umschreiben.

$$r_1(t) = \int_0^t a(s)^T A a(s) ds$$

$$\begin{aligned}
 r_2(t) &= \int_0^t b(s)^T Ab(s) ds \\
 r_3(t) &= 2 \int_0^t a(s)^T Ab(s) ds
 \end{aligned}$$

Es gilt, dass $a(s) \neq 0$.

Dies lässt sich leicht begründen.

Angenommen $a(s) \equiv 0$, dann wäre $\dot{\alpha}(s) \equiv 0$ und somit $\alpha(s) \equiv c \in \mathbb{R}$. Da $a(s) \equiv 0$, würde folgen, dass $\alpha(s) \equiv c = 0$. Dies ist aber ein Widerspruch zu den errechneten $\alpha(s)$. Also ist $a(s) \neq 0$.

Für $b(s)$ lässt sich in analoger Weise ebenfalls zeigen, dass $b(s) \neq 0$ ist.

1. $\gamma > 0$

Die Matrix A ist positiv definit und somit ist sowohl $a(s)^T Aa(s) \geq 0$ als auch $b(s)^T Ab(s) \geq 0$.

Weiterhin gilt, dass $a(s)^T Aa(s) \neq 0$ und $b(s)^T Ab(s) \neq 0$.

Somit gelten die Ungleichungen (3.38) und (3.39).

Da $A = A^T$ und $A \geq 0$, lässt sich A als Matrix-Operator in der Form $\sqrt{A}\sqrt{A}$ schreiben (siehe [RS80]).

Durch $\langle \sqrt{A}x, \sqrt{A}y \rangle_A := x^T Ay$, $x, y \in \mathbb{R}^{2d}$ wird ein Skalarprodukt auf dem \mathbb{R}^{2d} definiert.

Die Cauchy-Schwarz-Ungleichung für die Vektoren $a(s)$ und $b(s)$ lautet unter anderem nach Fischer [Fi00] dann

$$\begin{aligned}
 |a(s)^T Ab(s)| &= |\langle \sqrt{A}a(s), \sqrt{A}b(s) \rangle_A| \\
 &\leq \langle \sqrt{A}a(s), \sqrt{A}a(s) \rangle_A^{\frac{1}{2}} \langle \sqrt{A}b(s), \sqrt{A}b(s) \rangle_A^{\frac{1}{2}} \\
 &= \left(a(s)^T Aa(s) \right)^{\frac{1}{2}} \left(b(s)^T Ab(s) \right)^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned}$$

Die Integration über das Zeitintervall $[0, t]$ und die Ausnutzung der Hölderschen Ungleichung (siehe [El02]) liefern dann

$$\begin{aligned}
 \int_0^t a(s)^T Ab(s) ds &\leq \int_0^t \left(a(s)^T Aa(s) \right)^{\frac{1}{2}} \left(b(s)^T Ab(s) \right)^{\frac{1}{2}} ds \\
 &\leq \left(\int_0^t a(s)^T Aa(s) ds \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^t b(s)^T Ab(s) ds \right)^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned}$$

Mit dieser Ungleichung erhalten wir $4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2 \geq 0$.

In der Cauchy-Schwarz-Ungleichung gilt das Gleichheitszeichen, wenn $\sqrt{A}a(s) = c\sqrt{A}b(s)$ mit einem $c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Da die Determinante von A positiv ist, ist \sqrt{A} invertierbar. Also ist die Gleichheit in der Cauchy-Schwarz-Ungleichung nur für $a(s) = cb(s)$ gegeben.

Angenommen, dass für ein $c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ $a(s) = cb(s)$ gilt. Dann ist speziell $\alpha(s) = c\beta(s)$.

Wie man leicht sieht, ist $\beta(s) = -\dot{\alpha}(s)$. Also $\alpha(s) = -c\dot{\alpha}(s)$. Somit ergibt sich $\alpha(s) = c_0 e^{-\frac{1}{c}s}$ mit einem geeigneten $c_0 \in \mathbb{R}^d$.

Da die $\alpha(s)$ aus unseren 3 Fällen nicht diese Form haben, gibt es kein $c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, so dass $a(s)$ und $b(s)$ linear abhängig sind.

Ungleichung (3.40) ist somit verifiziert.

2. $\gamma = 0$

Im Fall $\gamma = 0$ befinden wir uns in unserem ersten Fall. $\alpha(t)$ und $\beta(t)$ sind dann in (3.29) definiert. Wir erhalten explizit:

$$\begin{aligned} r_1(t) &= \frac{D_{pp}}{\omega^2} \left(\frac{1}{2}t - \frac{1}{4\omega} \sin(2\omega t) \right) + D_{qq} \left(\frac{1}{2}t + \frac{1}{4\omega} \sin(2\omega t) \right) - \frac{D_{pq}}{\omega^2} \sin^2(\omega t) \\ r_2(t) &= D_{pp} \left(\frac{1}{2}t + \frac{1}{4\omega} \sin(2\omega t) \right) + \omega^2 D_{qq} \left(\frac{1}{2}t - \frac{1}{4\omega} \sin(2\omega t) \right) \\ &\quad + \frac{D_{pq}}{\omega^2} \sin^2(\omega t) \\ r_3(t) &= -\frac{D_{pp}}{\omega^2} \sin^2(\omega t) + D_{qq} \sin^2(\omega t) + \frac{D_{pq}}{\omega} \sin(2\omega t) \end{aligned}$$

Wie man leicht erkennt, ist $r_2(t) > 0$ für $t > 0$, da $D_{pp} > 0$.

Es ergibt sich mit Hilfe des Additionstheorems

$4 \sin^4(\omega t) + \sin^2(2\omega t) = 4 \sin^2(\omega t)$, dass

$$\begin{aligned} &4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2 \\ &= \left(\frac{D_{pp}^2}{\omega^4} + D_{qq}^2 \right) (\omega^2 t^2 - \sin^2(\omega t)) - \frac{4D_{pq}^2}{\omega^2} \sin^2(\omega t) \\ &\quad + \frac{2D_{pp}D_{qq}}{\omega^2} (\omega^2 t^2 + \sin^2(\omega t)) \\ &= \left(\frac{D_{pp}}{\omega^2} + D_{qq} \right)^2 (\omega^2 t^2 - \sin^2(\omega t)) + (D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2) \frac{4}{\omega^2} \sin^2(\omega t) \\ &> 0 \end{aligned}$$

Da $4r_1(t)r_2(t) > r_3(t)^2$ und $r_2(t) > 0$ ist, ist auch $r_1(t) > 0$.

□

An dieser Stelle möchten wir eine weitere Ungleichung beweisen, die eine leichte Folgerung aus dem Lemma 3.4 ist und im späteren Verlauf dieser Diplomarbeit noch benötigt wird.

Lemma 3.5

Sei $D_{pp} > 0$, $D_{qq} \geq 0$, $D_{pq} \geq 0$ und $D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2 \geq \frac{\gamma^2}{4}$. Dann gilt für alle $t > 0$ (im 1. Fall: $t > 0, t \neq \frac{k\pi}{\omega}, k \in \mathbb{N}$):

$$\frac{\dot{\beta}(t)^2}{\dot{\alpha}(t)^2} r_1(t) + r_2(t) - \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} r_3(t) > 0 \quad (3.41)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left(r_2(t) - \frac{\dot{\beta}(t)}{2\dot{\alpha}(t)} r_3(t) \right)^2 \\ &= r_2(t)^2 - \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} r_2(t) r_3(t) + \frac{\dot{\beta}(t)^2}{4\dot{\alpha}(t)^2} r_3^2(t) \\ &\stackrel{(3.40)}{<} r_2(t)^2 - \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} r_2(t) r_3(t) + \frac{\dot{\beta}(t)^2}{4\dot{\alpha}(t)^2} 4r_1(t) r_2(t) \\ &= r_2(t) \left(\frac{\dot{\beta}(t)^2}{\dot{\alpha}(t)^2} r_1(t) + r_2(t) - \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} r_3(t) \right) \end{aligned}$$

Da nach dem Lemma 3.6 gilt, dass $r_2(t) > 0$, folgt die Behauptung des Lemmas. \square

Zur übersichtlichen Darstellung der Formeln definieren wir einige Abkürzungen, die im weiteren Verlauf dieser Diplomarbeit genutzt werden.

$$\lambda(t) := 4r_1(t)r_2(t) - r_3(t)^2 \quad (3.42)$$

$$Q_1(x, \xi, t) := \beta(t)x + \frac{\dot{\beta}(t)}{\omega_0^2} \xi \quad (3.43)$$

$$Q_2(x, \xi, t) := \alpha(t)x + \frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2} \xi \quad (3.44)$$

Desweiteren werden wir die t -Abhängigkeit weglassen, sofern dies zu keinen Missverständnissen führt.

3.4 Die Lösung der linearen Wigner-Fokker-Planck-Gleichung

Für die Wigner-Funktion w erhalten wir mit (3.18) und (3.37) die Darstellung

$$w(x, \xi, t) = \left(\frac{e^{2\gamma t}}{2\pi} \right)^d \lambda^{-\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} w_0(x_0, \xi_0) e^{-\frac{r_1|Q_1(x, \xi) - \xi_0|^2 + r_2|Q_2(x, \xi) - x_0|^2 - r_3(Q_1(x, \xi) - \xi_0) \cdot (Q_2(x, \xi) - x_0)}{\lambda}} dx_0 d\xi_0 \quad (3.45)$$

Um w als milde Lösung unserer linearen Wigner-Fokker-Planck-Gleichung anzusehen, müssen wir noch zeigen, dass w in dieser Form aus dem Raum der stetigen Funktionen auf \mathbb{R}_0^+ mit Werten im $L^p(\mathbb{R}^{2d})$, $1 \leq p < \infty$ liegt, falls $w_0 \in L^p(\mathbb{R}^{2d})$.

Nach Sparber et al. [SCDM04] gilt der folgende Satz, der uns eine klassische Lösung liefert und Aussagen über die Positivität der Wigner-Funktion macht.

Satz 3.6

Sei $\gamma \geq 0$, $D_{pp} > 0$, $D_{qq} \geq 0$, $D_{pq} \geq 0$ und sei $D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2 \geq \frac{\gamma^2}{4}$.

Dann existiert zu jeder Anfangsbedingung $w_0 \in L^p(\mathbb{R}^{2d})$ mit $1 \leq p < \infty$ eine eindeutige klassische Lösung $w \in C(\mathbb{R}_0^+; L^p(\mathbb{R}^{2d})) \cap C^1(\mathbb{R}^+; C^\infty(\mathbb{R}^{2d}))$ mit

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} w(x, \xi, t) dx d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2d}} w_0(x, \xi) dx d\xi$$

Falls w_0 zusätzlich fast überall nicht-negativ ist, so ist für alle $t \in \mathbb{R}^+$ $w(t)$ ebenfalls fast überall nicht-negativ.

Bemerkung: Unsere Definitionen von $\alpha(t)$ und $\beta(t)$ unterscheiden sich von den Definitionen, die in [SCDM04] benutzt werden. Dies liegt daran, dass wir die Charakteristiken im Fourierraum berechnet haben und Sparber et al. die Charakteristikenmethode vor der Fouriertransformation angewendet haben. Es gilt jedoch mit dem X_{-t} aus [SCDM04]:

$$(Q_2(x, \xi, t), Q_1(x, \xi, t)) = (X_{-t}(x, \xi), \dot{X}_{-t}(x, \xi))$$

Außerdem unterscheidet sich die Wigner-Transformation in dieser Arbeit (vergleiche [LP93]) von der Wigner-Transformation aus [SCDM04].

Wir weisen deshalb extra darauf hin, dass sich in beiden Fällen die gleiche Greensche Funktion ergibt.

Kapitel 4

Dichte-Matrix-Funktion und Dichte-Matrix-Operator

Im letzten Kapitel haben wir eine Lösung für die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung gefunden. Da typischerweise die Wigner-Funktion in $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ liegt, ist die Partikeldichte, die durch $n(x, t) := \int_{\mathbb{R}^d} w(x, \xi, t) d\xi$ gegeben ist, auf dem Wigner-Niveau nicht unbedingt definiert (siehe [AS04], [ALMS04]). Daher betrachten wir den Operator $R(t)$. Denn es wird sich herausstellen, wenn R_0 ein Dichte-Matrix-Operator ist, so ist auch $R(t)$ ein Dichte-Matrix-Operator mit $Tr(R(t)) = \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) dx$. Also existiert die Partikeldichte $\rho(x, x, t)$ fast überall.

Zunächst werden wir jedoch den Operator $R(t)$ im Raum der selbstadjungierten Hilbert-Schmidt-Operatoren untersuchen und zeigen, dass Gleichung (3.1) eine Lösung aus $C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d)))$ besitzt, falls R_0 in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ liegt. Anschließend werden wir R_0 aus der Menge der Spurklasse-Operatoren wählen und untersuchen, in welchem Raum $R(t)$ sich dann befindet. Zum Schluß des Kapitels werden wir uns dann noch dem Energieraum \mathcal{E} widmen.

4.1 Rücktransformation der Wigner-Funktion

Um den Operator $R(t)$ zu bekommen, benötigen wir zunächst die zu $w(x, \xi, t)$ gehörige Funktion $\rho(x, y, t)$.

Mit Hilfe der inversen Wigner-Transformation

$$\rho(x, y, t) = \int_{\mathbb{R}^d} w\left(\frac{x+y}{2}, \xi, t\right) e^{i\xi \cdot (x-y)} d\xi$$

und der Formel (3.18) sowie der Wigner-Transformierten von der Anfangsbedingung ρ_0 , lässt sich $\rho(x, y, t)$ in Abhängigkeit von G und ρ_0 darstellen.

$$\begin{aligned}
 \rho(x, y, t) &= \int_{\mathbb{R}^d} \underbrace{w\left(\frac{x+y}{2}, \xi, t\right)}_{= \int_{\mathbb{R}^{2d}} G\left(t, \frac{x+y}{2}, \xi, x_0, \xi_0\right) w_0(x_0, y_0) dx_0 dy_0} e^{i\xi \cdot (x-y)} d\xi \\
 &= \int_{\mathbb{R}^{3d}} G\left(t, \frac{x+y}{2}, \xi, x_0, \xi_0\right) \frac{1}{(2\pi)^d} \\
 &\quad \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0\left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2}\right) e^{-i\xi_0 \cdot y_0} dy_0 dx_0 d\xi_0 e^{i\xi \cdot (x-y)} d\xi \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

Mit dem folgenden Lemma können wir eine Aussage über die $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ -Norm von $\rho(t)$ treffen.

Lemma 4.1

Sei $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Dann folgt für alle $t \geq 0$, dass $\rho(t) \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Beweis: Sei also $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Dann folgt mit (2.3), dass $\|\rho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = (2\pi)^d \|\rho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}$. Somit ist also auch die Wigner-Transformierte von ρ_0 in $L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Satz 3.6 liefert uns dann für alle Zeiten $t \geq 0$ ein $w(t) \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Ebenfalls mit (2.3) erhalten wir dann, dass $\rho(t)$ in $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ liegt.

□

Durch

$$(R(t)\psi)(x) := \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y, t) \psi(y) dy \quad (4.2)$$

für alle $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ definieren wir einen Operator auf $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$, wie uns das nächste Lemma zeigen wird.

Lemma 4.2

Sei $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Dann folgt für alle $t \geq 0$, dass $R(t) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Beweis: Die Linearität von $R(t)$ ist klar.

Nehmen wir ein beliebiges ψ aus $L^2(\mathbb{R}^d)$.

$$\begin{aligned}
 \|R(t)\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^d} \left| \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y, t) \psi(y) dy \right|^2 dx \\
 &\leq \int_{\mathbb{R}^d} \left(\left(\int_{\mathbb{R}^d} |\rho(x, y, t)|^2 dy \right)^{\frac{1}{2}} \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \right)^2 dx \\
 &= \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \|\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}^2
 \end{aligned}$$

Für ein festes $t_0 \geq 0$ gilt dann mit Lemma 4.1

$$\| R(t_0) \psi \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \underbrace{\| \rho(t_0) \|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}}_{=M<\infty} \| \psi \|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

Also ist $R(t_0) \psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ und $R(t_0)$ ist ein stetiger Operator auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Da t_0 beliebig gewählt war, folgt die Behauptung. □

An dieser Stelle möchten wir auch schon ein Lemma beweisen, das uns eine Aussage über die Selbstadjungiertheit von $R(t)$ liefert.

Lemma 4.3

Für $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ gelte, dass $\overline{\rho_0(x, y)} = \rho_0(y, x)$. Dann ist der durch (4.2) definierte Operator selbstadjungiert.

Beweis: Benutzen wir die Eigenschaft von $\rho_0(x, y)$, um die gleiche Eigenschaft für $\rho(x, y, t)$ zu zeigen.

$$\begin{aligned} & \overline{\rho(x, y, t)} \\ =_{(4.1)} & \overline{\int_{\mathbb{R}^{4d}} \frac{1}{(2\pi)^d} G\left(t, \frac{x+y}{2}, \xi, x_0, \xi_0\right) \rho_0\left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2}\right) e^{-i\xi_0 \cdot y_0} e^{i\xi \cdot (x-y)} dy_0 dx_0 d\xi_0 d\xi} \\ & = \int_{\mathbb{R}^{4d}} \frac{1}{(2\pi)^d} G\left(t, \frac{y+x}{2}, \xi, x_0, \xi_0\right) \rho_0\left(x_0 - \frac{y_0}{2}, x_0 + \frac{y_0}{2}\right) e^{i\xi_0 \cdot y_0} e^{i\xi \cdot (y-x)} dy_0 dx_0 d\xi_0 d\xi \\ & = \int_{\mathbb{R}^{4d}} \frac{1}{(2\pi)^d} G\left(t, \frac{y+x}{2}, \xi, x_0, \xi_0\right) \rho_0\left(x_0 + \frac{z}{2}, x_0 - \frac{z}{2}\right) e^{-i\xi_0 \cdot z} e^{i\xi \cdot (y-x)} dz dx_0 d\xi_0 d\xi \\ & = \rho(y, x, t) \end{aligned}$$

Damit ergibt sich dann für beliebige $\psi, \kappa \in L^2(\mathbb{R}^d)$:

$$\begin{aligned} \langle (R(t))^* \kappa, \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \langle \kappa, R(t) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \overline{\kappa}(x) \rho(x, y, t) \psi(y) dy dx \\ &= \overline{\int_{\mathbb{R}^{2d}} \overline{\psi}(y) \rho(y, x, t) \kappa(x) dx dy} \\ &= \langle \psi, R(t) \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &= \langle R(t) \kappa, \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \end{aligned}$$

□

Wir werden nun zwei Lemmata beweisen, mit denen wir $\rho(x, y, t)$ (und somit auch $R(t)$) in einer einfacheren Form darstellen können.

Lemma 4.4

Sei $t > 0$. Dann gilt die Formel:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} G\left(t, \frac{x+y}{2}, \xi, x_0, \xi_0\right) e^{-i\xi_0 \cdot y_0} d\xi_0 \\ &= \frac{e^{2d\gamma t}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{|Q_2(\frac{x+y}{2}, \xi) - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left(Q_1(\frac{x+y}{2}, \xi) - \frac{r_3}{2r_1} (Q_2(\frac{x+y}{2}, \xi) - x_0)\right)} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Beweis: Quadratische Ergänzung und Anwenden der Formel (3.36).

□

Lemma 4.5

Sei $t > 0$.

Falls $\gamma \geq \omega_0$ oder falls ($\gamma < \omega_0$ und $t \neq \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$), so gilt die Formel:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{|Q_2(\frac{x+y}{2}, \xi) - x_0|^2}{4r_1}} e^{-iy_0 \cdot \left(Q_1(\frac{x+y}{2}, \xi) - \frac{r_3}{2r_1} (Q_2(\frac{x+y}{2}, \xi) - x_0)\right)} e^{i\xi \cdot (x-y)} d\xi \\ &= \left(\frac{4\pi r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2}\right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left|\left(\frac{\dot{\beta}}{\omega_0^2} - \frac{r_3}{2r_1} \frac{\dot{\alpha}}{\omega_0^2}\right) y_0 - (x-y)\right|^2} \\ & \quad e^{-i\left(\left(\beta - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\dot{\alpha}}\right) y_0 \cdot \frac{x+y}{2} + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} x_0 \cdot y_0 + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x_0 \cdot (x-y)\right)} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Beweis: Variablentransformation und Anwenden der Formel (3.36).

□

Durch Anwendung dieser beiden Lemmata auf $\rho(x, y, t)$ lassen sich die Integrationen über ξ_0 und ξ ausführen.

Desweiteren führen wir zwei neue Abkürzungen ein, die im weiteren Verlauf für Übersichtlichkeit sorgen sollen.

$$\mu(t) := \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} - \frac{r_3(t)}{2r_1(t)} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \nu(t) &:= \beta(t) - \frac{\alpha(t) \dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} \\ &= -\frac{\omega_0^2 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(t)} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Führen wir also nun die beiden Integrationen aus.

$$\begin{aligned} & \rho(x, y, t) \\ &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-r_1 |\mu y_0 - \frac{\omega_0^2}{\alpha} (x-y)|^2} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) \\ & \quad e^{-i \left(\nu \frac{y_0 \cdot (x+y)}{2} + \frac{\beta}{\alpha} x_0 \cdot y_0 + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\alpha} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\alpha} x_0 \cdot (x-y) \right)} dx_0 dy_0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Mit der Variablentransformation $w := x_0 + \frac{y_0}{2}, z := x_0 - \frac{y_0}{2}$ erhalten wir eine äquivalente Darstellung, die wir hier angeben möchten, da sie im weiteren Verlauf ebenfalls gebraucht wird.

$$\begin{aligned} & \rho(x, y, t) \\ &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-r_1 |\mu(w-z) - \frac{\omega_0^2}{\alpha} (x-y)|^2} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |w-z|^2} \rho_0(w, z) \\ & \quad e^{-i \left(\nu \frac{(w-z) \cdot (x+y)}{2} + \frac{\beta}{\alpha} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\alpha} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\alpha} \frac{(w+z) \cdot (x-y)}{2} \right)} dw dz \end{aligned} \quad (4.8)$$

Bemerkung: Um den Fall $\gamma < \omega_0, t = \frac{k\pi}{\omega}, k \in \mathbb{N}$ nicht zu vergessen, sei angemerkt, dass nur in diesem Fall $\dot{\alpha} = 0$ ist. Damit die Notationen im weiteren Verlauf nicht durch weitere Fallunterscheidungen beeinträchtigt werden, wird, wenn wir die Formel (4.7) oder (4.8) benutzen, dieser Fall nicht berücksichtigt. Wir werden aber jedes Mal explizit darauf hinweisen und einige Berechnungen für diesen Fall im Anhang liefern.

4.2 Betrachtung des Operators $R(t)$ in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$

Durch $S(t)R_0 := R(t)$ definieren wir $S(t)$. Die Menge $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ wird im weiteren Verlauf die Rolle der konservativen quantendynamischen Halbgruppe aus Definition 3.1 übernehmen.

Zunächst betrachten wir diese Familie von Operatoren allerdings auf dem Raum der selbstadjungierten Hilbert-Schmidt-Operatoren. Wie wir sofort erkennen, ist $S(t)$ linear und $S(0)$ ist die Identität auf $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$, da $S(0)R_0 = R(0) = R_0$ gilt.

4.2.1 Positivität

Wir zeigen nun, dass für einen positiven Operator $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ $R(t)$ für alle $t > 0$ ebenfalls positiv ist. Diese Eigenschaft sichert uns die Positivitätserhaltung der Halbgruppe $\{S(t)\}_{t \geq 0}$.

Proposition 4.6

Sei R_0 ein positiver selbstadjungierter Hilbert-Schmidt-Operator. Dann ist für alle $t > 0$ $R(t)$ ebenfalls positiv.

Beweis: Wir zeigen dies für den Fall $\gamma = 0$ und wählen $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ beliebig.

$$\begin{aligned}
 & \langle \psi, R(t) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
 &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \bar{\psi}(x) \rho(x, y, t) \psi(y) dx dy \\
 &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{4d}} \bar{\psi}(x) e^{-r_1 |\mu(w-z) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}}(x-y)|^2} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |w-z|^2} \rho_0(w, z) \psi(y) \\
 & \quad e^{-i \left(\nu \frac{(w-z) \cdot (x+y)}{2} + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (x-y)}{2} \right)} dw dz dx dy
 \end{aligned}$$

Für $\gamma = 0$ gilt:

$$\begin{aligned}
 \nu &= -\frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} \\
 \dot{\beta} &= \omega_0^2 \alpha
 \end{aligned}$$

Damit ergibt sich dann:

$$\begin{aligned}
 & \langle \psi, R(t) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
 &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{4d}} \bar{\psi}(x) e^{i \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} w \cdot x - i \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} (x^2 + w^2)} e^{-r_1 |\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x|^2} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} w^2} \\
 & \quad e^{2r_1 \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x \right) \cdot \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y \right)} e^{\frac{\lambda}{2r_1} w \cdot z} \rho_0(w, z) \\
 & \quad \psi(y) e^{-i \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} z \cdot y + i \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} (y^2 + z^2)} e^{-r_1 |-\mu z + \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y|^2} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} z^2} dw dz dx dy
 \end{aligned}$$

Mit der Potenzreihendarstellung der Exponentialfunktion lassen sich $e^{\frac{\lambda}{4r_1} w \cdot z}$ und $e^{2r_1 \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x \right) \cdot \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y \right)}$ in folgender Form darstellen:

$$\begin{aligned}
 e^{\frac{\lambda}{2r_1} w \cdot z} &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\lambda}{2r_1} \right)^m}{m!} (w \cdot z)^m \\
 e^{2r_1 \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x \right) \cdot \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y \right)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2r_1)^n}{n!} \left(\left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x \right) \cdot \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y \right) \right)^n
 \end{aligned}$$

Betrachten wir den Fall $d = 3$, so gilt weiterhin:

$$(a \cdot b)^n = \sum_{k=0}^n \sum_{j=0}^k \binom{n}{k} \binom{k}{j} (a_1 b_1)^{n-k} (a_2 b_2)^{k-j} (a_3 b_3)^j$$

Hierbei ist mit $a_m, b_m, m \in \{1, 2, 3\}$ die m -te Komponente von $a \in \mathbb{R}^3$ beziehungsweise $b \in \mathbb{R}^3$ gemeint.

Somit ergibt sich

$$e^{\frac{\lambda}{2r_1} w \cdot z} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^m \sum_{s=0}^l \frac{\left(\frac{\lambda}{2r_1}\right)^m}{m!} \binom{m}{l} \binom{l}{s} (w_1 z_1)^{m-l} (w_2 z_2)^{l-s} (w_3 z_3)^s$$

und

$$\begin{aligned} & e^{2r_1 \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x\right) \cdot \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \sum_{j=0}^k \frac{(2r_1)^n}{n!} \binom{n}{k} \binom{k}{j} \left(\left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)_1 \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)_1 \right)^{n-k} \\ & \quad \left(\left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)_2 \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)_2 \right)^{k-j} \left(\left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)_3 \left(\mu z - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} y\right)_3 \right)^j \end{aligned}$$

Mit Satz 2.7 und Satz 2.14 lässt sich $\rho_0(w, z) = \sum_n \lambda_n \overline{\phi_n}(z) \phi_n(w)$ mit positiven λ_n schreiben. Wir können also ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass $\rho_0(w, z) = \overline{\phi}(z) \phi(w)$.

Zusätzlich führen wir die Abkürzung

$$\begin{aligned} a_{n,k,j,m,l,s}(x, w, t) &:= \phi(w) \overline{\psi}(x) e^{i \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} (w \cdot x - \alpha(x^2 + w^2))} e^{-r_1 |\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x|^2 - \frac{\lambda}{4r_1} w^2} w_1^{m-l} w_2^{l-s} w_3^s \\ & \quad \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x\right)_1^{n-k} \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x\right)_2^{k-j} \left(\mu w - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} x\right)_3^j \end{aligned}$$

ein.

$$\begin{aligned} & \langle \psi, R(t) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \sum_{j=0}^k \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^m \sum_{s=0}^l \frac{(2r_1)^n}{n!} \frac{\left(\frac{\lambda}{2r_1}\right)^m}{m!} \binom{n}{k} \binom{k}{j} \binom{m}{l} \binom{l}{s} \\ & \quad \int_{\mathbb{R}^{4d}} a_{n,k,j,m,l,s}(x, w) \overline{a_{n,k,j,m,l,s}}(y, z) dw dz dx dy \end{aligned}$$

Mit

$$b_{n,k,j,m,l,s}(t) := \int_{\mathbb{R}^{2d}} a_{n,k,j,m,l,s}(x, w) dw dx$$

wird der Term

$$\int_{\mathbb{R}^{4d}} a_{n,k,j,m,l,s}(x, w) \overline{a_{n,k,j,m,l,s}}(y, z) dw dz dx dy = b_{n,k,j,m,l,s}(t) \overline{b_{n,k,j,m,l,s}}(t) \geq 0$$

Da sowohl r_1 als auch $\frac{\lambda}{r_1}$ nach (3.38) und (3.40) positiv sind, gilt also:

$$\langle \psi, R(t) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \geq 0$$

Für alle anderen Fälle verweisen wir auf [AS04] und die darin enthaltenen Referenzen. \square

Bemerkung: Für den Fall $0 \leq \gamma < \omega_0$ mit $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ lässt sich die Behauptung der Proposition ebenfalls recht einfach zeigen. Wir geben daher den Beweis für diesen Fall in Anhang D.1 an.

4.2.2 Halbgruppeneigenschaft

$S(t)$ erfüllt die Halbgruppeneigenschaft $S(s+t) = S(s)S(t)$, wie uns die folgende Proposition zeigen wird.

Proposition 4.7

Für alle $t, s \geq 0$ gilt die folgende Halbgruppeneigenschaft für $S(t)$:

$$S(s+t) = S(s)S(t)$$

Beweis: Wir definieren die folgenden Abkürzungen:

$$\begin{aligned} p_1(s, t, x, y, x_0, y_0) &:= \nu(s) \frac{x+y}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(t)} \frac{x_0+y_0}{2} \\ p_2(s, t) &:= \frac{\dot{\beta}(s)}{\dot{\alpha}(s)} + \frac{\omega_0^2 \alpha(t)}{\dot{\alpha}(t)} \\ p_3(s, t, x, y, x_0, y_0) &:= -\frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(s)} (x-y) + \nu(t) (x_0-y_0) \\ p_4(s, t) &:= -r_1(s) \mu(s)^2 - \frac{\lambda(s)}{4r_1(s)} - \frac{\omega_0^4 r_1(t)}{\dot{\alpha}(t)^2} \\ p_5(s, t, x, y, x_0, y_0) &:= \frac{2\omega_0^2 r_1(s)}{\dot{\alpha}(s)} (x-y) + \frac{2\omega_0^2 r_1(t) \mu(t)}{\dot{\alpha}(t)} (x_0-y_0) \end{aligned}$$

Lösen wir zunächst $\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{p_4 b^2 + p_5 \cdot b} e^{-i(p_1 \cdot b + p_2 a \cdot b + p_3 \cdot a)} da db$.

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{p_4 b^2 + p_5 \cdot b} e^{-i(p_1 \cdot b + p_2 a \cdot b + p_3 \cdot a)} da db \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} e^{p_4 b^2 + p_5 \cdot b} e^{-ip_1 \cdot b} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ia \cdot (p_2 b + p_3)} da db \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= (2\pi)^d \int_{\mathbb{R}^d} e^{p_4 b^2 + p_5 \cdot b} e^{-ip_1 \cdot b} \delta(p_2 \cdot b + p_3) db \\
 &= (2\pi)^d \frac{1}{|p_2|^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{p_4 \left(\frac{z-p_3}{p_2}\right)^2 + p_5 \frac{z-p_3}{p_2}} e^{-i \frac{p_1}{p_2} (z-p_3)} \delta(z) dz \\
 &= (2\pi)^d \frac{1}{|p_2|^d} e^{\frac{p_4 p_3^2}{p_2^2} - \frac{p_5 p_3}{p_2}} e^{i \frac{p_1 p_3}{p_2}}
 \end{aligned}$$

Nun betrachten wir den Kern von $S(s) (S(t) R_0)$.

Wir nehmen die Variablentransformation $a := \frac{w+z}{2}$, $b := w - z$ und wenden obige Formel an:

$$\begin{aligned}
 &\left(\frac{e^{2\gamma s} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}(s)|} \right)^d \\
 &\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-r_1(s) |\mu(s)(w-z) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(s)}(x-y)|^2} e^{-\frac{\lambda(s)}{4r_1(s)} |w-z|^2} \\
 &e^{-i \left(\nu(s) \frac{(w-z) \cdot (x+y)}{2} + \frac{\dot{\beta}(s)}{\dot{\alpha}(s)} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha(s)}{\dot{\alpha}(s)} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(s)} \frac{(w+z) \cdot (x-y)}{2} \right)} \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}(t)|} \right)^d \\
 &\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-r_1(t) |\mu(t)(x_0-y_0) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(t)}(w-z)|^2} e^{-\frac{\lambda(t)}{4r_1(t)} |x_0-y_0|^2} \\
 &e^{-i \left(\nu(t) \frac{(x_0-y_0) \cdot (w+z)}{2} + \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} \frac{(x_0+y_0) \cdot (x_0-y_0)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha(t)}{\dot{\alpha}(t)} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(t)} \frac{(x_0+y_0) \cdot (w-z)}{2} \right)} \\
 &\rho_0(x_0, y_0) dx_0 dy_0 dw dz \\
 &= \left(\frac{e^{2\gamma(s+t)} \omega_0^4}{4\pi^2 |\dot{\alpha}(s)| |\dot{\alpha}(t)|} \right)^d \\
 &\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{r_1(s) \omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2} (x-y)^2 - \left(r_1(t) \mu(t)^2 + \frac{\lambda(t)}{4r_1(t)} \right) (x_0-y_0)^2} e^{-i \left(\frac{\omega_0^2 \alpha(s)}{\dot{\alpha}(s)} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} + \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} \frac{(x_0+y_0) \cdot (x_0-y_0)}{2} \right)} \\
 &\rho_0(x_0, y_0) \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{p_4 b^2 + p_5 \cdot b} e^{-i(p_1 \cdot b + p_2 a \cdot b + p_3 \cdot a)} da db dx_0 dy_0 \\
 &= \left(\frac{e^{2\gamma(s+t)} \omega_0^4}{2\pi |\dot{\alpha}(s)| |\dot{\alpha}(t)| |p_2(s, t)|} \right)^d \\
 &\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{r_1(s) \omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2} (x-y)^2 - \left(r_1(t) \mu(t)^2 + \frac{\lambda(t)}{4r_1(t)} \right) (x_0-y_0)^2} e^{-i \left(\frac{\omega_0^2 \alpha(s)}{\dot{\alpha}(s)} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} + \frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} \frac{(x_0+y_0) \cdot (x_0-y_0)}{2} \right)} \\
 &\rho_0(x_0, y_0) e^{\frac{p_4 p_3^2}{p_2^2} - \frac{p_5 p_3}{p_2}} e^{i \frac{p_1 p_3}{p_2}} dx_0 dy_0
 \end{aligned}$$

Der Kern von $S(s+t) R_0$ lautet andererseits:

$$\begin{aligned}
 &\left(\frac{e^{2\gamma(s+t)} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}(s+t)|} \right)^d \\
 &\int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-r_1(s+t) |\mu(s+t)(x_0-y_0) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(s+t)}(x-y)|^2} e^{-\frac{\lambda(s+t)}{4r_1(s+t)} |x_0-y_0|^2} \rho_0(x_0, y_0)
 \end{aligned}$$

$$e^{-i\left(\nu(s+t)\frac{(x_0-y_0)\cdot(x+y)}{2} + \frac{\beta(s+t)}{\alpha(s+t)}\frac{(x_0+y_0)\cdot(x_0-y_0)}{2} + \frac{\omega_0^2\alpha(s+t)}{\alpha(s+t)}\frac{(x+y)\cdot(x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\alpha(s+t)}\frac{(x_0+y_0)\cdot(x-y)}{2}\right)} dx_0 dy_0$$

Wir vergleichen jetzt die einzelnen Terme dieser beiden Kerne und können so auf die Behauptung schließen. □

Bemerkung: Eine ausführliche Rechnung für den 3. Fall (siehe (3.31)) befindet sich im Anhang B.

Bemerkung: Wir haben den Fall $\gamma < \omega_0$, $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ an dieser Stelle nicht betrachtet. Es lässt sich aber zeigen, dass auch in diesem Fall die Halbgruppeneigenschaft aus dem Satz erfüllt ist.

4.2.3 Zeitstetigkeit bezüglich der $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm

Zunächst zeigen wir, dass der Kern von $R(t)$ stetig in der Zeit ist.

Lemma 4.8

Für $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ ist $\rho(t)$ stetig in t auf \mathbb{R}_0^+ bezüglich $\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}$.

Beweis: Da $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$, folgt, dass $w_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Mit dem Satz 3.6 erhalten wir die Aussage, dass $w \in C(\mathbb{R}_0^+; L^2(\mathbb{R}^{2d}))$.

Sei $\varepsilon > 0$ gewählt.

Für alle $t \geq 0$ folgt dann

$$\begin{aligned} & \|\rho(t+\varepsilon) - \rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_{x,y}^{2d})}^2 \\ &= \left\| \int_{\mathbb{R}^d} w\left(\frac{x+y}{2}, \xi, t+\varepsilon\right) e^{i\xi\cdot(x-y)} d\xi - \int_{\mathbb{R}^d} w\left(\frac{x+y}{2}, \xi, t\right) e^{i\xi\cdot(x-y)} d\xi \right\|_{L^2(\mathbb{R}_{x,y}^{2d})}^2 \end{aligned}$$

Mit der Transformation $v := \frac{x+y}{2}$, $z := y-x$ folgt dann:

$$\begin{aligned} \|\rho(t+\varepsilon) - \rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_{x,y}^{2d})}^2 &= \|\mathcal{F}_{\xi \rightarrow z}(w)(t+\varepsilon) - \mathcal{F}_{\xi \rightarrow z}(w)(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_{v,z}^{2d})}^2 \\ &= (2\pi)^{2d} \|w(t+\varepsilon) - w(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_{x,\xi}^{2d})}^2 \\ &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \end{aligned}$$

□

Hieraus erhalten wir nun die Zeitstetigkeit für den Operator $R(t)$ in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Proposition 4.9

Sei $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$. Dann ist $R(t)$ stetig in t (für alle $t \geq 0$) bezüglich $\|\cdot\|_2$.

Beweis: Für $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ wissen wir, dass das zugehörige $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ ist.

Nach Lemma 4.1 ist $\rho(t) \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ und $R(t)$ in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ (siehe Satz 2.14 und Formel (4.2) sowie Lemma 4.3).

Lemma 4.8 liefert uns, dass $\rho(t)$ stetig in t auf \mathbb{R}_0^+ bezüglich $\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}$.

Wählen wir ein $t_0 \geq 0$.

Mit Satz 2.14 folgt dann:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|R(t_0 + \varepsilon) - R(t_0)\|_2 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\rho(t_0 + \varepsilon) - \rho(t_0)\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Also ist $R(t)$ stetig in t_0 bezüglich der $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm.

Da t_0 beliebig gewählt war, ist somit $R(t) \in C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d)))$.

□

4.2.4 Zusammenfassung einiger Eigenschaften in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$

An dieser Stelle möchten wir einige Eigenschaften des Operators $R(t)$ zusammenfassen. Es hat sich nämlich gezeigt, dass unser Operator $R(t)$ ein selbstadjungierter Hilbert-Schmidt-Operator ist, falls denn unsere Anfangsbedingung R_0 ein selbstadjungierter Hilbert-Schmidt-Operator ist.

Außerdem ist unser Operator $R(t)$ stetig in t mit Werten in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$, falls $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist.

Im nächsten Satz zeigen wir weiterhin, dass $R(t)$ für alle Zeiten $t \geq 0$ existiert.

Falls zusätzlich R_0 positiv ist, so hat $R(t)$ ebenfalls diese Eigenschaft.

Diese Tatsachen fassen wir nun im folgenden Satz zusammen.

Satz 4.10

Sei $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$. Dann ist $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine stark stetige Halbgruppe von linearen Operatoren auf $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$. Weiterhin gilt, dass $\|R(t)\|_2 \leq \|R_0\|_2$.

Falls R_0 zusätzlich positiv ist, so ist auch $R(t)$ für alle Zeiten positiv.

Beweis:

Sei also $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Da R_0 selbstadjungiert ist, hat der Kern ρ_0 die Eigenschaft $\overline{\rho_0(x, y)} = \rho_0(y, x)$. Nach Lemma 4.3 ist dann der Operator $R(t)$ ebenfalls selbstadjungiert.

Proposition 4.9 liefert uns, dass $R(t) \in C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d)))$.

Zusammen mit der Halbgruppeneigenschaft aus Proposition 4.7 wissen wir also, dass $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine stark stetige Halbgruppe auf $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist.

Betrachten wir nun die $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm von $R(t)$. Wir benutzen hierbei je zweimal die Formel (2.3) und die Aussage des Satzes 2.14.

$$\|R(t)\|_2 = \|\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}$$

$$\begin{aligned}
 &= (2\pi)^d \|w(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \\
 &\leq (2\pi)^d \|w_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \\
 &= \|\rho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \\
 &= \|R_0\|_2
 \end{aligned}$$

Die Ungleichung $\|w(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \leq \|w_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}$ haben wir hierbei aus dem Beweis von Korollar 3.1 aus [SCDM04] entnommen.

Sei nun zusätzlich R_0 positiv. Dann folgt die Positivität von $R(t)$ mit Proposition 4.6.

□

4.3 Betrachtung des Operators $R(t)$ in $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$

4.3.1 Spurklasse-Norm-Erhaltung

Wir zeigen in diesem Abschnitt, dass für einen positiven selbstadjungierten Spurklasse-Operator R_0 und für alle $t \geq 0$ der Operator $R(t)$ ebenfalls ein positiver, selbstadjungierter Spurklasse-Operator ist, der folgende Gleichung erfüllt

$$\begin{aligned}
 \|R(t)\|_1 &= \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) dx \\
 &= \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx \\
 &= \|R_0\|_1
 \end{aligned}$$

Hierzu benötigen wir die Stetigkeit von $\rho(x, y, t)$ in (x, y) . Um diese zu zeigen, brauchen wir zunächst das folgende Lemma.

Lemma 4.11

Für die Greensche Funktion (3.37) gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^d} G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) d\xi \in L^2(\mathbb{R}_{x_0, \xi_0}^{2d})$$

Beweis: Für den Beweis benötigen wir die Formel

$$\forall_{a, b \in \mathbb{R}^d} \forall_{c \in (0, \infty)} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-c|a|^2 + a \cdot b} da = \left(\frac{\pi}{c}\right)^{\frac{d}{2}} e^{\frac{|b|^2}{4c}} \quad (4.9)$$

Durch Zuhilfenahme von (4.9) lässt sich nun $G(t, x, \xi, x_0, \xi_0)$ über ξ integrieren.

$$\int_{\mathbb{R}^d} G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) d\xi$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(\frac{e^{2\gamma t}}{2\pi} \right)^d \lambda^{-\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{r_1 |\beta x + \frac{\dot{\beta}}{\omega_0^2} \xi - \xi_0|^2 + r_2 |\alpha x + \frac{\dot{\alpha}}{\omega_0^2} \xi - x_0|^2 - r_3 \left(\beta x + \frac{\dot{\beta}}{\omega_0^2} \xi - \xi_0 \right) \cdot \left(\alpha x + \frac{\dot{\alpha}}{\omega_0^2} \xi - x_0 \right)}{\lambda} d\xi \\
 &= \left(\frac{e^{2\gamma t}}{2\pi} \right)^d \lambda^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{r_1 |\beta x - \xi_0|^2 + r_2 |\alpha x - x_0|^2 - r_3 (\beta x - \xi_0) \cdot (\alpha x - x_0)}{\lambda}} \\
 &\quad \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{\left(\frac{\dot{\beta}^2}{\omega_0^4} r_1 + \frac{\dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} r_2 - \frac{\dot{\alpha} \dot{\beta}}{\omega_0^4} r_3 \right) |\xi|^2 + \left(2r_1 \frac{\dot{\beta}}{\omega_0^2} (\beta x - \xi_0) + 2r_2 \frac{\dot{\alpha}}{\omega_0^2} (\alpha x - x_0) - r_3 \left(\frac{\dot{\beta}}{\omega_0^2} (\alpha x - x_0) + \frac{\dot{\alpha}}{\omega_0^2} (\beta x - \xi_0) \right) \right) \cdot \xi}{\lambda}} d\xi \\
 &= \left(\frac{e^{2\gamma t}}{2\pi} \right)^d \lambda^{-\frac{d}{2}} \left(\frac{\pi \lambda \omega_0^4}{\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha} \dot{\beta} r_3} \right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{r_1 |\beta x - \xi_0|^2 + r_2 |\alpha x - x_0|^2 - r_3 (\beta x - \xi_0) \cdot (\alpha x - x_0)}{\lambda}} \\
 &\quad e^{\frac{|2r_1 \dot{\beta} (\beta x - \xi_0) + 2r_2 \dot{\alpha} (\alpha x - x_0) - r_3 (\dot{\beta} (\alpha x - x_0) + \dot{\alpha} (\beta x - \xi_0))|^2}{4\lambda (\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha} \dot{\beta} r_3)}}
 \end{aligned}$$

Es bleibt zu zeigen, dass $4\lambda \left(\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha} \dot{\beta} r_3 \right) > 0$ ist.

Für den Fall $\gamma < \omega_0$, $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ ist $\dot{\alpha} = 0$ und $\dot{\beta} \neq 0$.

Da nach Lemma 3.4 $\lambda > 0$ und $r_1 > 0$, ist also auch $4\lambda \dot{\beta}^2 r_1 > 0$.

In allen anderen Fällen betrachten wir die Ungleichungen (3.40) und (3.41).

Es gilt:

$$\begin{aligned}
 \dot{\alpha}^2 (4r_1 r_2 - r_3^2) > 0 &\Leftrightarrow 4\dot{\beta}^2 r_1^2 + 4\dot{\alpha}^2 r_1 r_2 - 4\dot{\alpha} \dot{\beta} r_1 r_3 > 4\dot{\beta}^2 r_1^2 - 4\dot{\beta} \dot{\alpha} r_1 r_3 + \dot{\alpha}^2 r_3^2 \\
 &\Leftrightarrow 0 > -\frac{r_1}{\lambda} + \frac{4\dot{\beta}^2 r_1^2 - 4\dot{\beta} \dot{\alpha} r_1 r_3 + \dot{\alpha}^2 r_3^2}{4\lambda (\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha} \dot{\beta} r_3)}
 \end{aligned}$$

Somit ist der ξ_0^2 -Term in der Exponentialfunktion von $\left| \int_{\mathbb{R}^d} G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) d\xi \right|^2$ negativ und es folgt mit der Formel (4.9), dass $\left| \int_{\mathbb{R}^d} G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) d\xi \right|^2$ über ξ_0 integrierbar ist.

Nochmaliges Anwenden von (4.9) für x_0 auf das Ergebnis der ξ_0 -Integration liefert dann die Behauptung aus dem Lemma. □

Nun können wir uns mit der Stetigkeit von $\rho(x, y, t)$ in (x, y) befassen und kommen zu folgendem Lemma.

Lemma 4.12

Sei $\rho_0 \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$. Dann ist für alle $t > 0$ $\rho(t) \in C(\mathbb{R}^{2d})$.

Beweis: Zu unserem ρ_0 erhalten wir mit Hilfe der Wigner-Transformation ein w_0 und dann mit dem Satz 3.6 die Lösung $w(t)$.

Zunächst zeigen wir, dass $w(t) \in C(\mathbb{R}_x^d; L^1(\mathbb{R}_\xi^d))$.

Sei $x_n \in \mathbb{R}^d$ für alle $n \in \mathbb{N}$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = 0$, dann gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^d} |w(x + x_n, \xi, t) - w(x, \xi, t)| d\xi$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{\mathbb{R}^d} \left| \int_{\mathbb{R}^{2d}} (G(t, x + x_n, \xi, x_0, \xi_0) - G(t, x, \xi, x_0, \xi_0)) w_0(x_0, \xi_0) dx_0 d\xi_0 \right| d\xi \\
 &\leq \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} |G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) - G(t, x + x_n, \xi, x_0, \xi_0)| |w_0(x_0, \xi_0)| dx_0 d\xi_0 d\xi \\
 &\leq \|w_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \left\| \int_{\mathbb{R}^d} |G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) - G(t, x + x_n, \xi, x_0, \xi_0)| d\xi \right\|_{L^2(\mathbb{R}_{x_0, \xi_0}^{2d})}
 \end{aligned}$$

Hierbei wurde beim letzten Schritt, die Höldersche Ungleichung (siehe [El02]) verwendet.

Nach Lemma 2.18 und der Voraussetzung des Lemmas gilt:

$$\|w_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = (2\pi)^{-2d} \|\rho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} < \infty$$

Mit Hilfe des Lemmas 4.11 und der Stetigkeit von $G(t, x, \xi, x_0, \xi_0)$ in x , wissen wir, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| \int_{\mathbb{R}^d} |G(t, x, \xi, x_0, \xi_0) - G(t, x + x_n, \xi, x_0, \xi_0)| d\xi \right\|_{L^2(\mathbb{R}_{x_0, \xi_0})} = 0$$

Somit können wir folgern, dass $w(t)$ in $C(\mathbb{R}_x^d; L^1(\mathbb{R}_\xi^d))$ liegt.

Daraus schließen wir, dass die Fouriertransformierte $\mathcal{F}_{\xi \rightarrow \eta} w(x, \eta, t)$ von $w(x, \xi, t)$ eine Funktion aus $C(\mathbb{R}_x^d; C_0(\mathbb{R}_\eta^d))$ ist.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_{\xi \rightarrow \eta} w(x, \eta, t) &= \int_{\mathbb{R}^d} w(x, \xi, t) e^{-i\xi\eta} d\xi \\
 &= \rho\left(x - \frac{\eta}{2}, x + \frac{\eta}{2}, t\right)
 \end{aligned}$$

Somit ist also auch $\rho(t)$ in beiden Variablen stetig.

□

Proposition 4.13

Sei $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ positiv. Dann gilt für alle $t \geq 0$:

$R(t) \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$, $R(t)$ ist positiv und

$$\|R(t)\|_1 = \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx = \|R_0\|_1$$

Beweis: Die Positivität und die Selbstadjungiertheit von $R(t)$ folgt aus dem Satz 4.10, da mit $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ R_0 auch in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Fixieren wir ein $t_0 \geq 0$.

Aus $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ folgt, dass $R_0 \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$. Somit erhalten wir ein $R(t_0) \in \mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ bzw. das dazugehörige $\rho(t_0) \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Nach Lemma 4.12 wissen wir, dass, $\rho(x, y, t_0)$ stetig in x und y ist und nach Proposition 4.6 erhalten wir:

$$\forall_{\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \overline{\psi}(x) \rho(x, y, t_0) \psi(y) dx dy \geq 0$$

Da R_0 in $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ liegt, lässt sich nach Satz 2.7 und Satz 2.14 $\rho_0(x, y)$ in der Form $\rho_0(x, y) = \sum_n \lambda_n \phi_n(x) \overline{\phi_n}(y)$ schreiben. Mit der Formel (4.8) gilt dann, dass

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t_0) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{e^{2\gamma t_0} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})|w-z|^2} e^{-i(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2})} \rho_0(w, z) dw dz dx \\ &= \left(\frac{e^{2\gamma t_0} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})|w-z|^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}} \left(\sum_n \lambda_n \phi_n(w) \overline{\phi_n}(z) \right) \\ & \quad \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\nu(w-z) \cdot x} dx}_{\left(\frac{2\pi}{|\nu|}\right)^d \delta(w-z)} dw dz \\ &= \left(\frac{e^{2\gamma t_0} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \left(\frac{2\pi}{|\nu|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})|w-z|^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}} \left(\sum_n \lambda_n \phi_n(w) \overline{\phi_n}(z) \right) \\ & \quad \delta(w-z) dw dz \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\sum_n \lambda_n \phi_n(z) \overline{\phi_n}(z) \right) dz \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(z, z) dz \\ &< \infty \end{aligned}$$

Theorem 2.12 aus [Si05] liefert uns dann einen eindeutigen Operator A_{t_0} in $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ mit $\|A_{t_0}\|_1 = \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t_0) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx = \|R_0\|_1$.

Aufgrund der Tatsache, dass $\rho(t_0)$ der Kern von $R(t_0)$ ist und A_{t_0} eindeutig ist, stimmen A_{t_0} und $R(t_0)$ auf $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ überein.

Da $t_0 \geq 0$ beliebig gewählt wurde, erhalten wir die Aussage der Proposition. □

Bemerkung: Bei der Berechnung von $\int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t)$ haben wir die Formel (4.8) benutzt. Eine Rechnung für den Fall $\gamma < \omega_0$, $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ wird im Anhang D.2 gegeben.

4.3.2 Zeitstetigkeit bezüglich der $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm

Wir zitieren an dieser Stelle das Theorem 2.20 aus [Si05] mit $p = 1$.

Satz 4.14

Für die Operatoren A_n und A seien die Voraussetzungen

$$\begin{aligned} A_n &\rightarrow A \\ |A_n| &\rightarrow |A| \\ |A_n^*| &\rightarrow |A^*| \\ \|A_n\|_1 &\rightarrow \|A\|_1 \end{aligned}$$

erfüllt.

Dann gilt:

$$\|A_n - A\|_1 \rightarrow 0$$

Mit Hilfe dieses Satzes lässt sich nun die folgende Aussage über die Stetigkeit von $R(t)$ in t bezüglich $\|\cdot\|_1$ leicht beweisen.

Proposition 4.15

Sei $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ positiv. Dann gilt: $R(t)$ ist stetig in t für alle $t \geq 0$ bezüglich $\|\cdot\|_1$.

Beweis: Sei $t_0 \geq 0$ fest. Zu t_0 wählen wir eine beliebige Folge $(t_n)_{n=1,2,\dots}$ in \mathbb{R} mit $\lim_{n \rightarrow \infty} t_n = 0$ und $t_0 + t_n \geq 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$.

Wir setzen dann $A_n := R(t_0 + t_n)$ und $A := R(t_0)$.

Da sowohl $R(t_0 + t_n)$ als auch $R(t_0)$ selbstadjungiert und positiv sind (siehe Satz 4.10), gilt:

$$A_n = A_n^* = |A_n|, \quad A = A^* = |A|$$

Da die zu $R(\cdot)$ gehörigen $\rho(\cdot)$ in $C(\mathbb{R}_0^+; L^2(\mathbb{R}^{2d}))$ liegen, folgt für alle $\psi, \kappa \in L^2(\mathbb{R}^d)$

$$\begin{aligned} \langle \psi, A_n \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \int_{\mathbb{R}^d} \bar{\psi}(x) \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y, t_0 + t_n) \kappa(y) dy dx \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^d} \bar{\psi}(x) \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y, t_0) \kappa(y) dy dx \\ &= \langle \psi, A \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \end{aligned}$$

Weiterhin gilt nach Proposition 4.13:

$$\|A_n\|_1 = \|R_0\|_1 = \|A\|_1$$

Somit folgt mit dem Satz 4.14, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|A_n - A\|_1 = 0$$

□

4.3.3 Zusammenfassung einiger Eigenschaften in $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$

Mit den bisher gezeigten Eigenschaften können wir nun schließen, dass für einen selbstadjungierten Spurklasse-Operator R_0 der in (4.2) erzeugte Operator $R(t)$ ebenfalls ein selbstadjungierter Spurklasse-Operator ist, der auf \mathbb{R}_0^+ stetig in t bezüglich der $\|\cdot\|_1$ -Norm ist.

Weiterhin können wir aussagen, dass $\{S(t)\}_{t \geq 0}$, generiert durch den Evolutionsoperator \mathcal{L} (siehe (3.1)), eine eindeutige konservative quantendynamische Halbgruppe ist. Diese Halbgruppe ergibt die eindeutige Lösung unserer Gleichung (3.1).

Satz 4.16

Sei R_0 ein selbstadjungierter Spurklasse-Operator und es gelten die Bedingungen (3.6)-(3.10).

Dann ist $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine konservative quantendynamische Halbgruppe auf $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ und $R(t)$ ist die eindeutige Lösung der Gleichung (3.1) mit der Anfangsbedingung R_0 im Raum $C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d)))$.

Beweis: Zunächst stellen wir fest, dass sich ein selbstadjungierter Spurklasse-Operator A in einen Positivteil und einen Negativteil teilen lässt.

$$A = A^+ - A^-$$

Wir können A^\pm so wählen, dass A^\pm selbstadjungiert sind, $A^\pm \geq 0$ und $Tr(|A|) = Tr(|A^+|) + Tr(|A^-|)$ (siehe [RS80]).

Aufgrund der Erhaltung der Positivität (siehe Proposition 4.6) und der Aussage von Proposition 4.13 können wir also ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass $R_0 \geq 0$ und $R(t) \geq 0$.

Aufgrund der Selbstadjungiertheit von $R(t)$ (siehe Proposition 4.13), der Halbgruppeneigenschaft (siehe Proposition 4.7) und der Stetigkeit von $R(t)$ in t bezüglich der $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm, können wir schließen, dass die Menge $\{S(t)\}_{t \geq 0}$, definiert durch $S(t)R_0 := R(t)$, eine stark stetige Halbgruppe auf $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist.

Da $R_0 \geq 0$ ist, ist nach Proposition 4.6 auch $R(t)$ positiv.

Weiterhin gilt nach Proposition 4.13 und der Positivität von R_0 und $R(t)$:

$$Tr(R(t)) = \|R(t)\|_1 = \|R_0\|_1 = Tr(R_0)$$

Also ist $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine konservative quantendynamische Halbgruppe auf $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Die Existenz von $R(t)$ in $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ für alle Zeiten $t \geq 0$ wird uns durch $Tr(R(t)) = Tr(R_0)$ gegeben.

Somit ist $R(t)$ eine Lösung der Gleichung (3.1) in $C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d)))$.

Angenommen, wir hätten zwei globale Lösungen $R_1(t)$ und $R_2(t)$ zu der Anfangsbedingung R_0 .

Wir betrachten dann die Differenz $P(t) = R_1(t) - R_2(t)$. Die Anfangsbedingung dieser Differenz wäre 0. Somit wäre der Kern von $P(t)$ fast überall 0. Also ist der Kern von $R_1(t)$ fast überall gleich dem Kern von $R_2(t)$. Wir erhalten somit $R_1(t) = R_2(t)$.

Unsere Lösung ist also eindeutig.

□

4.4 Betrachtung des Operators $R(t)$ im Energie- raum \mathcal{E}

Die kinetische Energie eines Quantensystems lässt sich für den Dichte-Matrix-Operator A in folgender Art darstellen:

$$E_{kin}(A) := -\frac{1}{2}Tr(\Delta_x A) = \frac{1}{2}Tr(|\nabla| A |\nabla|) \geq 0$$

Hierbei ist $|\nabla| := \sqrt{-\Delta}$ ein Pseudo-Differential-Operator mit dem Symbol $|\eta|$. Dieser ist für $\psi \in H^1(\mathbb{R}^d)$ definiert durch $(|\nabla|\psi)(x) = \mathcal{F}_{\eta \rightarrow x}^{-1}(|\eta|(\mathcal{F}_{x \rightarrow \eta}\psi)(\eta))$ ([Ar06]).

Die potentielle Energie ist durch den Ausdruck

$$E_{pot}(A) := \frac{1}{2}Tr(|x| A |x|) \geq 0$$

gegeben.

Wir definieren den Energieraum (siehe [AS04])

$$\mathcal{E} := \{A \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d)) \mid \sqrt{1 - \Delta + |x|^2} A \sqrt{1 - \Delta + |x|^2} \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))\}$$

Zur Abkürzung des Pseudo-Differentialoperators $\sqrt{1 - \Delta + |x|^2}$ verwenden wir das Symbol Υ .

Führen wir zusätzlich die Energie-Norm

$$\|A\|_{\mathcal{E}} := \|\sqrt{1 - \Delta + |x|^2} A \sqrt{1 - \Delta + |x|^2}\|_1$$

für ein A aus \mathcal{E} ein, so wird \mathcal{E} mit dieser Norm zu einem Banachraum.

Wir können $A \in \mathcal{E}$ in einen “Positivteil” und einen “Negativteil” splitten.

$$A = A^1 - A^2 \tag{4.10}$$

Hierbei sind die Operatoren A^1 und A^2 definiert durch

$$A^{1,2} := \Upsilon^{-1}(\Upsilon A \Upsilon)^{\pm} \Upsilon^{-1}$$

und $(\Upsilon A \Upsilon)^\pm$ sind der Positivteil beziehungsweise Negativteil von $\Upsilon A \Upsilon \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ (siehe [RS80]).
 Es gilt (siehe [AS04]):

$$A^{1,2} \in \mathcal{E}, \quad A^{1,2} \geq 0, \quad \|A\|_{\mathcal{E}} = \|A^1\|_{\mathcal{E}} + \|A^2\|_{\mathcal{E}}$$

Für positive Operatoren $A \in \mathcal{E}$ gilt weiterhin:

$$\|A\|_{\mathcal{E}} = \|A\|_1 + \|\nabla |A| \nabla\|_1 + \|\nabla |x| A |x| \nabla\|_1 = \text{Tr}(A) + 2E_{kin}(A) + 2E_{pot}(A)$$

4.4.1 Energieraum-Erhaltung

Im folgenden Lemma werden wir eine Aussage treffen, unter welchen Voraussetzungen an unsere Anfangsbedingung R_0 $R(t)$ im Energieraum \mathcal{E} liegt.

Es gilt nämlich, dass, wenn unsere Anfangsbedingung R_0 ein selbstadjungierter Spurklasse-Operator ist, der im Energieraum \mathcal{E} liegt, so ist auch $R(t)$ ein Operator aus dem Energieraum \mathcal{E} .

Proposition 4.17

Sei $R_0 \in \mathcal{E}$. Dann ist $R(t)$ ein Operator aus \mathcal{E} .

Beweis: Aufgrund der Splittung (4.10) und der Positivitätserhaltung der quantendynamischen Halbgruppe $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ (siehe Satz 4.16) können wir uns ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf den Fall $R_0 \geq 0$ und somit $R(t) \geq 0$ beschränken.

1. Teil:

Da $R_0 \in \mathcal{E}$, ist $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Nach Proposition 4.13 gilt dann, dass $R(t) \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ mit $\|R(t)\|_1 = \|R_0\|_1 < \infty$.

2. Teil:

In diesem Teil des Beweises zeigen wir, dass $\text{Tr}(|\nabla |R(t)| \nabla|) < \infty$.

Da für alle $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ gilt, dass

$$\begin{aligned} (|\nabla |R(t)| \nabla|) \psi(y) &= -(\nabla R(t) \nabla) \psi(y) \\ &= -\nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y, t) \nabla_y \psi(y) dy \\ &= \nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}^d} (\nabla_y \rho(x, y, t)) \psi(y) dy, \end{aligned}$$

erhalten wir für die Spur von $|\nabla |R(t)| \nabla|$ das folgende Integral

$$\text{Tr}(|\nabla |R(t)| \nabla|) = \int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$$

Benutzen wir die Darstellung (4.8) für $\rho(x, y, t)$, so erhalten wir

$$[\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) |(w-z)|^2} e^{-i\left(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}\right)} \rho_0(w, z) \\
 &\quad 2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} dw dz \\
 &- \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) |(w-z)|^2} e^{-i\left(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}\right)} \rho_0(w, z) \\
 &\quad \left(\left(\frac{4r_1^2 \omega_0^4 \mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\nu^2}{4} \right) (w-z)^2 - \frac{\omega_0^4}{4\dot{\alpha}^2} (w+z)^2 + i \frac{2r_1 \omega_0^4 \mu}{\dot{\alpha}^2} (w+z) \cdot (w-z) \right) dw dz \\
 &+ \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) |(w-z)|^2} e^{-i\left(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}\right)} \rho_0(w, z) \\
 &\quad \left(-\frac{\omega_0^4 \alpha}{\dot{\alpha}^2} (w+z) + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu}{\dot{\alpha}^2} (w-z) \right) \cdot x dw dz \\
 &+ \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) |(w-z)|^2} e^{-i\left(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}\right)} \rho_0(w, z) \\
 &\quad \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} x^2 dw dz
 \end{aligned}$$

Mit der Variablentransformation $v := \nu(t)(w-z)$, $s := \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(t)}(w+z)$, den Abkürzungen

$$\sigma(t) := \frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2} \quad (4.11)$$

$$\tau(t) := \frac{1}{\nu(t)} = \frac{\dot{\alpha}(t)}{\dot{\alpha}(t)\beta(t) - \alpha(t)\dot{\beta}(t)} = -\frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \quad (4.12)$$

$$C(t) := \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}(t)|} \right)^d \left(\frac{|\sigma(t)| |\tau(t)|}{2} \right)^d = \left(\frac{|\sigma(t)|}{4\pi} \right)^d \quad (4.13)$$

und anschließender Integration über x , bekommen wir

$$\begin{aligned}
 &\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \\
 &= (2\pi)^d C \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma\tau}{2} v \cdot s} \rho_0\left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2}\right) \delta_d(v) \\
 &\quad \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} - \left(\frac{4r_1^2 \omega_0^4 \mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\nu^2}{4} \right) \tau^2 v^2 + \frac{1}{4} s^2 - i \frac{2r_1 \omega_0^2 \mu \tau}{\dot{\alpha}} s \cdot v \right) ds dv \\
 &+ (2\pi)^d C \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma\tau}{2} v \cdot s} \rho_0\left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2}\right) i \delta_d^{(1)}(v) \\
 &\quad \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) ds dv \\
 &- (2\pi)^d C \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma\tau}{2} v \cdot s} \rho_0\left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2}\right) \delta_d^{(2)}(v) \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} ds dv
 \end{aligned}$$

Hierbei wurden für $v = (v_1, v_2, \dots, v_d)^T \in \mathbb{R}^d$ die Ausdrücke $\delta_d(v)$, $\delta_d^{(1)}(v)$ und $\delta_d^{(2)}(v)$ definiert.

$$\delta_d(v) := \prod_{k=1}^d \delta(v_k) \quad (4.14)$$

$$\delta_d^{(1)}(v) := \begin{pmatrix} \delta^{(1)}(v_1) \prod_{k=1, k \neq 1}^d \delta(v_k) \\ \delta^{(1)}(v_2) \prod_{k=1, k \neq 2}^d \delta(v_k) \\ \vdots \\ \delta^{(1)}(v_d) \prod_{k=1, k \neq d}^d \delta(v_k) \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

$$\delta_d^{(2)}(v) := \sum_{k=1}^d \left(\delta^{(2)}(v_k) \prod_{j=1, j \neq k}^d \delta(v_j) \right) \quad (4.16)$$

δ , $\delta^{(1)}$ und $\delta^{(2)}$ sind die Diracsche Deltadistribution in einer Dimension sowie deren erste beiden distributionellen Ableitungen.

Als nächstes betrachten wir die Summanden von $\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$ einzeln, führen jeweils die v -Integration aus und machen die Substitution $x = \frac{\sigma s}{2}$.

1. Summand:

$$\begin{aligned} & (2\pi)^d C \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\alpha} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \delta_d(v) \\ & \quad \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} - \left(\frac{4r_1^2 \omega_0^4 \mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\nu^2}{4} \right) \tau^2 v^2 + \frac{1}{4} s^2 - i \frac{2r_1 \omega_0^2 \mu \tau}{\dot{\alpha}} s \cdot v \right) ds dv \\ & = (2\pi)^d C \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} + \frac{x^2}{\sigma^2} \right) dx \end{aligned}$$

2. Summand:

$$\begin{aligned} & (2\pi)^d C \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\alpha} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) i \delta_d^{(1)}(v) \\ & \quad \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) ds dv \\ & = -i (2\pi)^d C \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\tau}{2} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot \left(-\frac{2\omega_0^4 \alpha}{\dot{\alpha}^2} x \right) dx \\ & \quad -i (2\pi)^d C \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(i \frac{2\dot{\beta} \omega_0^4 \alpha \tau}{\dot{\alpha}^3} x^2 + i \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} \right) dx \end{aligned}$$

3. Summand

$$- (2\pi)^d C \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\alpha} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \delta_d^{(2)}(v) \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} ds dv$$

$$\begin{aligned}
&= -(2\pi)^d C \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\tau^2}{4} [(\Delta_x - 2\nabla_y \cdot \nabla_x + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx \\
&\quad - (2\pi)^d C \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \tau [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot \left(-i \frac{\dot{\beta} \tau}{\dot{\alpha}} x \right) dx \\
&\quad - (2\pi)^d C \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(\left(-i \frac{\dot{\beta} \tau}{\dot{\alpha}} x \right)^2 - \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2 \right) 2d\tau^2 \right) dx
\end{aligned}$$

Addieren wir diese drei Terme und fassen wir die zeitabhängigen Konstanten vor den Integralen zusammen, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \\
&= \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right) \\
&\quad \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx \\
&\quad + \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) x^2 dx \\
&\quad + i\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot x dx \\
&\quad - \frac{1}{4} \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx
\end{aligned}$$

Aufgrund der Darstellung $\rho_0(x, y) = \sum_k \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k}(y)$ mit $\{\lambda_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset l^1(\mathbb{R})$, können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass

$$\rho_0(x, y) = \phi(x) \overline{\phi}(y).$$

Damit erhalten wir die Formeln

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot x dx &= 2i \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\overline{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\
\int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx &= -4 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx
\end{aligned}$$

und bekommen

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \\
&= \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx \\
 & + \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)x|^2 dx \\
 & - 2\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\
 & + \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Hölderschen Ungleichung lässt sich zeigen, dass

$$\int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \leq \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)x|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

gilt.

Die Ausdrücke $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx$, $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)x|^2 dx$ beziehungsweise $\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx$ entsprechen der Spur von R_0 , der Spur von $|x|R_0|x|$ beziehungsweise der Spur von $|\nabla|R_0|\nabla|$ und sind nach Voraussetzung endlich. Somit können wir das Integral $\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$ nach oben und nach unten abschätzen.

Weiterhin gilt, dass

$$\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \geq 0$$

ist.

Zusammenfassend bekommen wir also die folgende Aussage:

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx = \text{Tr}(|\nabla|R(t)|\nabla|) < \infty$$

3. Teil:

Wir zeigen in diesem Teil, dass $\text{Tr}(|x|R(t)|x|) < \infty$.

Wir wählen dieses Mal die Darstellung (4.7) für $\rho(x, y, t)$ und betrachten das Integral $\int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx$, welches der Spur von $|x|R(t)|x|$ entspricht.

Mit der Substitution $z := \nu(t)y_0$, anschließender x -Integration und z -Integration erhalten wir

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 \rho(x, x, t) dx \\
 & = -\frac{\tau^2}{4} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 \\
 & \quad + i \frac{\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} \cdot x_0 dx_0 \\
 & \quad + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) x_0^2 dx_0
 \end{aligned}$$

$$+2 \left(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) d\tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) dx_0$$

Da nach (3.41) $r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} = \frac{\dot{\beta}^2}{\dot{\alpha}^2} r_1 + r_2 - \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} r_3 > 0$ ist, gilt:

$$0 \leq 2 \left(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) d\tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) dx_0 < \infty$$

Sei nun wieder ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\rho_0(x, y) = \phi(x) \bar{\phi}(y)$, so ist (analog zum 2. Teil)

$$\begin{aligned} & -\frac{\tau^2}{4} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 \\ & + i \frac{\dot{\beta} \tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} \cdot x_0 dx_0 + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) x_0^2 dx_0 \\ = & \tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_{x_0} \phi(x_0)|^2 dx_0 - 2 \frac{\dot{\beta} \tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x_0) \nabla_{x_0} \phi(x_0)) \cdot x_0 dx_0 \\ & + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x_0) x_0|^2 dx_0 \end{aligned}$$

Ebenso, wie in Teil 2 des Beweises, lässt sich dieser Term nach oben und unten abschätzen und mit der Aussage

$$\int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx \geq 0$$

gilt:

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx < \infty$$

Also ist $0 \leq \text{Tr}(|x| R(t) |x|) < \infty$.

Somit ist $\|R(t)\|_{\mathcal{E}} < \infty$ und $R(t) \in \mathcal{E}$.

□

Bemerkung: Einen ausführlicheren Beweis finden wir im Anhang C.

Bemerkung: Da wir die Formeln (4.7) und (4.8) benutzt haben, verweisen wir für den Fall $\gamma < \omega_0$, $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ auf den Anhang D.3.

4.4.2 Zeitstetigkeit bezüglich der Energienorm

Als nächstes zeigen wir, dass $R(t)$ bezüglich der Energienorm $\|\cdot\|_{\mathcal{E}}$ stetig in der Zeit ist. Hierfür benötigen wir zwei Lemmata.

Im ersten dieser beiden Lemmata zeigen wir, dass für alle $t_0 \geq 0$ die Energienorm von $R(t)$ gegen die Energienorm von $R(t_0)$ konvergiert, falls t gegen t_0 konvergiert. Das zweite Lemma sagt aus, dass $\Upsilon R(t) \Upsilon$ schwach gegen $\Upsilon R(t_0) \Upsilon$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ konvergiert, falls R_0 ein Operator aus dem Energierraum ist.

Lemma 4.18

Sei $R_0 \in \mathcal{E}$. Dann gilt für alle $t_0 \geq 0$:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \|R(t)\|_{\mathcal{E}} = \|R(t_0)\|_{\mathcal{E}}$$

Beweis: Aufgrund der Splittung (4.10) und der Positivitätserhaltung von $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ können wir uns wieder auf den Fall $R_0 \geq 0$ und $R(t) \geq 0$ beschränken.

Nehmen wir zusätzlich ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass $\rho_0(x, y) = \phi(x) \bar{\phi}(y)$. Betrachten wir den Beweis der vorherigen Proposition, so erhalten wir

$$\begin{aligned} & 2E_{kin}(R(t)) \\ &= \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}\right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}\right) r_3 \right) \\ & \quad \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx \\ & \quad + \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)x|^2 dx - 2\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\ & \quad + \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \\ & \\ & 2E_{pot}(R(t)) \\ &= \frac{2d}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} (\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\beta}\dot{\alpha} r_3) \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx + \tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \phi(x)|^2 dx \\ & \quad - 2\frac{\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)x|^2 dx \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die Energienorm von $R(t)$:

$$\|R(t)\|_{\mathcal{E}}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(1 + \frac{2d}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} (\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\beta} \dot{\alpha} r_3)\right) \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx \\
&\quad + \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}\right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha \dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}\right) r_3 \right) \\
&\quad \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx \\
&\quad - \left(2\alpha\beta e^{-4\gamma t} + \frac{2\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}}\right) \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\
&\quad + (\alpha^2 e^{-4\gamma t} + \tau^2) \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \phi(x)|^2 dx \\
&\quad + \left(\beta^2 e^{-4\gamma t} + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2}\right) \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx
\end{aligned}$$

Wir zeigen zunächst, dass die zeitabhängigen Terme stetig in $t_0 = 0$ sind.

Über die Ausdrücke $\alpha(t)$, $\beta(t)$, $\dot{\alpha}(t)$ und $\dot{\beta}(t)$ können wir Folgendes aussagen:

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow 0} \alpha(t) &= 1 \\
\lim_{t \rightarrow 0} \beta(t) &= 0 \\
\lim_{t \rightarrow 0} \dot{\alpha}(t) &= 0 \\
\lim_{t \rightarrow 0} \dot{\beta}(t) &= \omega_0^2
\end{aligned}$$

$r_1(t)$, $r_2(t)$ und $r_3(t)$ konvergieren für $t \rightarrow 0$ gegen 0.

Wir betrachten nun die zeitabhängigen Terme vor den Integralen der Energienorm von $R(t)$ separat.

1. $\int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx$ -Term

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow 0} \left(- \left(2\alpha\beta e^{-4\gamma t} + \frac{2\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}} \right) \right) &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(-2e^{-4\gamma t} \left(\alpha\beta - \frac{\dot{\alpha}\dot{\beta}}{\omega_0^4} \right) \right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

2. $\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \phi(x)|^2 dx$ -Term

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow 0} (\alpha^2 e^{-4\gamma t} + \tau^2) &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(e^{-4\gamma t} \left(\alpha^2 + \frac{\dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} \right) \right) \\
&= 1
\end{aligned}$$

3. $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx$ -Term

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \left(\beta^2 e^{-4\gamma t} + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \right) &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(e^{-4\gamma t} \left(\beta^2 + \frac{\dot{\beta}^2}{\omega_0^4} \right) \right) \\ &= 1 \end{aligned}$$

4. $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx$ -Term

Diesen Term splitten wir in drei Teile.

(a) Der erste Teil lautet:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(1 + \frac{2d}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} \left(\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\beta} \dot{\alpha} r_3 \right) + 2d\alpha^2 e^{-4\gamma t} r_2 \right) = 1$$

(b) Im zweiten Teil betrachten wir $\frac{2d\omega_0^2 \alpha e^{-2\gamma t}}{\dot{\alpha}} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta} e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \right) r_3$. Wir wissen, dass der Grenzwert von $\dot{\alpha} = -\beta$ (beziehungsweise r_3) den Wert 0 annimmt, wenn wir t gegen 0 laufen lassen.

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \dot{r}_3 &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(2 \frac{\dot{\alpha} \dot{\beta}}{\omega_0^4} D_{pp} + 2\alpha \beta D_{qq} + 2 \frac{\dot{\alpha} \beta + \alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} D_{pq} \right) \\ &= 2D_{pq} \\ \lim_{t \rightarrow 0} \ddot{\alpha} &= \lim_{t \rightarrow 0} (-\dot{\beta}) \\ &= -\omega_0^2 \end{aligned}$$

Also hat $\frac{r_3}{\dot{\alpha}}$ den Grenzwert $-\frac{2D_{pq}}{\omega_0^2}$. Die Regel von de l'Hospital (siehe [Fo99]) besagt dann, dass

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{r_3}{\dot{\alpha}} = -\frac{2D_{pq}}{\omega_0^2}$$

Somit können wir folgern:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{2d\omega_0^2 \alpha e^{-2\gamma t}}{\dot{\alpha}} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta} e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \right) r_3 \right) = 0$$

(c) Wir zeigen im dritten Teil, dass gilt:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 \right) = 0$$

Uns ist bekannt, dass $\lim_{t \rightarrow 0} \dot{\alpha} = 0$ und $\lim_{t \rightarrow 0} \ddot{\alpha} = -\omega_0^2$.

Weiterhin gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{d}{dt} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) \right) &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(-\frac{e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \left(\dot{\alpha} \dot{\beta} + \alpha \ddot{\beta} - 2\gamma \alpha \dot{\beta} \right) \right) \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \left(-\frac{e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \dot{\alpha} \dot{\beta} - \frac{e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \alpha \left(\ddot{\beta} - 2\gamma \dot{\beta} \right) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde benutzt, dass gilt:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \dot{\alpha} = 0, \quad \lim_{t \rightarrow 0} \left(\ddot{\beta} - 2\gamma \dot{\beta} \right) = 0$$

Also können wir mit der Regel von de l'Hospital folgern, dass

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\dot{\alpha}} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) \right) = 0$$

Somit gilt:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 \right) = 0$$

Fassen wir alle drei Teile zusammen, so wissen wir, dass der zeitabhängige Term vor $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx$ gegen 1 konvergiert, falls t gegen 0 konvergiert.

Also erhalten wir:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \| R(t) \|_{\mathcal{E}} &= \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \phi(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx \\ &= \| R_0 \|_{\mathcal{E}} \end{aligned}$$

Für $t_0 > 0$ sind die zeitabhängigen Terme vor den Integralen stetig in t_0 durch die Definition von $\alpha(t)$, $\beta(t)$, $r_1(t)$, $r_2(t)$ und $r_3(t)$ (siehe (3.29), (3.30), (3.31), (3.33), (3.34) und (3.35)).

Wir schließen also:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \| R(t) \|_{\mathcal{E}} = \| R(t_0) \|_{\mathcal{E}}$$

□

Bemerkung: Wir haben an dieser Stelle nicht gezeigt, dass die Aussage aus dem Lemma auch für den ersten Fall (3.29) mit $t_0 = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ gilt. Den Beweis für diesen Fall geben wir in Anhang D.4.

Lemma 4.19

Sei $R_0 \in \mathcal{E}$. Dann gilt für alle $\psi, \kappa \in L^2(\mathbb{R}^d)$:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle \psi, \Upsilon R(t) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \langle \psi, \Upsilon R(t_0) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

Beweis:

Wie schon in den letzten beiden Beweisen, können wir aufgrund der Splittung (4.10) und der Positivitätserhaltung von $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass $R_0 \geq 0$ und somit auch $R(t) \geq 0$.

Wir wählen ein $\varepsilon > 0$.

Zu ψ und κ wählen wir Folgen $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ und $\{\kappa_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ in $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, die in der $L^2(\mathbb{R}^d)$ -Norm gegen ψ und κ konvergieren.

Da nach Voraussetzung an ψ_n und κ_n sowohl $\Upsilon \psi_n$ als auch $\Upsilon \kappa_n$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ sind und $R(t), R(t_0)$ nach Satz 4.16 selbstadjungierte Spurklasse-Operatoren, die stetig in t, t_0 sind, gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow t_0} \langle \psi_n, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \lim_{t \rightarrow t_0} \langle \Upsilon \psi_n, (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Wir können also ein t_1 finden, so dass für alle $|t - t_0| < t_1$

$$\langle \psi_n, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq \frac{\varepsilon}{3}$$

Nach Proposition 4.17 ist $R(t)$ aber auch ein Operator aus \mathcal{E} und wir wissen, dass $\| \Upsilon R(t) \Upsilon \| \leq \frac{M(t_1)}{2}$ für alle $|t - t_0| < t_1$ und einem geeigneten $M(t_1)$. Mit dieser Ungleichung gilt dann:

$$\begin{aligned} | \langle \psi - \psi_n, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} | &\leq M(t_1) \| \psi - \psi_n \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \| \kappa \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ | \langle \psi_n, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon (\kappa - \kappa_n) \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} | &\leq M(t_1) \| \kappa - \kappa_n \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \| \psi_n \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \end{aligned}$$

Wählen wir nun ein $m \in \mathbb{N}$ groß genug, so dass für alle $n > m$ gilt:

$$\begin{aligned} \| \psi - \psi_n \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} &\leq \frac{\varepsilon}{3M(t_1) \| \kappa \|_{L^2(\mathbb{R}^d)}} \\ \| \kappa - \kappa_n \|_{L^2(\mathbb{R}^d)} &\leq \frac{\varepsilon}{6M(t_1) \| \psi \|_{L^2(\mathbb{R}^d)}} \\ &\leq \frac{\varepsilon}{3M(t_1) \| \psi_n \|_{L^2(\mathbb{R}^d)}} \end{aligned}$$

Dann gilt aber:

$$\begin{aligned}
 | \langle \psi, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} | &\leq | \langle \psi_n, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa_n \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} | \\
 &\quad + | \langle \psi_n, \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon (\kappa - \kappa_n) \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} | \\
 &\quad + | \langle (\psi - \psi_n), \Upsilon (R(t) - R(t_0)) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} | \\
 &\leq \frac{\varepsilon}{3} + M(t_1) \frac{\varepsilon}{3M(t_1) \|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}} \|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
 &\quad + M(t_1) \frac{\varepsilon}{3M(t_1) \|\kappa\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}} \|\kappa\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
 &\leq \varepsilon
 \end{aligned}$$

Da ε beliebig gewählt war, erhalten wir

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle \psi, \Upsilon R(t) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \langle \psi, \Upsilon R(t_0) \Upsilon \kappa \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

□

Wir können nun beweisen, dass $R(t)$ stetig in t für alle $t \in \mathbb{R}_0^+$ mit Werten im Energieraum \mathcal{E} ist.

Proposition 4.20

Sei $R_0 \in \mathcal{E}$. Dann ist $R(t)$ stetig in t für alle $t \in \mathbb{R}_0^+$ bezüglich der Energienorm $\|\cdot\|_{\mathcal{E}}$.

Beweis: In der Proposition 4.17 haben wir bereits gesehen, dass aus $R_0 \in \mathcal{E}$ folgt, dass $R(t)$ ein Operator aus \mathcal{E} ist.

Wir wählen nun ein $t_0 \in \mathbb{R}_0^+$ fest.

Lemma 4.18 liefert uns dann

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \|R(t)\|_{\mathcal{E}} = \|R(t_0)\|_{\mathcal{E}}$$

Mit Hilfe des Lemmas 4.19 wissen wir, dass

$$\Upsilon R(t) \Upsilon \xrightarrow{t \rightarrow t_0} \Upsilon R(t_0) \Upsilon$$

Eine analoge Version von Satz 4.14 (siehe [Si05]) liefert uns dann

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \|R(t) - R(t_0)\|_{\mathcal{E}} = 0$$

Also ist $R(t)$ stetig in t_0 mit Werten aus dem Energieraum.

Da t_0 beliebig gewählt wurde, folgt die Behauptung der Proposition.

□

4.4.3 Zusammenfassung einiger Eigenschaften im Energieraum

Wie schon in den vorherigen Kapiteln möchten wir auch dieses Mal wieder einen abschließenden Satz über die Eigenschaften von $R(t)$ angeben.

Satz 4.21

Sei $R_0 \in \mathcal{E}$. Es gelten die Bedingungen (3.6)-(3.10).

Dann ist $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine konservative quantendynamische Halbgruppe auf \mathcal{E} und $R(t) = S(t)R_0$ ist eine eindeutige Lösung der Gleichung (3.1) mit der Anfangsbedingung R_0 im Raum $C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{E})$.

Beweis: Auch dieses Mal gilt wieder, dass wir mit Hilfe der Splittung (4.10) und der Positivitätserhaltung von $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen können, dass $R_0 \geq 0$ und somit auch $R(t) \geq 0$.

In Proposition 4.17 haben wir bereits gesehen, dass für einen Operator R_0 aus dem Energieraum, der Operator $R(t)$ ebenfalls ein Operator aus dem Energieraum ist. Proposition 4.20 liefert uns, dass $R(t)$ stetig in t bezüglich der Energienorm ist.

Nehmen wir wieder ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass $\rho_0(x, y) = \phi(x)\bar{\phi}(y)$ ist, so gilt:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx &\leq (2Tr(|x| R_0 |x|))^{1/2} (2Tr(|\nabla| R_0 |\nabla|))^{1/2} \\ &= (E_{pot})^{1/2} (E_{kin})^{1/2} \end{aligned}$$

Für die Energienorm haben wir bereits erhalten (siehe Beweis zu Lemma 4.18):

$$\begin{aligned} &\|R(t)\|_{\mathcal{E}} \\ &= Tr(R(t)) + 2E_{kin}(R(t)) + 2E_{pot}(R(t)) \\ &= Tr(R_0) \\ &\quad + Tr(R_0) \\ &\quad + \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}\right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}\right) r_3 \right) \\ &\quad + 2\alpha^2 e^{-4\gamma t} E_{kin}(R_0) + 2\beta^2 e^{-4\gamma t} E_{pot}(R_0) - 2\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x(x)) \cdot x dx \\ &\quad + Tr(R_0) \frac{2d}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} (\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha}\dot{\beta} r_3) \\ &\quad + 2\frac{\dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} E_{kin}(R_0) + 2\frac{\dot{\beta}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} E_{pot}(R_0) - 2\frac{\dot{\alpha}\dot{\beta}}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\ &\leq Tr(R_0) + Tr(R_0) \frac{2d}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} (\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha}\dot{\beta} r_3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +Tr(R_0) \\
& \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right) \\
& +6e^{-4\gamma t} \left(\left(\alpha^2 + \frac{\dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} \right) E_{kin}(R_0) + \left(\beta^2 + \frac{\dot{\beta}^2}{\omega_0^4} \right) E_{pot}(R_0) \right)
\end{aligned}$$

Wir haben schon im Beweis zu Lemma 4.18 (siehe auch Anhang D.4) gezeigt, dass die zeitabhängigen Koeffizienten vor $Tr(R_0)$, $E_{kin}(R_0)$ und $E_{pot}(R_0)$ stetig in t für alle $t \in \mathbb{R}_0^+$ sind.

Somit können wir eine stetige Funktion $C(t)$ finden, so dass

$$\|R(t)\|_{\mathcal{E}} \leq C(t) \|R_0\|_{\mathcal{E}}$$

Dies garantiert uns, dass $R(t)$ für alle Zeiten $t \geq 0$ im Energieraum liegt.

Also ist $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine quantendynamische Halbgruppe auf \mathcal{E} und $R(t)$ eine Lösung für (3.1) aus $C(\mathbb{R}_0^+; \mathcal{E})$.

Die Eindeutigkeit der Lösung bekommen wir wieder durch die Annahme, dass wir zwei Lösungen hätten, und anschließender Differenzenbildung dieser beiden Lösungen.

□

Kapitel 5

Zusammenfassung

Wir haben mit Hilfe der Greenschen Funktion für die lineare Wigner-Fokker-Planck-Gleichung (3.16) eine Funktion $\rho(x, y, t)$ und dann einen Operator $R(t)$ konstruiert.

Anschließend haben wir gesehen, dass für R_0 in $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ die Menge $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ (definiert durch $R(t) = S(t)R_0$) eine stark stetige Halbgruppe auf $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist, die sogar die Positivität erhält. Wir haben außerdem festgestellt, dass $\|R(t)\|_2 \leq \|R_0\|_2$ für alle Zeiten $t \geq 0$.

Danach haben wir den Raum der selbstadjungierten Spurklasse-Operatoren betrachtet und gezeigt, dass $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ eine konservative quantendynamische Halbgruppe auf $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist, also dass neben der Positivität auch die Spurklassen-Norm erhalten bleibt.

Abschließend haben wir im letzten Kapitel die Eigenschaften von $R(t)$ im Energieraum untersucht und unter der Annahme, dass R_0 im Energieraum \mathcal{E} liegt, bewiesen, dass $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ sogar eine quantendynamische Halbgruppe auf \mathcal{E} ist.

Wir können also unter der Voraussetzung, dass unser Potential ein harmonisches Oszillator-Potential ist und die Gleichung (3.1) in Lindblad-Form vorliegt (siehe (3.6)-(3.10)), $R(t)$ als Lösung von (3.1) im Raum $C(\mathbb{R}_0^+; X)$ ansehen, falls die Anfangsbedingung R_0 in X liegt. Hierbei steht X für $\mathcal{J}_2^s(L^2(\mathbb{R}^d))$, $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ beziehungsweise \mathcal{E} .

Zum Abschluss dieser Diplomarbeit möchten wir noch ein einfaches Beispiel betrachten.

Wir definieren für unser Beispiel die Anfangsbedingung R_0 durch das dazugehörige $\rho_0(x, y)$.

$$\rho_0(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \left(e^{-\frac{1}{2}((x-a_1)^2 + (y-a_1)^2)} + e^{-\frac{1}{2}((x-a_2)^2 + (y-a_2)^2)} \right)$$

Hierbei sind $a_1, a_2 \in \mathbb{R}^d$.

$\rho_0(x, y)$ ist also die Summe von zwei Gaußschen Glockenkurven, wobei die eine um a_1 und die andere um a_2 verschoben ist.

R_0 ist, wie wir schnell erkennen, ein positiver selbstadjungierter Operator aus dem Energieraum und die Darstellung aus Satz 2.7 sieht dann wie folgt aus:

$$\begin{aligned} R_0 &= \langle \phi_1, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \phi_1 + \langle \phi_2, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \phi_2 \\ \phi_1(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{(x-a_1)^2}{2}} \\ \phi_2(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{(x-a_2)^2}{2}} \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) &= \frac{1}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \\ \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\overline{\phi_n(x)} \nabla_x \phi_n(x)) \cdot x dx &= 0 \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi_n(x)|^2 dx &= \frac{d}{2(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \\ \int_{\mathbb{R}^d} |\phi_n(x) \cdot x|^2 dx &= \frac{1}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \left(\frac{d}{2} + a_n^2 \right) \end{aligned}$$

und dem Beweis von Lemma 4.18 erhalten wir

$$\begin{aligned} &E_{kin}(R(t)) \\ &= \frac{2d\omega_0^4}{(4\pi)^{\frac{d}{2}} \dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha \dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha \dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right) \\ &\quad + \frac{e^{-4\gamma t}}{2(4\pi)^{\frac{d}{2}}} ((d + a_1^2 + a_2^2) \beta^2 + d\alpha^2) \\ &E_{pot}(R(t)) \\ &= \frac{e^{-4\gamma t}}{(4\pi)^{\frac{d}{2}} \omega_0^2} \left(2d \left(\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha} \dot{\beta} r_3 \right) + \frac{d}{2} \dot{\alpha}^2 + \frac{d + a_1^2 + a_2^2}{2} \dot{\beta}^2 \right) \end{aligned}$$

Wir haben hierbei die potentielle Energie noch mit ω_0^2 multipliziert, denn unser eigentliches Potential lautet $V(x) = \frac{\omega_0^2}{2} |x|^2 + a \cdot x + b$ (vergleiche Kapitel 3.2) und nicht $V(x) = \frac{1}{2} |x|^2$ wie wir es bei der Definition von dem Energieraum benutzt haben.

Nach einer etwas längeren Rechnung erhalten wir außerdem

$$\begin{aligned}
 \|R_0\|_2 &= \|\rho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
 &= \frac{\sqrt{2}}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \sqrt{1 + e^{-\frac{(a_1 - a_2)^2}{2}}} \\
 \|R(t)\|_2 &= \|\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
 &= \sqrt{2} \left(\frac{e^{2\gamma t}}{4\pi}\right)^{\frac{d}{2}} \left(\frac{r_1}{(4r_1 + 1)(\lambda + r_1) + r_3^2}\right)^{\frac{d}{4}} \\
 &\quad \left(1 + e^{-\frac{1}{2}(a_1 - a_2)^2} e^{\frac{2r_1(\lambda + r_1)(a_1 - a_2)^2}{(4r_1 + 1)(\lambda + r_1) + r_3^2}}\right)^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned}$$

Für die nachfolgenden Grafiken 5.1-5.7 haben wir

$$d = 3, \quad a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_2 = -\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

gewählt.

In den Abbildungen 5.1-5.3 haben wir zusätzlich $D_{pp} = 5$, $D_{qq} = 2$ und $D_{pq} = 1$ gesetzt.

In Abbildung 5.1 sehen wir den Verlauf der kinetischen Energie, der potentiellen Energie und der Summe aus kinetischer und potentieller Energie sowie den Verlauf der $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm von $R(t)$, der gleich dem Verlauf der $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ -Norm von $\rho(t)$ ist, für $\gamma = 4$ und $\omega_0 = 5$. Wir befinden uns also im ersten Fall (siehe (3.29)).

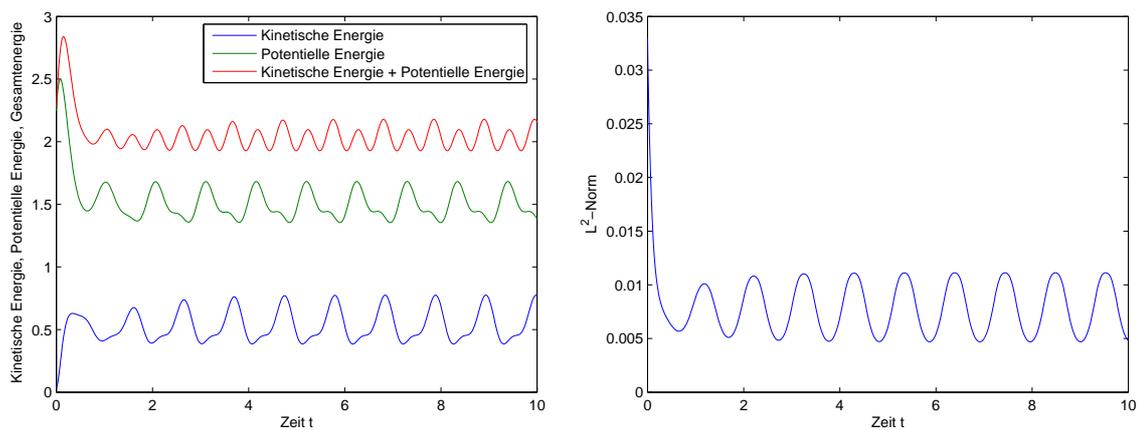


Abbildung 5.1: Energie und $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im 1. Fall (siehe (3.29))

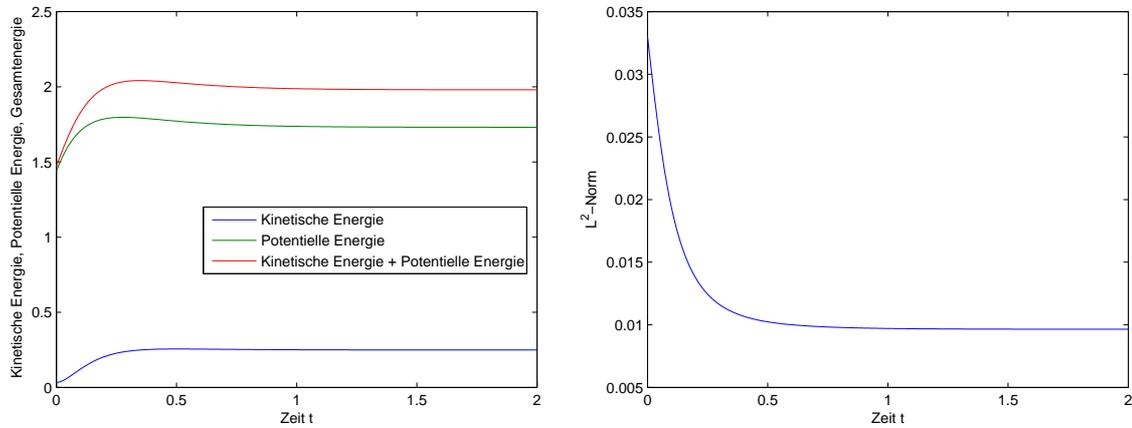


Abbildung 5.2: Energie und $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im 2. Fall (siehe (3.30))

Abbildung 5.2 spiegelt die Darstellung der Energien und der $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm für den zweiten Fall (siehe (3.30)) mit $\gamma = 5$ und $\omega_0 = 4$ wider.

Der Zeitverlauf der Energien und der $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im dritten Fall (siehe (3.31)) mit $\gamma = \omega_0 = 5$ ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

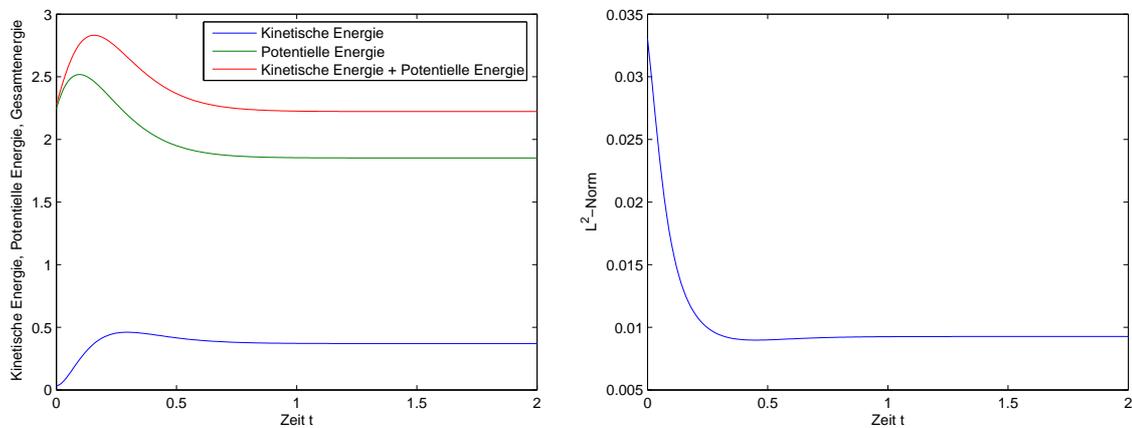


Abbildung 5.3: Energie und $\mathcal{J}_2(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm im 3. Fall (siehe (3.31))

In allen drei Schaubildern ist bei den Energien ein Anstieg zu Beginn des Zeitverlaufs zu erkennen. Dies liegt daran, dass für kleine t die Terme $\frac{e^{-4\gamma t}}{2(4\pi)^{\frac{d}{2}}}((d + a_1^2 + a_2^2)\beta^2 + d\alpha^2)$ bei der kinetischen Energie und $\frac{e^{-4\gamma t}}{2(4\pi)^{\frac{d}{2}}\omega_0^2}(d\dot{\alpha}^2 + (d + a_1^2 + a_2^2)\dot{\beta}^2)$ bei der potentiellen Energie führend sind.

Der weitere Verlauf wird dann durch den anderen Term in der kinetischen beziehungsweise potentiellen Energie bestimmt.

In den nächsten vier Abbildungen betrachten wir nun nur noch die Energien im ersten Fall und verändern die Konstanten γ , ω_0 , D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} .

Für die Grafik 5.4 haben wir $\gamma = 4$, $\omega_0 = 5$, $D_{pp} = D_{qq} = 15$ und $D_{pq} = 10$ gesetzt.

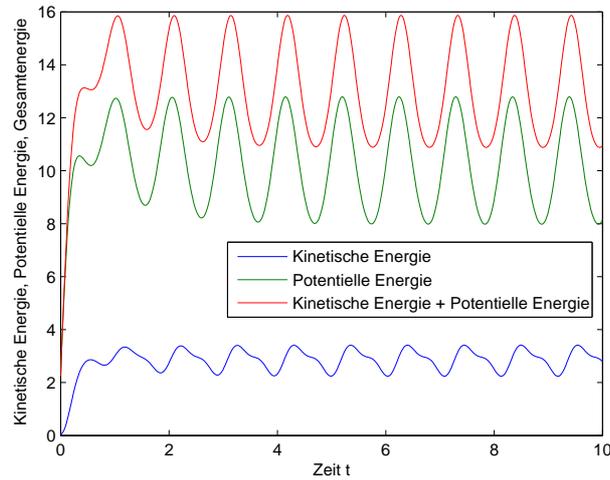


Abbildung 5.4: Energie im 1. Fall (Variation von D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} - 1. Variante)

Um die Abbildung 5.5 zu erhalten, haben wir $\gamma = 4$, $\omega_0 = 5$, $D_{pp} = 3$, $D_{qq} = 75$ und $D_{pq} = 10$ benutzt.

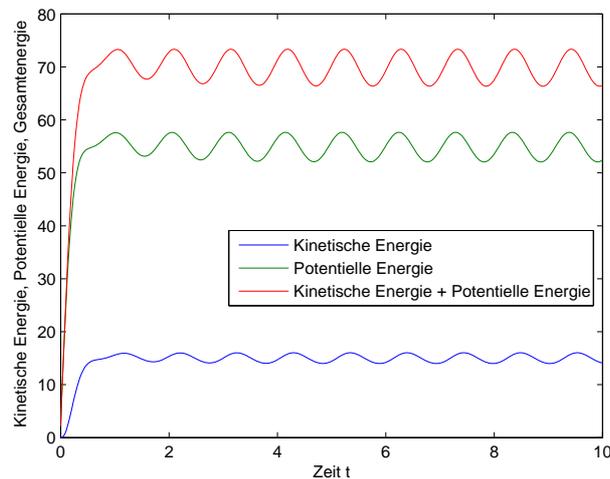


Abbildung 5.5: Energie im 1. Fall (Variation von D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} - 2. Variante)

Die Konstanten D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} werden nur in r_1 , r_2 und r_3 benötigt und sind daher nur in einem Term der kinetischen beziehungsweise potentiellen Energie vertreten.

Diese Konstanten nehmen Einfluss auf die Höhe der Gesamtenergie sowie auf die Amplitude und die Frequenz der Schwingungen in der Energie.

Für die Abbildungen 5.6 und 5.7 haben wir $D_{pp} = D_{qq} = 15$, $D_{pq} = 10$ und $\omega_0 = 10$ gesetzt.

Bei Grafik 5.6 wurde $\gamma = 4$ und bei Grafik 5.7 wurde $\gamma = 8$ angenommen.

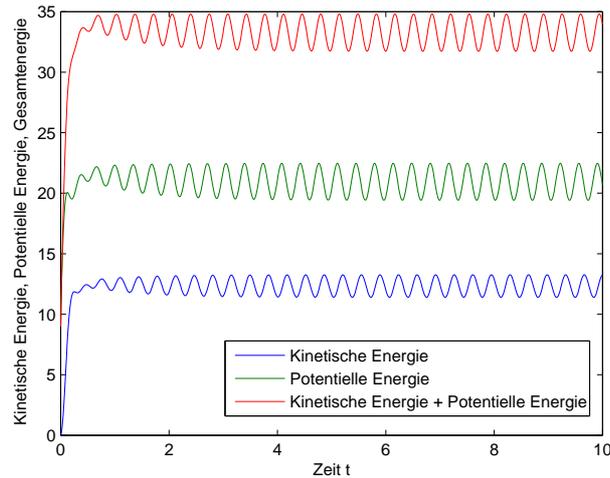


Abbildung 5.6: Energie im 1. Fall (Variation von ω_0)

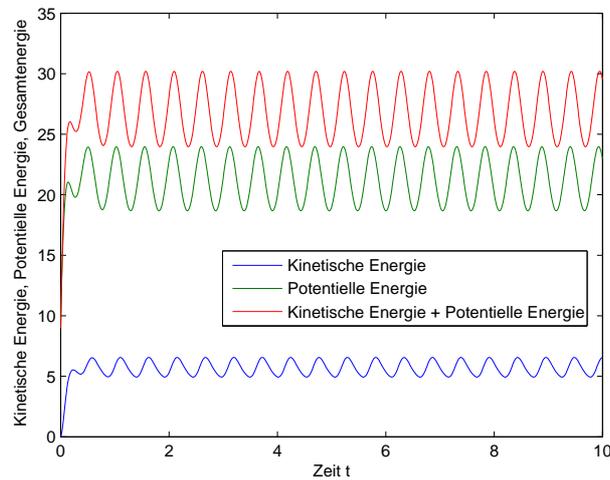


Abbildung 5.7: Energie im 1. Fall (Variation von γ)

Vergleichen wir die Grafiken 5.6 und 5.7 mit der Abbildung 5.4, so können wir erkennen, dass ω_0 und γ ebenfalls Einfluss auf die Höhe der Gesamtenergie sowie auf die Amplitude und die Frequenz der Schwingungen in der Energie ausüben.

Wir möchten nun noch die Wigner-Funktion $w(x, \xi, t)$ für bestimmte Zeiten und den Zeitverlauf der Partikeldichte $\rho(x, x, t)$ darstellen.

Dafür wählen wir $d = 1$, $a_1 = 1$, $a_2 = -2$, $\gamma = 4$, $\omega_0 = 5$, $D_{pp} = 5$, $D_{qq} = 2$ und $D_{pq} = 1$.

Vergleichen wir die Abbildungen 5.8-5.10 mit der Abbildung 5.11, so können wir erkennen, dass die Integration von $w(x, \xi, t)$ über ξ identisch ist mit $\rho(x, x, t)$.

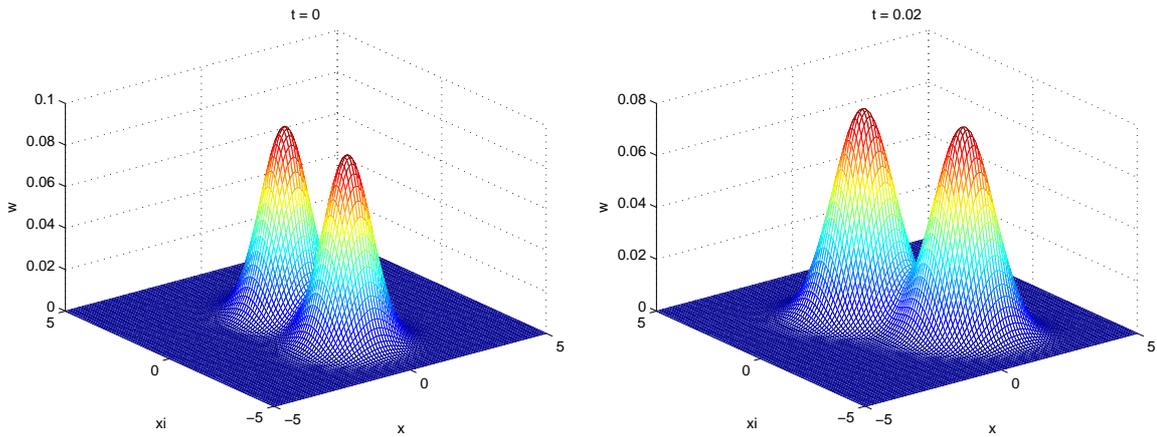


Abbildung 5.8: Wigner-Funktion im 1. Fall zu den Zeiten $t = 0$ und $t = 0,02$

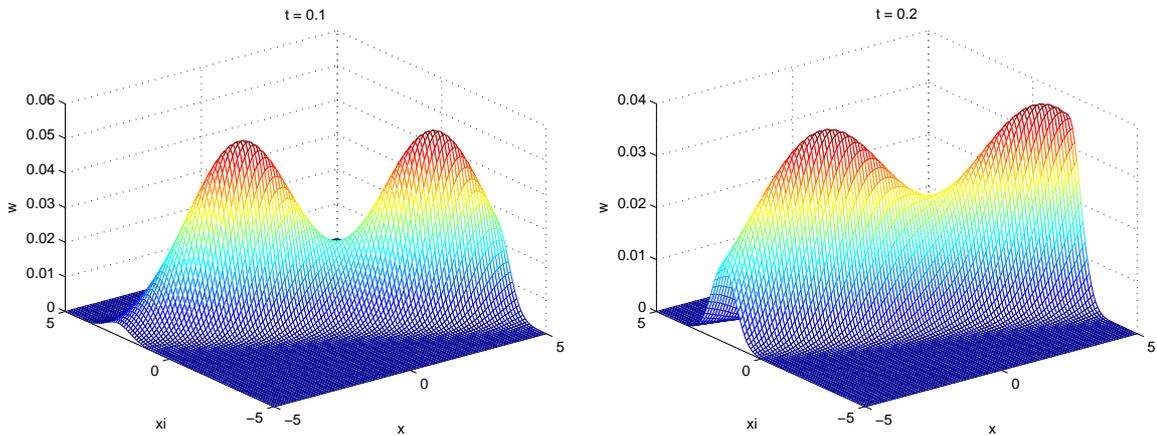


Abbildung 5.9: Wigner-Funktion im 1. Fall zu den Zeiten $t = 0,1$ und $t = 0,2$

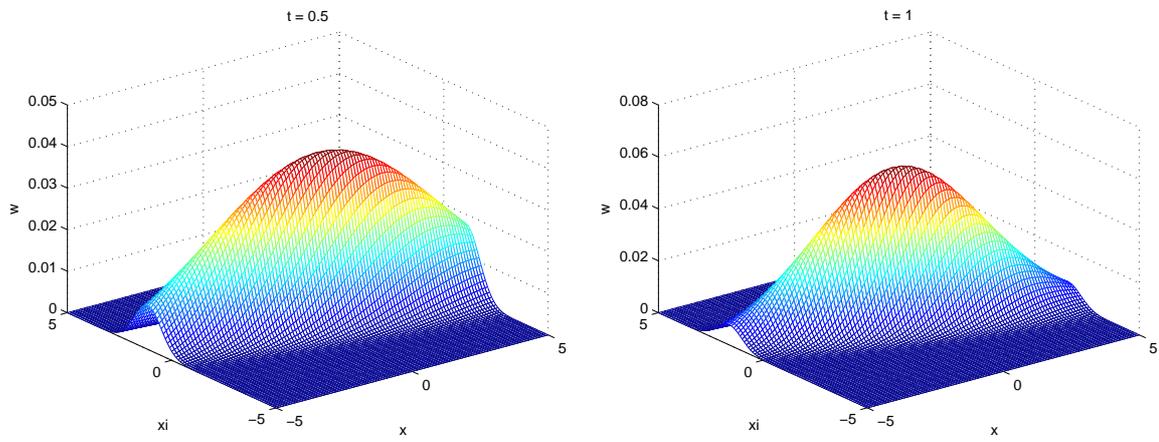


Abbildung 5.10: Wigner-Funktion im 1. Fall zu den Zeiten $t = 0,5$ und $t = 1$

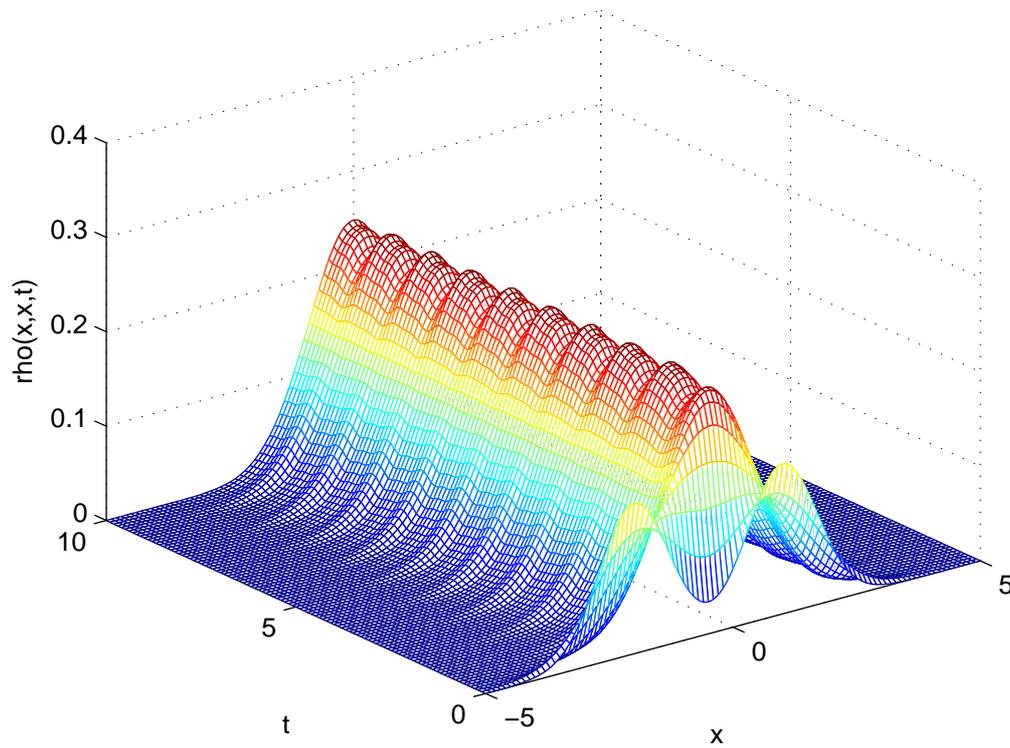


Abbildung 5.11: Zeitverlauf von $\rho(x, x, t)$

Literaturverzeichnis

- [AL07] Alicki, R., Lendi, K.: Quantum dynamical semigroups and applications. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York (2007)
- [ALMS04] Arnold, A., López, J.L., Markowich, P., Soler, J.: An analysis of quantum Fokker-Planck models: A Wigner function approach. *Rev. Mat. Iberoam.*, 20, no.3, 771-814 (2004)
- [Ar06] Arnold, A.: Mathematical Properties of Quantum Evolution Equations. Lecture Notes CIME-Sommerschule, Cetraro (2006)
- [AS04] Arnold, A., Sparber, C.: Quantum Dynamical Semigroups for Diffusion Models with Hartree Interaction. *Commun. Math. Phys.*, 251, 179-207 (2004)
- [BSMM05] Bronstein, I.M., Semendjajew, K.A., Musiol, G., Mühlig, H.: Taschenbuch der Mathematik. Harri Deutsch, Thun - Frankfurt am Main (2005)
- [CF93] Chebotarev, A.M., Fagnola, F.: Sufficient conditions for conservativity of quantum dynamical semigroups. *J. Funct. Anal.*, 118, 131-153 (1993)
- [Da76] Davies, E.B.: Quantum Theory of Open Systems. Academic Press, New York (1976)
- [Di93] Diósi, L.: On high-temperature Markovian equations for quantum Brownian motion. *Europhys. Lett.*, 22, 1-3 (1993)
- [El02] Elstrodt, J.: Maß- und Integrationstheorie. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York (2002)
- [Fi00] Fischer, G.: Lineare Algebra. Verlag Vieweg, Braunschweig - Wiesbaden (2000)
- [Fo99] Forster, O.: Analysis 1. Verlag Vieweg, Braunschweig - Wiesbaden (1999)

- [GGKS93] Grubin, H.L., Govindan, T.R., Kreskovsky, J.P., Strocio, M.A.: Transport via the Liouville equation and moments of quantum distribution functions. *Solid St. Electr.*, 36, 1697-1709 (1993)
- [Ha70] Haken, H.: The semiclassical and quantum theory of the laser., in: Kay, S.M., Maitland, A.: *Quantum optics*. Academic Press, New York (1970)
- [LP93] Lions, P.L., Paul, T.: Sur les mesures de Wigner, *Rev. Mat. Iberoam.*, 9, no.3, 553-618 (1993)
- [MRS90] Markowich, P.A., Ringhofer, C.A., Schmeiser, C.: *Semiconductor Equation*. Springer-Verlag, Wien - New York. (1990)
- [No04] Nolting, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 6, Statistische Physik*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York (2004)
- [Pa83] Pazy, A.: *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, New York - Berlin - Heidelberg - Tokyo (1983)
- [RS80] Reed, M., Simon, B.: *Methods of modern mathematical physics I, Functional Analysis*, Academic Press, London (1980)
- [Sc02] Schwabl, F.: *Quantenmechanik*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York (2002)
- [SCDM04] Sparber, C., Carrillo, J.A., Dolbeault, J., Markowich, P.A.: On the Long-Time Behavior of the Quantum Fokker-Planck Equation. *Monatsh. Math.*, 141, 237-257 (2004)
- [Si05] Simon, B.: *Trace Ideals and Their Applications*. American Mathematical Society (2005)
- [St86] Strocio, M.A.: Moment-equation representation of the dissipative quantum Liouville equation. *Superlattices and Microstructures*, 2, 83-87 (1986)
- [Ta83] Tatarskii, V.I.: The Wigner representation of quantum mechanics. *Sov. Phys. Usp.*, 26, 311-327 (1983)
- [Wa00] Walter, W.: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York (2000)
- [Wi32] Wigner, E.: On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40, 749-759 (1932)

Anhang A

Ausführlicher Beweis zu Lemma 3.2

Im Beweis von Lemma 3.2 haben wir die einzelnen Terme nicht explizit verglichen. Dieses möchten wir hier nun nachholen.

Lemma A.1

Die partiellen Differentialgleichungssysteme (3.4), (3.5) und (3.11), (3.12) sind äquivalent.

Beweis:

Als Abkürzung definieren wir

$$\begin{aligned}v &:= x + \frac{\hbar}{2m}y \\z &:= x - \frac{\hbar}{2m}y\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für ein passendes f :

$$\begin{aligned}\nabla_x(f(v, z)) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f(v, z)}{\partial x_1} \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f(v, z)}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f(v, z)}{\partial z_1} \frac{\partial z_1}{\partial x_1} \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f(v, z)}{\partial v_1} + \frac{\partial f(v, z)}{\partial z_1} \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= (\nabla_v + \nabla_z) f(v, z) \\ \Delta_x(f(v, z)) &= (\Delta_v + 2\nabla_v \cdot \nabla_z + \Delta_z) f(v, z) \\ \nabla_y(f(v, z)) &= \frac{\hbar}{2m} (\nabla_v - \nabla_z) f(v, z)\end{aligned}$$

Im Beweis werden auch noch folgende zwei Formeln benötigt.

$$\nabla_\xi w(x, \xi, t) = \frac{-i}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} y \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy$$

$$\Delta_\xi w(x, \xi, t) = \frac{-1}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} y^2 \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy$$

Wir werten nun die Gleichung (3.4) an v und z aus, multiplizieren mit $\frac{1}{(2\pi)^d \hbar} e^{-i\xi \cdot y}$ und integrieren über y .

Im Folgenden werden diese Terme einzeln behandelt.

1.

$$\begin{aligned} & \frac{-2iD_{pq}}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} (v - z) \cdot (\nabla_v + \nabla_z) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= \frac{-2iD_{pq}}{(2\pi)^d \hbar m} \int_{\mathbb{R}^d} y \cdot \nabla_x (\rho(v, z, t)) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= \frac{-2D_{pq}}{(2\pi)^d \hbar m} \operatorname{div}_x \left(i \int_{\mathbb{R}^d} y \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \right) \\ &= \frac{2D_{pq}}{(2\pi)^d \hbar m} \operatorname{div}_x \left(\nabla_\xi \int_{\mathbb{R}^d} \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \right) \\ &= \frac{2D_{pq}}{m} \operatorname{div}_x (\nabla_\xi w(x, \xi, t)) \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} & \frac{D_{qq}}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_v + \nabla_z|^2 \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= \frac{D_{qq}}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} (\Delta_v + 2\nabla_v \cdot \nabla_z + \Delta_z) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= \frac{D_{qq}}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \Delta_x (\rho(v, z, t)) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= D_{qq} \Delta_x w(x, \xi, t) \end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned} & -\frac{D_{pp}}{(2\pi)^d \hbar^3} \int_{\mathbb{R}^d} |v - z|^2 \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= -\frac{D_{pp}}{(2\pi)^d \hbar^3 m^2} \int_{\mathbb{R}^d} y^2 \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\ &= \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi w(x, \xi, t) \end{aligned}$$

4.

$$-\frac{\gamma}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} (v - z) \cdot (\nabla_v - \nabla_z) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\gamma}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hbar}{m} y \cdot (\nabla_v - \nabla_z) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \frac{2\gamma}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} -y \cdot \frac{\hbar}{2m} (\nabla_v - \nabla_z) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \frac{2\gamma}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} -y \cdot (\nabla_y (\rho(v, z, t))) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= 2\gamma \operatorname{div}_\xi (\xi w(x, \xi, t))
\end{aligned}$$

5.

$$\begin{aligned}
&\frac{i}{(2\pi)^d \hbar^2} \int_{\mathbb{R}^d} -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_w - \Delta_z) \rho(w, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \frac{-i}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^d} ((\nabla_y \cdot \nabla_x) (\rho(v, z, t))) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \frac{1}{(2\pi)^d \hbar} \xi \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \nabla_x (\rho(v, z, t)) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \xi \cdot \nabla_x w(x, \xi, t) \\
&\frac{i}{(2\pi)^d \hbar^2} \int_{\mathbb{R}^d} (V(v) - V(z)) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \frac{i}{(2\pi)^d \hbar^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} (V(v) - V(z)) \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m} y', x - \frac{\hbar}{2m} y'\right) e^{-i\xi \cdot y} \\
&\quad \delta(y' - y) dy' dy \\
&= \frac{i}{(2\pi)^{2d} \hbar^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} (V(v) - V(z)) \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m} y', x - \frac{\hbar}{2m} y'\right) e^{-i\xi \cdot y} \\
&\quad \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\xi' \cdot (y' - y)} d\xi' dy' dy \\
&= \frac{i}{(2\pi)^d \hbar} \int_{\mathbb{R}^{2d}} (V(v) - V(z)) w(x, \xi', t) e^{-iy \cdot (\xi - \xi')} dy \\
&= \Theta[V] w(x, \xi, t) \\
&\frac{i}{(2\pi)^d \hbar^2} \int_{\mathbb{R}^d} (H_v - H_z) \rho(v, z, t) e^{-i\xi \cdot y} dy \\
&= \xi \cdot \nabla_x w(x, \xi, t) + \Theta[V] w(x, \xi, t)
\end{aligned}$$

□

Anhang B

Halbgruppeneigenschaft im dritten Fall

In Proposition 4.7 haben wir die Halbgruppeneigenschaft von $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ behandelt. Wir behalten die Abkürzungen aus der Proposition 4.7 bei und möchten nun eine vollständige Rechnung für den Termvergleich im dritten Fall angeben.

Dann ergeben sich explizit:

$$\begin{aligned}
 p_2(s, t) &= \frac{\gamma^2 e^{\gamma s} (1 + \gamma s)}{-\gamma^2 s e^{\gamma s}} + \frac{\gamma^2 e^{\gamma t} (1 - \gamma t)}{-\gamma^2 t e^{\gamma t}} \\
 &= - \left(\frac{1 + \gamma s}{s} + \frac{1 - \gamma t}{t} \right) \\
 &= - \frac{s + t}{st} \\
 p_4(s, t) &= -r_1(s) \left(\frac{\dot{\beta}(s)^2}{\dot{\alpha}(s)^2} - \frac{\dot{\beta}(s) r_3(s)}{\dot{\alpha}(s) r_1(s)} + \frac{r_3(s)^2}{4r_1(s)^2} \right) - r_2(s) + \frac{r_3(s)^2}{4r_1(s)} - \frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(t)^2} r_1(t) \\
 &= - \frac{(1 + \gamma s)^2}{s^2} r_1(s) - \frac{1 + \gamma s}{s} r_3(s) - r_2(s) - \frac{e^{-2\gamma t}}{t^2} r_1(t) \\
 r_1(t) &= \int_0^t D_{pp} \frac{\dot{\alpha}(s)^2}{\omega_0^4} + D_{qq} \alpha(s)^2 + 2D_{pq} \frac{\alpha(s) \dot{\alpha}(s)}{\omega_0^2} ds \\
 &= \frac{D_{pp}}{4\gamma^3} (e^{2\gamma t} (2\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1) - 1) + \frac{D_{qq}}{4\gamma} (e^{2\gamma t} (2\gamma^2 t^2 - 6\gamma t + 5) - 5) \\
 &\quad + \frac{D_{pq}}{\gamma^2} (e^{2\gamma t} (\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1) - 1) \\
 r_2(t) &= \int_0^t D_{pp} \frac{\dot{\beta}(s)^2}{\omega_0^4} + D_{qq} \beta(s)^2 + 2D_{pq} \frac{\beta(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^2} ds \\
 &= \frac{D_{pp}}{4\gamma} (e^{2\gamma t} (2\gamma^2 t^2 + 2\gamma t + 1) - 1) + \frac{D_{qq} \gamma}{4} (e^{2\gamma t} (2\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1) - 1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + D_{pq} e^{2\gamma t} \gamma^2 t^2 \\
r_3(t) &= 2 \int_0^t D_{pp} \frac{\dot{\alpha}(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^4} + D_{qq} \alpha(s) \beta(s) + D_{pq} \left(\frac{\dot{\alpha}(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^2} + \frac{\alpha(s) \dot{\beta}(s)}{\omega_0^2} \right) ds \\
&= D_{pp} e^{2\gamma t} (-t^2) + D_{qq} (e^{2\gamma t} (-\gamma^2 t^2 + 2\gamma t - 1) + 1) + D_{pq} e^{2\gamma t} (-2\gamma t^2 + 2t)
\end{aligned}$$

Somit ergibt sich für den Vergleich der einzelnen Terme von dem Kern von $S(s)S(t)R_0$ mit den Termen vom Kern von $S(s+t)R_0$.

1. Zeitabhängige Konstante vor dem Integral

$$\begin{aligned}
\left(\frac{e^{2\gamma(s+t)} \omega_0^4}{2\pi |\dot{\alpha}(s)| |\dot{\alpha}(t)| p_2(s,t)} \right)^d &= \left(\frac{e^{2\gamma(s+t)} \gamma^4}{2\pi \gamma^2 t e^{\gamma t} \gamma^2 s e^{\gamma s}} \frac{st}{s+t} \right)^d \\
&= \left(\frac{e^{\gamma(s+t)}}{2\pi(s+t)} \right)^d \\
&= \left(\frac{e^{2\gamma(s+t)} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}(s+t)|} \right)^d
\end{aligned}$$

2. Term mit $e^{-i \frac{(x_0 - y_0) \cdot (x+y)}{2}} \dots$

$$\begin{aligned}
-\frac{\nu(s)\nu(t)}{p_2(s,t)} &= \frac{-\gamma^2 e^{2\gamma s} (-\gamma^2 e^{2\gamma t})}{-\gamma^2 s e^{\gamma s} (-\gamma^2 t e^{\gamma t})} \frac{st}{s+t} \\
&= \frac{e^{\gamma(s+t)}}{s+t} \\
&= \nu(s+t)
\end{aligned}$$

3. Term mit $e^{-i \frac{(x_0 + y_0) \cdot (x_0 - y_0)}{2}} \dots$

$$\begin{aligned}
\frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} + \frac{\omega_0^2 \nu(t)}{\dot{\alpha}(t) p_2(s,t)} &= \frac{\gamma^2 e^{\gamma t} (1 + \gamma t)}{-\gamma^2 t e^{\gamma t}} + \frac{-\gamma^2 e^{2\gamma t}}{(-\gamma^2 t e^{\gamma t})^2} \left(-\frac{st}{s+t} \right) \\
&= -\frac{1 + \gamma t}{t} + \frac{s}{(s+t)t} \\
&= -\frac{1 + \gamma(s+t)}{s+t} \\
&= \frac{\dot{\beta}(s+t)}{\dot{\alpha}(s+t)}
\end{aligned}$$

4. Term mit $e^{-i \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2}} \dots$

$$\frac{\omega_0^2 \alpha(s)}{\alpha(s)} + \frac{\omega_0^2 \nu(s)}{\dot{\alpha}(s) p_2} = \frac{\gamma^2 e^{\gamma s} (1 - \gamma s)}{-\gamma^2 s e^{\gamma s}} + \frac{t}{(s+t)s}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1-\gamma s}{s} + \frac{t}{(s+t)s} \\
&= -\frac{1-\gamma(s+t)}{s+t} \\
&= \frac{\omega_0^2 \alpha(s+t)}{\dot{\alpha}(s+t)}
\end{aligned}$$

5. Term mit $e^{-i\frac{(x_0+y_0)(x-y)}{2}\dots}$

$$\begin{aligned}
-\frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)\dot{\alpha}(t)p_2(s,t)} &= -\frac{\gamma^4}{(-\gamma^2 s e^{\gamma s})(-\gamma^2 t e^{\gamma t})} \left(-\frac{st}{s+t} \right) \\
&= \frac{e^{-\gamma(s+t)}}{s+t} \\
&= -\frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(s+t)}
\end{aligned}$$

6. Term mit $e^{(x-y)^2\dots}$

$$\begin{aligned}
&-\frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2} r_1(s) + \frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2} \frac{p_4(s,t)}{p_2(s,t)^2} + \frac{2\omega_0^4 \mu(s)}{\dot{\alpha}(s)^2 p_2(s,t)} r_1(s) \\
&= -\frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2 p_2(s,t)^2} (p_2(s,t)^2 r_1(s) - p_4(s,t) - 2p_2(s,t)\mu(s)r_1(s)) \\
&= -\frac{\gamma^4 t^2 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2} \left(\frac{(s+t)^2}{s^2 t^2} r_1(s) + \frac{(1+\gamma s)^2}{s^2} r_1(s) + \frac{1+\gamma s}{s} r_3(s) + \frac{1}{t^2 e^{2\gamma t}} r_1(t) \right) \\
&\quad -\frac{\gamma^4 t^2 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2} \frac{2(s+t)}{st} \left(-\frac{1+\gamma s}{s} r_1(s) - \frac{r_3(s)}{2} \right) \\
&= -\frac{\gamma^4 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2 s^2} ((s+t)^2 + t^2(1+\gamma s)^2 - 2t(s+t)(1+\gamma s)) r_1(s) \\
&\quad -\frac{\gamma^4 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2 s^2} s^2 t^2 r_2(s) \\
&\quad -\frac{\gamma^4 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2 s^2} [((1+\gamma s)st^2 - st(s+t))r_3(s) + s^2 e^{-2\gamma t} r_1(t)] \\
&= -\frac{\gamma^4 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2 s^2} [(s^2 + \gamma^2 s^2 t^2 - 2\gamma s^2 t) r_1(s) + s^2 t^2 r_2(s)] \\
&\quad -\frac{\gamma^4 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(s+t)^2 s^2} (\gamma s^2 t^2 - s^2 t) r_3(s) - \frac{\gamma^4}{\dot{\alpha}(s+t)^2} r_1(t) \\
&= -\frac{\gamma^4}{\dot{\alpha}(s+t)^2} [(1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) + t^2 e^{2\gamma t} r_2(s) + (\gamma t^2 - t) e^{2\gamma t} r_3(s)] \\
&\quad -\frac{\gamma^4}{\dot{\alpha}(s+t)^2} r_1(t)
\end{aligned}$$

Wir werden nun zeigen, dass der Ausdruck hinter $-\frac{\gamma^4}{\dot{a}(s+t)^2}$ identisch mit $r_1(s+t)$ ist.

Aufgrund der Länge der Terme betrachten wir nun diesen Term einzeln für D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} .

(a) D_{pp} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{pp}\text{-Term von} \\
& (1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) + t^2 e^{2\gamma t} r_2(s) + (\gamma t^2 - t) e^{2\gamma t} r_3(s) + r_1(t) \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [(2\gamma^2 s^2 - 2\gamma s + 1)(1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) + \gamma^2 t^2 (2\gamma^2 s^2 + 2\gamma s + 1)] \\
& - \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} 4\gamma^3 s^2 (\gamma t^2 - t) \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma^3} [1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t + \gamma^2 t^2 - (2\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1)] - \frac{1}{4\gamma^3} \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} (2\gamma^2 t^2 + 2\gamma^2 s^2 + 4\gamma^2 st - 2\gamma s - 2\gamma t + 1) - \frac{1}{4\gamma^3} \\
= & \frac{1}{4\gamma^3} [e^{2\gamma(s+t)} (2\gamma^2 (s+t)^2 - 2\gamma (s+t) + 1) - 1] \\
= & D_{pp}\text{-Term von } r_1(s+t)
\end{aligned}$$

(b) D_{qq} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{qq}\text{-Term von} \\
& (1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) + t^2 e^{2\gamma t} r_2(s) + (\gamma t^2 - t) e^{2\gamma t} r_3(s) + r_1(t) \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} [(2\gamma^2 s^2 - 6\gamma s + 5)(1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) + \gamma^2 t^2 (2\gamma^2 s^2 - 2\gamma s + 1)] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} 4\gamma (-\gamma 2s^2 + 2\gamma s - 1) (\gamma t^2 - t) \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} [5(1 + \gamma^2 t^2 - 5\gamma t) + \gamma^2 t^2 - 4\gamma (\gamma t^2 - t) - (2\gamma^2 t^2 - 6\gamma t + 5)] \\
& - \frac{5}{4\gamma} \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} (2\gamma^2 s^2 + 2\gamma^2 t^2 + 4\gamma^2 st - 6\gamma s - 6\gamma t + 5) - \frac{5}{4\gamma} \\
= & \frac{1}{4\gamma} [e^{2\gamma(s+t)} (2\gamma^2 (s+t)^2 - 6\gamma (s+t) + 5) - 5] \\
= & D_{qq}\text{-Term von } r_1(s+t)
\end{aligned}$$

(c) D_{pq} -Term

D_{pq} -Term von

$$\begin{aligned}
& (1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) + t^2 e^{2\gamma t} r_2(s) + (\gamma t^2 - t) e^{2\gamma t} r_3(s) + r_1(t) \\
= & e^{2\gamma(s+t)} \left[\left(s^2 - \frac{2s}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} \right) (1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) + \gamma^2 s^2 t^2 \right] \\
& + e^{2\gamma(s+t)} (-2\gamma s^2 + 2s) (\gamma t^2 - t) \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{\gamma^2} [1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t - (\gamma 2t^2 - 2\gamma t + 1)] - \frac{1}{\gamma^2} \\
= & e^{2\gamma(s+t)} \left(s^2 + t^2 + 2st - \frac{2s}{\gamma} - \frac{2t}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} \right) - \frac{1}{\gamma^2} \\
= & \frac{1}{\gamma^2} [e^{2\gamma(s+t)} (\gamma^2 (s+t)^2 - 2\gamma (s+t) + 1) - 1] \\
= & D_{pq}\text{-Term von } r_1(s+t)
\end{aligned}$$

Somit gilt also, dass

$$(1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) + t^2 e^{2\gamma t} r_2(s) + (\gamma t^2 - t) e^{2\gamma t} r_3(s) + r_1(t) = r_1(s+t)$$

Wir können also nun folgern:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2} r_1(s) + \frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s)^2} \frac{p_4(s, t, x, y, x_0, y_0)}{p_2(s, t)^2} + \frac{2\omega_0^4 \mu(s)}{\dot{\alpha}(s)^2 p_2(s, t)} r_1(s) \\
= & -\frac{\gamma^4}{\dot{\alpha}(s+t)^2} [(1 + \gamma^2 t^2 - 2\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) + t^2 e^{2\gamma t} r_2(s) + (\gamma t^2 - t) e^{2\gamma t} r_3(s)] \\
& - \frac{\gamma^4}{\dot{\alpha}(s+t)^2} r_1(t) \\
= & -\frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}(s+t)^2} r_1(s+t)
\end{aligned}$$

7. Term mit $e^{(x_0-y_0)^2} \dots$

$$\begin{aligned}
& -r_1(t) \mu(t)^2 - \frac{\lambda(t)}{4r_1(t)} + \frac{\nu(t)^2 p_4(s, t)}{p_2(s, t)^2} - \frac{2\nu(t) \mu(t) \omega_0^2 r_1(t)}{\dot{\alpha}(t) p_2(s, t)} \\
= & -r_1(t) \left(\frac{\dot{\beta}(t)^2}{\dot{\alpha}(t)^2} - \frac{r_3(t) \dot{\beta}(t)}{r_1(t) \dot{\alpha}(t)} + \frac{r_3(t)^2}{4r_1(t)^2} \right) - r_2(t) + \frac{r_3(t)^2}{4r_1(t)} \\
& + \frac{\gamma^4 e^{4\gamma t}}{\dot{\alpha}(t)^2 p_2(s, t)^2} \left(-\frac{\dot{\beta}(s)^2}{\dot{\alpha}(s)^2} r_1(s) + \frac{\dot{\beta}(s)}{\dot{\alpha}(s)} r_3(s) - r_2(s) - \frac{\gamma^4}{\dot{\alpha}(t)^2} r_1(t) \right) \\
& + \frac{2\gamma^4 e^{2\gamma t}}{\dot{\alpha}(t)^2 p_2(s, t)} r_1(t) \left(\frac{\dot{\beta}(t)}{\dot{\alpha}(t)} - \frac{r_3(t)}{2r_1(t)} \right) \\
= & -\frac{(1+\gamma t)^2}{t^2} r_1(t) - \frac{1+\gamma t}{t} r_3(t) - r_2(t) - \frac{(1+\gamma s)^2}{s^2} \frac{e^{2\gamma t}}{t^2 p_2(s, t)^2} r_1(s)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1+\gamma s}{s} \frac{e^{2\gamma t}}{t^2 p_2(s,t)^2} r_3(s) - \frac{e^{2\gamma t}}{t^2 p_2(s,t)^2} r_2(s) - \frac{1}{t^4 p_2(s,t)^2} r_1(t) \\
& -\frac{2}{t^2 p_2(s,t)} \frac{1+\gamma t}{t} r_1(t) - \frac{1}{t^2 p_2(s,t)} r_3(t) \\
= & -r_1(t) \left(\frac{(1+\gamma t)^2}{t^2} + \frac{s^2}{t^2 (s+t)^2} - \frac{2s(1+\gamma t)}{t^2 (s+t)} \right) - r_3(t) \left(\frac{1+\gamma t}{t} - \frac{s}{t(s+t)} \right) \\
& -r_2(t) - \frac{e^{2\gamma t}}{(s+t)^2} \left((s+\gamma s)^2 r_1(s) + s^2 r_2(s) + (s+\gamma s) s r_3(s) \right) \\
= & -\frac{1}{(s+t)^2} \left[(1+2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) r_1(t) + (s+t)^2 r_2(t) \right] \\
& -\frac{1}{(s+t)^2} \left[((s+t) + \gamma(s+t))^2 r_3(t) + e^{2\gamma t} (1+\gamma s)^2 r_1(s) \right] \\
& -\frac{1}{(s+t)^2} \left[e^{2\gamma t} s^2 r_2(s) + e^{2\gamma t} s (s+\gamma s) r_3(s) \right]
\end{aligned}$$

Andererseits gilt:

$$\begin{aligned}
& -r_1(s+t) \mu(s+t)^2 - \frac{\lambda(s+t)}{4r_1(s+t)} \\
= & -\frac{\dot{\beta}(s+t)^2}{\dot{\alpha}(s+t)^2} r_1(s+t) + \frac{\dot{\beta}(s+t)}{\dot{\alpha}(s+t)} r_3(s+t) - r_2(s+t) \\
= & -\frac{(1+\gamma(s+t))^2}{(s+t)^2} r_1(s+t) - r_2(s+t) - \frac{1+\gamma(s+t)}{s+t} r_3(s+t) \\
= & -\frac{1}{(s+t)^2} (1+2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) r_1(s+t) \\
& -\frac{1}{(s+t)^2} \left[(s+t)^2 r_2(s+t) + ((s+t) + \gamma(s+t))^2 r_3(s+t) \right]
\end{aligned}$$

Wir betrachten nun ebenfalls die D_{pp} -, D_{qq} - und D_{pq} -Terme der Klammer-Ausdrücke und stellen fest, dass diese identisch sind.

(a) D_{pp} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{pp}\text{-Term von } (1+2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) r_1(t) + (s+t)^2 r_2(t) \\
& \quad + ((s+t) + \gamma(s+t))^2 r_3(t) + e^{2\gamma t} (1+\gamma s)^2 r_1(s) \\
& \quad + e^{2\gamma t} s^2 r_2(s) + e^{2\gamma t} s (s+\gamma s) r_3(s) \\
= & \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma^3} (2\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1) (1+2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) \\
& + \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma^3} \left[(2\gamma^4 t^2 + 2\gamma^3 t + \gamma^2) (s+t)^2 - 4\gamma^3 t^2 ((s+t) + \gamma(s+t))^2 \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma^3} [-(1 + \gamma s)^2 - \gamma^2 s^2] \\
& - \frac{1}{4\gamma^3} [1 + 2\gamma(s + t) + \gamma^2(s + t)^2 + \gamma^2(s + t)^2] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [(2\gamma^2 s^2 - 2\gamma s + 1)(1 + \gamma s)^2 + (2\gamma^4 s^2 + 2\gamma^3 s + \gamma^2) s^2] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [-4\gamma^3 s^2 s(1 + \gamma s)] \\
= & - \frac{1}{4\gamma^3} [1 + 2\gamma(s + t) + 2\gamma^2(s + t)^2] + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} (2\gamma^2(s + t)^2 - 2\gamma(s + t) + 1)(1 + 2\gamma(s + t) + \gamma^2(s + t)^2) \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} (2\gamma^4(s + t)^2 + 2\gamma^3(s + t) + \gamma^2)(s + t)^2 \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [-4\gamma^3(s + t)^2((s + t) + \gamma(s + t)^2)] \\
= & D_{pp}\text{-Term von } (1 + 2\gamma(s + t) + \gamma^2(s + t)^2) r_1(s + t) \\
& + (s + t)^2 r_2(s + t) + ((s + t) + \gamma(s + t)^2) r_3(s + t)
\end{aligned}$$

(b) D_{qq} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{qq}\text{-Term von } (1 + 2\gamma(s + t) + \gamma^2(s + t)^2) r_1(t) + (s + t)^2 r_2(t) \\
& + ((s + t) + \gamma(s + t)^2) r_3(t) + e^{2\gamma t} (1 + \gamma s)^2 r_1(s) \\
& + e^{2\gamma t} s^2 r_2(s) + e^{2\gamma t} s(s + \gamma s) r_3(s) \\
= & \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} (2\gamma^2 t^2 - 6\gamma t + 5)(1 + 2\gamma(s + t) + \gamma^2(s + t)^2) \\
& + \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} (2\gamma^4 t^2 - 2\gamma^3 t + \gamma^2)(s + t)^2 \\
& + \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} (-4\gamma^3 t^2 + 8\gamma^2 t - 4\gamma)((s + t) + \gamma(s + t)^2) \\
& + \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} [-5(1 + \gamma s)^2 - \gamma^2 s^2 + 4\gamma s(1 + \gamma s)] \\
& - \frac{1}{4\gamma} [5(1 + 2\gamma(s + t) + \gamma^2(s + t)^2) - 4\gamma((s + t) + \gamma(s + t)^2)] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} [(2\gamma^2 s^2 - 6\gamma s + 5)(1 + \gamma s)^2 + (2\gamma^4 s^2 - 2\gamma^3 s + \gamma^2) s^2] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} (-4\gamma^3 s^2 + 8\gamma^2 s - 4\gamma) s(1 + \gamma s)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4\gamma} [5 + 6\gamma(s+t) + 2\gamma^2(s+t)^2] + \frac{5e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} \\
&= \frac{e^2\gamma(s+t)}{4\gamma} (2\gamma^2(s+t)^2 - 6\gamma(s+t) + 5) (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) \\
&\quad + \frac{e^2\gamma(s+t)}{4\gamma} (2\gamma^4(s+t)^2 - 2\gamma^3(s+t) + \gamma^2) (s+t)^2 \\
&\quad + \frac{e^2\gamma(s+t)}{4\gamma} (-4\gamma^3(s+t)^2 + 8\gamma^2(s+t) - 4\gamma) ((s+t) + \gamma(s+t)^2) \\
&\quad - \frac{1}{4\gamma} [5(1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) + \gamma^2(s+t)^2] \\
&\quad - \frac{1}{4\gamma} [-4\gamma((s+t) + \gamma(s+t)^2)] \\
&= D_{qq}\text{-Term von } (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) r_1(s+t) \\
&\quad + (s+t)^2 r_2(s+t) + ((s+t) + \gamma(s+t)^2) r_3(s+t)
\end{aligned}$$

(c) D_{pq} -Term

$$\begin{aligned}
&D_{pq}\text{-Term von } (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) r_1(t) + (s+t)^2 r_2(t) \\
&\quad + ((s+t) + \gamma(s+t)^2) r_3(t) + e^{2\gamma t} (1 + \gamma s)^2 r_1(s) \\
&\quad + e^{2\gamma t} s^2 r_2(s) + e^{2\gamma t} s(s + \gamma s) r_3(s) \\
&= \frac{e^{2\gamma t}}{\gamma^2} [(\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1) (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) + \gamma^4 t^2 (s+t)^2] \\
&\quad + \frac{e^{2\gamma t}}{\gamma^2} [(-2\gamma^3 t^2 + 2\gamma^2 t) ((s+t) + \gamma(s+t)^2) - (1 + \gamma s)^2] \\
&\quad - \frac{1}{\gamma^2} [1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2] \\
&\quad + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} [(\gamma^2 s^2 - 2\gamma s + 1) (1 + \gamma s)^2 + \gamma^4 s^2 s^2] \\
&\quad + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} (-2\gamma^3 s^2 + 2\gamma^2 s) (1 + \gamma s) s \\
&= -\frac{1}{\gamma^2} (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(1+t)^2) + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} \\
&= \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} (\gamma^2(s+t)^2 - 2\gamma(s+t) + 1) (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) \\
&\quad + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} (s+t)^2 \gamma^4 (s+t)^2 \\
&\quad + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} ((s+t) + \gamma(s+t)^2) (-2\gamma^3(s+t)^2 + 2\gamma^2(s+t)) \\
&\quad - \frac{1}{\gamma^2} [1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2]
\end{aligned}$$

$$= D_{qq}\text{-Term von } (1 + 2\gamma(s+t) + \gamma^2(s+t)^2) r_1(s+t) \\ + (s+t)^2 r_2(s+t) + ((s+t) + \gamma(s+t)^2) r_3(s+t)$$

Also gilt:

$$-r_1(t) \mu(t)^2 - \frac{\lambda(t)}{4r_1(t)} + \frac{\nu(t)^2 p_4(s,t)}{p_2(s,t)^2} - \frac{2\nu(t) \mu(t) \omega_0^2 r_1(t)}{\dot{\alpha}(t) p_2(s,t)} \\ = -r_1(s+t) \mu(s+t)^2 - \frac{\lambda(s+t)}{4r_1(s+t)}$$

8. Term mit $e^{(x-y) \cdot (x_0-y_0)} \dots$

$$-\frac{2\omega_0^2 \nu(t) p_4(s,t)}{\dot{\alpha}(s) p_2(s,t)^2} + \frac{2\mu(t) \omega_0^4}{\dot{\alpha}(t) \dot{\alpha}(s) p_2(s,t)} r_1(t) - \frac{2\omega_0^2 \nu(t) \mu(s)}{\dot{\alpha}(s) p_2(s,t)} r_1(s) \\ = -\frac{2\omega_0^2 \nu(t)}{\dot{\alpha}(s) p_2(s,t)^2} \left[p_4(s,t) - \frac{\omega_0^2 \mu(t) p_2(s,t)}{\dot{\alpha}(t) \nu(t)} r_1(t) + p_2(s,t) \mu(s) r_1(s) \right] \\ = \frac{2e^{2\gamma t} s^2 t^2}{st(s+t)^2 e^{\gamma(s+t)}} \left[-\frac{(1+\gamma s)^2}{s^2} r_1(s) - \frac{1+\gamma s}{s} r_3(s) - r_2(s) - \frac{1}{t^2 e^{2\gamma t}} r_1(t) \right] \\ + \frac{2e^{2\gamma t} s^2 t^2}{st(s+t)^2 e^{\gamma(s+t)}} \left[\frac{s+t}{e^{2\gamma t} st} \left(\frac{1+\gamma t}{t} r_1(t) + \frac{1}{2} r_3(t) \right) \right] \\ + \frac{2e^{2\gamma t} s^2 t^2}{st(s+t)^2 e^{\gamma(s+t)}} \left[\frac{s+t}{st} \left(\frac{1+\gamma s}{s} r_1(s) + \frac{1}{2} r_3(s) \right) \right] \\ = \frac{e^{-\gamma(s+t)}}{(s+t)^2} [2(1+\gamma s)(1-\gamma t) e^{2\gamma t} r_1(s) - 2ste^{2\gamma t} r_2(s)] \\ + \frac{e^{-\gamma(s+t)}}{(s+t)^2} [e^{2\gamma t} (s-t-2\gamma st) r_3(s) + 2(1+\gamma(s+t)) r_1(t) + (s+t) r_3(t)]$$

Andererseits gilt wiederum:

$$\frac{2\omega_0^2 \mu(s+t)}{\dot{\alpha}(s+t)} r_1(s+t) \\ = \frac{e^{-\gamma(s+t)}}{(s+t)} \left(\frac{2(1+\gamma(s+t))}{s+t} r_1(s+t) - r_3(s+t) \right) \\ = \frac{e^{-\gamma(s+t)}}{(s+t)^2} (2(1+\gamma(s+t)) r_1(s+t) + (s+t) r_3(s+t))$$

Wir vergleichen ebenfalls die Terme in den Klammern für D_{pp} , D_{qq} und D_{pq} einzeln.

(a) D_{pp} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{pp}\text{-Term von } 2(1 + \gamma s)(1 - \gamma t)e^{2\gamma t}r_1(s) - 2ste^{2\gamma t}r_2(s) \\
& \quad + e^{2\gamma t}(s - t - 2\gamma st)r_3(s) + 2(1 + \gamma(s + t))r_1(t) + (s + t)r_3(t) \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} (2\gamma^2 s^2 - 2\gamma s + 1) 2(1 + \gamma s - \gamma t - \gamma^2 st) \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [-(2\gamma^4 s^2 + 2\gamma^3 s + \gamma^2) 2st - 4\gamma^3 s^2 (s - t - 2\gamma st)] \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma^3} [2(1 + \gamma s - \gamma t - \gamma^2 st) - \gamma^2 2st] \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma^3} [-(2\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1) 2(1 + \gamma s + \gamma t) + 4\gamma^3 t^2 (s + t)] \\
& - \frac{1}{4\gamma^3} 2(1 + \gamma(s + t)) \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [2 - 2\gamma(s + t)] - \frac{1}{4\gamma^3} [2 + 2\gamma(s + t)] \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} (2\gamma^2 (s + t)^2 - 2\gamma(s + t) + 1) 2(1 + \gamma(s + t)) \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma^3} [-4\gamma^3 (s + t)^2 (s + t)] \\
& - \frac{1}{4\gamma^3} [2 + 2\gamma(s + t)] \\
= & D_{pp}\text{-Term von } 2(1 + \gamma(s + t))r_1(s + t) + (s + t)r_3(s + t)
\end{aligned}$$

(b) D_{qq} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{qq}\text{-Term von } 2(1 + \gamma s)(1 - \gamma t)e^{2\gamma t}r_1(s) - 2ste^{2\gamma t}r_2(s) \\
& \quad + e^{2\gamma t}(s - t - 2\gamma st)r_3(s) + 2(1 + \gamma(s + t))r_1(t) + (s + t)r_3(t) \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} [(2\gamma^2 s^2 - 6\gamma s + 5)(2 + 2\gamma s - 2\gamma t - 2\gamma^2 st)] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} [-(2\gamma^4 s^2 - 2\gamma^3 s + \gamma^2) 2st] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} 4\gamma(-\gamma^2 s^2 + 2\gamma s - 1)(s - t - 2\gamma st) \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} [5(2 + 2\gamma s - 2\gamma t - 2\gamma^2 st) - \gamma^2 2st - 4\gamma(s - t - 2\gamma st)] \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} [-(2\gamma^2 t^2 - 6\gamma t + 5)(2 + 2\gamma s + 2\gamma t)] \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{4\gamma} [-4\gamma(-\gamma^2 t^2 + 2\gamma t - 1)(s + t)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4\gamma} [5(2 + 2\gamma s + 2\gamma t) - 4\gamma(s + t)] \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} [10 - 6\gamma(s + t)] - \frac{1}{4\gamma} [10 + 6\gamma(s + t)] \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} (2\gamma^2(s + t)^2 - 6\gamma(s + t) + 5) 2(1 + \gamma(s + t)) \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{4\gamma} [4\gamma(-\gamma^2(s + t)^2 + 2\gamma(s + t) - 1)(s + t)] \\
& - \frac{1}{4\gamma} [5(2 + 2\gamma(s + t)) - 4\gamma(s + t)] \\
= & D_{qq}\text{-Term von } 2(1 + \gamma(s + t))r_1(s + t) + (s + t)r_3(s + t)
\end{aligned}$$

(c) D_{pq} -Term

$$\begin{aligned}
& D_{pq}\text{-Term von } 2(1 + \gamma s)(1 - \gamma t)e^{2\gamma t}r_1(s) - 2ste^{2\gamma t}r_2(s) \\
& \quad e^{2\gamma t}(s - t - 2\gamma st)r_3(s) + 2(1 + \gamma(s + t))r_1(t) + (s + t)r_3(t) \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} [(\gamma^2 s^2 - 2\gamma s + 1)2(1 + \gamma s)(1 - \gamma t) - \gamma^4 s^2 2st] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} [(-2\gamma^3 s^2 + 2\gamma^2 s)(s - t - 2\gamma st)] \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{\gamma^2} [2(1 + \gamma s)(1 - \gamma t) - (\gamma^2 t^2 - 2\gamma t + 1)2(1 + \gamma s + \gamma t)] \\
& - \frac{e^{2\gamma t}}{\gamma^2} [-(-2\gamma^3 t^2 + 2\gamma^2 t)(s + t)] \\
& - \frac{1}{\gamma^2} [2 + 2\gamma(s + t)] \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} [2 - 2\gamma(s + t)] - \frac{1}{\gamma^2} [2 + 2\gamma(s + t)] \\
= & \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} [(\gamma^2(s + t)^2 - 2\gamma(s + t) + 1)2(1 + \gamma(s + t))] \\
& + \frac{e^{2\gamma(s+t)}}{\gamma^2} [(-2\gamma^3(s + t)^2 + 2\gamma^2(s + t))(s + t)] \\
& - \frac{1}{\gamma^2} [2 + 2\gamma(s + t)] \\
= & D_{pq}\text{-Term von } 2(1 + \gamma(s + t))r_1(s + t) + (s + t)r_3(s + t)
\end{aligned}$$

Zusammengefasst erhalten wir:

$$\begin{aligned}
& -\frac{2\omega_0^2\nu(t)p_4(s,t)}{\dot{\alpha}(s)p_2(s,t)^2} + \frac{2\mu(t)\omega_0^4}{\dot{\alpha}(t)\dot{\alpha}(s)p_2(s,t)}r_1(t) - \frac{2\omega_0^2\nu(t)\mu(s)}{\dot{\alpha}(s)p_2(s,t)}r_1(s) \\
= & \frac{2\omega_0^2\mu(s+t)}{\dot{\alpha}(s+t)}r_1(s+t)
\end{aligned}$$

Anhang C

Ausführlicher Beweis zur Proposition 4.17

In dem Beweis zur Proposition 4.17, der sich hier in diesem Anhang befindet, geben wir eine ausführlichere Rechnung als in Kapitel 4.4.1 an.

Proposition C.1

Sei $R_0 \in \mathcal{E}$. Dann ist $R(t)$ ein Operator aus \mathcal{E} .

Beweis:

Aufgrund der Splittung (4.10) und der Positivitätserhaltung der quantendynamischen Halbgruppe $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ (siehe Satz 4.16) können wir uns ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf den Fall $R_0 \geq 0$ und somit $R(t) \geq 0$ beschränken.

1. Teil:

Da $R_0 \in \mathcal{E}$, ist $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Nach Proposition 4.13 gilt dann, dass $R(t) \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ mit $\|R(t)\|_1 = \|R_0\|_1 < \infty$.

2. Teil:

In diesem Teil des Beweises zeigen wir, dass $Tr(|\nabla| R(t) |\nabla|) < \infty$.

Da für alle $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ gilt, dass

$$\begin{aligned} (|\nabla| R(t) |\nabla|) \psi(y) &= -(\nabla R(t) \nabla) \psi(y) \\ &= -\nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y, t) \nabla_y \psi(y) dy \\ &= \nabla_x \cdot \int_{\mathbb{R}^d} (\nabla_y \rho(x, y, t)) \psi(y) dy, \end{aligned}$$

erhalten wir für die Spur von $|\nabla| R(t) |\nabla|$ das folgende Integral.

$$Tr(|\nabla| R(t) |\nabla|) = \int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$$

Führen wir die Abkürzungen

$$C(t) := \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}(t)|} \right)^d \quad (\text{C.1})$$

$$q(w, z, t) := e^{-\frac{\lambda(t)|w-z|^2}{4r_1(t)}} \rho_0(w, z) \quad (\text{C.2})$$

ein und benutzen die Darstellung (4.8) für $\rho(x, y, t)$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} & \nabla_y \rho(x, y, t) \\ = & \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}}(x-y)|^2} \\ & e^{-i\left(\nu \frac{(w-z) \cdot (x+y)}{2} + \frac{\beta}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (x-y)}{2}\right)} \\ & \left(-\frac{2r_1\omega_0^2\mu}{\dot{\alpha}}(w-z) + \frac{2r_1\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2}(x-y) - i\left(\frac{\nu}{2}(w-z) - \frac{\omega_0^2\alpha}{\dot{\alpha}}y + \frac{\omega_0^2}{2\dot{\alpha}}(w+z)\right) \right) dw dz \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t) \\ = & \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}}(x-y)|^2} \\ & e^{-i\left(\nu \frac{(w-z) \cdot (x+y)}{2} + \frac{\beta}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (x-y)}{2}\right)} \frac{2dr_1\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} dw dz \\ & + \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z) - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}}(x-y)|^2} \\ & \left(-\frac{2r_1\omega_0^2\mu}{\dot{\alpha}}(w-z) + \frac{2r_1\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2}(x-y) - i\left(\frac{\nu}{2}(w-z) - \frac{\omega_0^2\alpha}{\dot{\alpha}}y + \frac{\omega_0^2}{2\dot{\alpha}}(w+z)\right) \right) \\ & \left(\frac{2r_1\omega_0^2\mu}{\dot{\alpha}}(w-z) - \frac{2r_1\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2}(x-y) - i\left(\frac{\nu}{2}(w-z) + \frac{\omega_0^2\alpha}{\dot{\alpha}}x - \frac{\omega_0^2}{2\dot{\alpha}}(w+z)\right) \right) \\ & e^{-i\left(\nu \frac{(w-z) \cdot (x+y)}{2} + \frac{\beta}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2} + \frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} \frac{(x+y) \cdot (x-y)}{2} - \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (x-y)}{2}\right)} dw dz \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} \\ = & \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z)|^2} e^{-i\left(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\beta}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}\right)} \\ & \left(2d \frac{r_1\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} - \left(\frac{4r_1^2\omega_0^4\mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\nu^2}{4} \right) (w-z)^2 + \frac{\omega_0^4}{4\dot{\alpha}^2} (w+z)^2 \right) \\ & + \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z)|^2} e^{-i\left(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\beta}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2}\right)} \\ & \left(-i \frac{2r_1\omega_0^4\mu}{\dot{\alpha}^2} (w+z) \cdot (w-z) \right) dw dz \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z)|^2} e^{-i(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2})} \\
& \quad \left(-\frac{\omega_0^4 \alpha}{\dot{\alpha}^2} (w+z) + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu}{\dot{\alpha}^2} (w-z) \right) \cdot x dw dz \\
& + \int_{\mathbb{R}^{2d}} Cq(w, z) e^{-r_1|\mu(w-z)|^2} e^{-i(\nu(w-z) \cdot x + \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{(w+z) \cdot (w-z)}{2})} \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} x^2 dw dz
\end{aligned}$$

Mit der Variablentransformation $v := \nu(t)(w-z)$, $s := \frac{\omega_0^2}{\dot{\alpha}(t)}(w+z)$, den Abkürzungen

$$\sigma(t) := \frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2} \quad (\text{C.3})$$

$$\tau(t) := \frac{1}{\nu(t)} = \frac{\dot{\alpha}(t)}{\dot{\alpha}(t)\beta(t) - \alpha(t)\dot{\beta}(t)} = -\frac{\dot{\alpha}(t)}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \quad (\text{C.4})$$

$$C_1(t) := C(t) \left(\frac{|\sigma(t)| |\tau(t)|}{2} \right)^d \quad (\text{C.5})$$

und anschließender Integration über x , erhalten wir

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \\
= & C_1 \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-ix \cdot v} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \\
& \quad \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} - \left(\frac{4r_1^2 \omega_0^4 \mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\nu^2}{4} \right) \tau^2 v^2 + \frac{\omega_0^4 \sigma^2}{4 \dot{\alpha}^2} s^2 - i \frac{2r_1 \omega_0^4 \mu \sigma \tau}{\dot{\alpha}^2} s \cdot v \right) dx ds dv \\
& + C_1 \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-ix \cdot v} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \\
& \quad \left(-\frac{\omega_0^4 \alpha \sigma}{\dot{\alpha}^2} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) \cdot x dx ds dv \\
& + C_1 \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-ix \cdot v} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \\
& \quad \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} x^2 dx ds dv \\
=_{x\text{-Int}} & (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \delta_d(v) \\
& \quad \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} - \left(\frac{4r_1^2 \omega_0^4 \mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\nu^2}{4} \right) \tau^2 v^2 + \frac{1}{4} s^2 - i \frac{2r_1 \omega_0^2 \mu \tau}{\dot{\alpha}} s \cdot v \right) ds dv \\
& + (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) i \delta_d^{(1)}(v) \\
& \quad \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) ds dv
\end{aligned}$$

$$-(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \delta_d^{(2)}(v) \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} ds dv$$

Hierbei wurden für $v = (v_1, v_2, \dots, v_d)^T \in \mathbb{R}^d$ die Ausdrücke $\delta_d(v)$, $\delta_d^{(1)}(v)$ und $\delta_d^{(2)}(v)$ definiert.

$$\delta_d(v) := \prod_{k=1}^d \delta(v_k) \quad (\text{C.6})$$

$$\delta_d^{(1)}(v) := \begin{pmatrix} \delta^{(1)}(v_1) \prod_{k=1, k \neq 1}^d \delta(v_k) \\ \delta^{(1)}(v_2) \prod_{k=1, k \neq 2}^d \delta(v_k) \\ \vdots \\ \delta^{(1)}(v_d) \prod_{k=1, k \neq d}^d \delta(v_k) \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

$$\delta_d^{(2)}(v) := \sum_{k=1}^d \left(\delta^{(2)}(v_k) \prod_{j=1, j \neq k}^d \delta(v_j) \right) \quad (\text{C.8})$$

δ , $\delta^{(1)}$ und $\delta^{(2)}$ sind die Diracsche Deltadistribution in einer Dimension sowie deren erste beiden distributionellen Ableitungen.

Als nächstes betrachten wir die Summanden von $\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$ einzeln, führen jeweils die v -Integration aus und machen die Substitution $x = \frac{\sigma s}{2}$.

1. Summand:

$$\begin{aligned} & (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \delta_d(v) \\ & \quad \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} - \left(\frac{4r_1^2 \omega_0^4 \mu^2}{\dot{\alpha}^2} + \frac{v^2}{4} \right) \tau^2 v^2 + \frac{1}{4} s^2 - i \frac{2r_1 \omega_0^2 \mu \tau}{\dot{\alpha}} s \cdot v \right) ds dv \\ =_{v\text{-Int}} & (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0 \left(\frac{\sigma s}{2}, \frac{\sigma s}{2} \right) \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} + \frac{1}{4} s^2 \right) ds \\ = & (2\pi)^d C_1 \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(2d \frac{r_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} + \frac{x^2}{\sigma^2} \right) dx \end{aligned}$$

2. Summand:

$$\begin{aligned} & (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) i \delta_d^{(1)}(v) \\ & \quad \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) ds dv \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} \operatorname{div}_v \left(e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) \right) \\
&\quad \delta_d(v) ds dv \\
&= -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \nabla_v \left(\rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \right) \\
&\quad \cdot e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) ds dv \\
&\quad -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \\
&\quad \left(-2 \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2 \right) \tau^2 v - i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} s \right) \cdot \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) \\
&\quad -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \\
&\quad i \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} ds dv \\
&= -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \frac{\tau}{2} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{\left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2}\right)} \\
&\quad \cdot e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s + i \frac{4r_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} v \right) ds dv \\
&\quad -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0 \left(\frac{\sigma s}{2}, \frac{\sigma s}{2} \right) \left(-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} s \cdot \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s \right) + i \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} \right) ds \\
&= -i(2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\tau}{2} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{\left(\frac{\sigma s}{2}, \frac{\sigma s}{2}\right)} \cdot \left(-\frac{\omega_0^2 \alpha}{\dot{\alpha}} s \right) ds \\
&\quad -i(2\pi)^d C_1 \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(i \frac{2\dot{\beta} \omega_0^4 \alpha \tau}{\dot{\alpha}^3} x^2 + i \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} \right) dx \\
&= -i(2\pi)^d C_1 \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\tau}{2} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x, x)} \cdot \left(-\frac{2\omega_0^4 \alpha}{\dot{\alpha}^2} x \right) dx \\
&\quad -i(2\pi)^d C_1 \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(i \frac{2\dot{\beta} \omega_0^4 \alpha \tau}{\dot{\alpha}^3} x^2 + i \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} \right) dx
\end{aligned}$$

3. Summand:

$$\begin{aligned}
&- (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2\right) \tau^2 v^2} e^{-i \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} \frac{\sigma \tau}{2} v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \delta_d^{(2)}(v) \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} ds dv \\
&= - (2\pi)^d C_1 \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \Delta_v \left(e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \right) dsdv \\
= & - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \Delta_v \left(\rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \right) e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} \\
& e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} dsdv \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) 2\nabla_v \left(\rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \right) \\
& \cdot \nabla_v \left(e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} \right) dsdv \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) \\
& \Delta_v \left(e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} \right) dsdv \\
= & - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \frac{\tau^2}{4} [(\Delta_x - 2\nabla_y \cdot \nabla_x + \Delta_y) \rho(x, y)]_{\left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2}\right)} \\
& e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} dsdv \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \tau [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{\left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2}\right)} e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} \\
& \cdot e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} \left(-2 \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2 \right) \tau^2 v - i \frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2\dot{\alpha}} s \right) dsdv \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} \\
& \left(- \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2 \right) \tau^2 2v - i \frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2\dot{\alpha}} s \right)^2 dsdv \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(v) \rho_0 \left(\frac{\sigma s + \tau v}{2}, \frac{\sigma s - \tau v}{2} \right) e^{-\left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2\right)\tau^2 v^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2}v \cdot s} \\
& \left(- \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2 \right) \right) 2d\tau^2 dsdv \\
= & - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\tau^2}{4} [(\Delta_x - 2\nabla_y \cdot \nabla_x + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{\left(\frac{\sigma s}{2}, \frac{\sigma s}{2}\right)} ds \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \tau [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{\left(\frac{\sigma s}{2}, \frac{\sigma s}{2}\right)} \cdot \left(-i \frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2\dot{\alpha}} s \right) ds \\
& - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0 \left(\frac{\sigma s}{2}, \frac{\sigma s}{2} \right) \left(\left(-i \frac{\dot{\beta}\sigma\tau}{2\dot{\alpha}} s \right)^2 - \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1\mu^2 \right) 2d\tau^2 \right) ds
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -(2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\tau^2}{4} [(\Delta_x - 2\nabla_y \cdot \nabla_x + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx \\
&\quad - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \tau [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot \left(-i \frac{\dot{\beta} \tau}{\dot{\alpha}} x \right) dx \\
&\quad - (2\pi)^d C_1 \frac{\omega_0^4 \alpha^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) \left(\left(-i \frac{\dot{\beta} \tau}{\dot{\alpha}} x \right)^2 - \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2 \right) 2d\tau^2 \right) dx
\end{aligned}$$

Die Konstante vor dem Integral lässt sich zu 1 vereinfachen.

$$\begin{aligned}
C_1 (2\pi)^d \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d &= \left(\frac{e^{2\gamma t} \omega_0^2}{2\pi |\dot{\alpha}|} \right)^d \left(\frac{|\sigma| |\tau|}{2} \right)^2 (2\pi)^d \left(\frac{2}{|\sigma|} \right)^d \\
&= e^{2d\gamma t} \left(\frac{\omega_0^2}{|\dot{\alpha}|} \right)^d \left(\frac{|\beta \dot{\alpha} - \alpha \dot{\beta}|}{|\dot{\alpha}|} \right)^{-d} \\
&= e^{2d\gamma t} \frac{\omega_0^{2d}}{|\beta \dot{\alpha} - \alpha \dot{\beta}|^d} \\
&= 1
\end{aligned}$$

Addieren wir die drei Terme, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \\
&= \left(\frac{2dr_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} + \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} + \frac{2d\omega_0^4 \alpha^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2 \right) \right) \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx \\
&\quad + \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{2\dot{\beta} \omega_0^4 \alpha \tau}{\dot{\alpha}^3} + \frac{\omega_0^4 \alpha^2 \dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^4} \right) \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) x^2 dx \\
&\quad + i \left(\frac{\tau \omega_0^4 \alpha}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\omega_0^4 \alpha^2 \dot{\beta} \tau^2}{\dot{\alpha}^3} \right) \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot x dx \\
&\quad - \frac{\omega_0^4 \alpha^2 \tau^2}{4\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx
\end{aligned}$$

Fassen wir als nächstes die zeitabhängigen Terme vor den Integralen zusammen.

1.

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{2dr_1 \omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} + \frac{4dr_1 \omega_0^4 \alpha \mu \tau}{\dot{\alpha}^2} + \frac{2d\omega_0^4 \alpha^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{\lambda}{4r_1} + r_1 \mu^2 \right) \right) \\
&= \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(r_1 + \frac{2\alpha \dot{\alpha}}{-\omega_0^2 e^{2\gamma t}} r_1 \left(\frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} - \frac{r_3}{2r_1} \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4 e^{4\gamma t}} \left(r_2 - \frac{r_3^2}{4r_1} + r_1 \left(\frac{\dot{\beta}^2}{\dot{\alpha}^2} - \frac{\dot{\beta} r_3}{\dot{\alpha} r_1} + \frac{r_3^2}{4r_1^2} \right) \right) \\
& = \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(r_1 - \frac{2\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2 e^{2\gamma t}} r_1 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2 e^{2\gamma t}} r_3 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4 e^{4\gamma t}} r_2 + \frac{\dot{\beta}^2 \alpha^2}{\omega_0^4 e^{4\gamma t}} r_1 - \frac{\alpha^2 \dot{\beta} \dot{\alpha}}{\omega_0^4 e^{4\gamma t}} r_3 \right) \\
& = \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right)
\end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{2\dot{\beta}\omega_0^4\alpha\tau}{\dot{\alpha}^3} + \frac{\omega_0^4\alpha^2\dot{\beta}^2\tau^2}{\dot{\alpha}^4} \right) \\
& = \frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(1 + \frac{2\alpha\dot{\beta}}{\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta}} + \frac{\alpha^2\dot{\beta}^2}{(\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2} \right) \\
& = \frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2 (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2} \left((\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2 + 2\alpha\dot{\beta} (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta}) + \alpha^2\dot{\beta}^2 \right) \\
& = \frac{\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2 (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2} \dot{\alpha}^2 \beta^2 \\
& = \frac{\beta^2}{e^{4\gamma t}}
\end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned}
\frac{\tau\omega_0^4\alpha}{\dot{\alpha}^2} + \frac{\omega_0^4\alpha^2\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}^3} & = \frac{\omega_0^4\alpha}{\dot{\alpha}^2} \left(\frac{\dot{\alpha}}{\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta}} + \frac{\alpha\dot{\beta}\dot{\alpha}^2}{\dot{\alpha} (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2} \right) \\
& = \frac{\omega_0^4\alpha}{\dot{\alpha} (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2} (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta} + \alpha\dot{\beta}) \\
& = \frac{\alpha\beta}{e^{4\gamma t}}
\end{aligned}$$

4.

$$\begin{aligned}
-\frac{\omega_0^4\alpha^2\tau^2}{4\dot{\alpha}^2} & = -\frac{\omega_0^4\alpha^2\dot{\alpha}^2}{4\dot{\alpha}^2 (\dot{\alpha}\beta - \alpha\dot{\beta})^2} \\
& = -\frac{\alpha^2}{4e^{4\gamma t}}
\end{aligned}$$

Mit diesen Vereinfachungen lässt sich das Integral $\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$ in der folgenden Form schreiben.

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \\
&= \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right) \\
& \quad \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx \\
& + \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) x^2 dx \\
& + i\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot x dx \\
& - \frac{1}{4} \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx
\end{aligned}$$

Aufgrund der Darstellung $\rho_0(x, y) = \sum_k \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k}(y)$ mit $\{\lambda_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset l^1(\mathbb{R})$, können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass

$$\rho_0(x, y) = \phi(x) \overline{\phi}(y).$$

Damit erhalten wir die Formeln:

1.

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot x dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) (\phi(x) \overline{\phi}(y))]_{(x,x)} \cdot x dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} [\overline{\phi}(y) \nabla_x \phi(x) - \phi(x) \nabla_y \overline{\phi}(y)]_{(x,x)} \cdot x dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} (\overline{\phi}(x) \nabla_x \phi(x) - \phi(x) \nabla_x \overline{\phi}(x)) \cdot x dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} [\Re(\phi(x)) - i\Im(\phi(x))] [\nabla_x \Re(\phi(x)) + i\nabla_x \Im(\phi(x))] \cdot x dx \\
& \quad - \int_{\mathbb{R}^d} [\Re(\phi(x)) + i\Im(\phi(x))] [\nabla_x \Re(\phi(x)) - i\nabla_x \Im(\phi(x))] \cdot x dx \\
&= 2i \int_{\mathbb{R}^d} [\Re(\phi(x)) \nabla_x \Im(\phi(x)) - \Im(\phi(x)) \nabla_x \Re(\phi(x))] \cdot x dx \\
&= 2i \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\overline{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx
\end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) (\phi(x) \bar{\phi}(y))]_{(x,x)} dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} [\bar{\phi}(y) \Delta_x \phi(x) - 2(\nabla_x \phi(x)) \cdot (\nabla_y \bar{\phi}(y)) + \phi(x) \Delta_y \bar{\phi}(y)]_{(x,x)} dx \\
&= -4 \int_{\mathbb{R}^d} (\nabla_x \phi(x)) \cdot (\nabla_x \bar{\phi}(x)) dx \\
&= -4 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx
\end{aligned}$$

Verwenden wir diese beiden Formeln, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
& \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) x^2 dx + i\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} \cdot x dx \\
& - \frac{1}{4} \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x,x)} dx \\
&= \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx - 2\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\
& + \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx
\end{aligned}$$

Mit Hilfe der Hölderschen Ungleichung lässt sich zeigen, dass

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx &\leq \left| \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}^d} (\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x) - \phi(x) \nabla_x \bar{\phi}(x)) \cdot x dx \right| \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^d} |\bar{\phi}(x) x| \cdot |\nabla_x \phi(x)| + |\phi(x) x| \cdot |\nabla_x \bar{\phi}(x)| dx \\
&\leq \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

gilt.

Benutzen wir diese Ungleichung, so gilt:

$$\begin{aligned}
& -\infty \\
&< \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx + \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \\
& - 2|\alpha||\beta| e^{-4\gamma t} \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx + \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \\
&\quad - 2\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\
&\leq \beta^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx + \alpha^2 e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \\
&\quad + 2|\alpha||\beta| e^{-4\gamma t} \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&< \infty
\end{aligned}$$

Hierbei wurde benutzt, dass die Ausdrücke $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x)|^2 dx$, $\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x) x|^2 dx$ beziehungsweise $\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x \phi(x)|^2 dx$ der Spur von R_0 , der Spur von $|x| R_0 |x|$ beziehungsweise der Spur von $|\nabla| R_0 |\nabla|$ entsprechen und dass sie nach Voraussetzung endlich sind.

Somit können wir das Integral $\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx$ nach oben und nach unten abschätzen.

Weiterhin gilt, dass

$$\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx \geq 0$$

ist.

Zusammenfassend bekommen wir also die folgende Aussage:

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho(x, y, t)]_{(x,x)} dx = \text{Tr}(|\nabla| R(t) |\nabla|) < \infty$$

3. Teil:

Wir zeigen in diesem Teil, dass $\text{Tr}(|x| R(t) |x|) < \infty$.

Wir wählen dieses Mal die Darstellung (4.7) für $\rho(x, y, t)$ und betrachten das Integral $\int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx$, welches der Spur von $|x| R(t) |x|$ entspricht.

Mit der Substitution $z := \nu(t) y_0$, anschließender x -Integration und z -Integration erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 \rho(x, x, t) dx \\
&= C |\tau|^2 \int_{\mathbb{R}^{3d}} |x|^2 e^{-(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1}) \tau^2 |z|^2} e^{-i\tau z \cdot (\nu x + \frac{\beta}{\alpha} x_0)} \\
&\quad \rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) dx dz dx_0 \\
&=_{x\text{-Int}} -C |\tau|^2 (2\pi)^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d^{(2)}(z) e^{-(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1}) \tau^2 |z|^2} e^{-i\frac{\beta\tau}{\alpha} z \cdot x_0} \\
&\quad \rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) dz dx_0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) \Delta_z \left(e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} \rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) \right) dz dx_0 \\
&= - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) \left(\Delta_z \left(\rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) \right) \right) e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} dz dx_0 \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) 2 \left(\nabla_z \left(\rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) \right) \right) \\
&\quad \quad \cdot \nabla_z \left(e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} \right) dz dx_0 \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) \rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) \Delta_z \left(e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} \right) dz dx_0 \\
&= - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) \left(\frac{\tau}{2} \right)^2 [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2})} \\
&\quad e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} dz dx_0 \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) 2 \frac{\tau}{2} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2})} \\
&\quad \quad \cdot e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} \left(-2 \left(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) \tau^2 z - i \frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}} x_0 \right) dz dx_0 \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \delta_d(z) \rho_0 \left(x_0 + \frac{\tau z}{2}, x_0 - \frac{\tau z}{2} \right) e^{-(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1})\tau^2|z|^2} e^{-i\frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}}z \cdot x_0} \\
&\quad \quad \left(\left(-2 \left(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) \tau^2 z - i \frac{\dot{\beta}\tau}{\dot{\alpha}} x_0 \right)^2 - 2 \left(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) d\tau^2 \right) dz dx_0 \\
&=_{z\text{-Int}} - \frac{\tau^2}{4} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 \\
&\quad + i \frac{\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} \cdot x_0 dx_0 \\
&\quad + \frac{\dot{\beta}^2\tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) x_0^2 dx_0 \\
&\quad + 2 \left(r_1\mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) d\tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) dx_0
\end{aligned}$$

Sei nun wieder ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\rho_0(x, y) = \phi(x) \bar{\phi}(y)$. Dann lässt sich analog zu Teil 2 zeigen, dass

$$\begin{aligned}
&< -\infty \\
&< - \frac{\tau^2}{4} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 \\
&\quad + i \frac{\dot{\beta}\tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} \cdot x_0 dx_0 + \frac{\dot{\beta}^2\tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) x_0^2 dx_0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_{x_0} \phi(x_0)|^2 dx_0 - 2 \frac{\dot{\beta} \tau^2}{\dot{\alpha}} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x_0) \nabla_{x_0} \phi(x_0)) \cdot x_0 dx_0 \\
&\quad + \frac{\dot{\beta}^2 \tau^2}{\dot{\alpha}^2} \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(x_0) x_0|^2 dx_0 \\
&< \infty
\end{aligned}$$

Da außerdem nach (3.41) $r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} = \frac{\dot{\beta}^2}{\dot{\alpha}^2} r_1 + r_2 - \frac{\dot{\beta}}{\dot{\alpha}} r_3 > 0$ ist, gilt:

$$0 \leq 2 \left(r_1 \mu^2 + \frac{\lambda}{4r_1} \right) d\tau^2 \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) dx_0 < \infty$$

Somit lässt sich $\int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx$ nach unten und nach oben abschätzen. Mit der Aussage

$$\int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx \geq 0$$

gilt dann:

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, x, t) |x|^2 dx < \infty$$

Also ist $0 \leq \text{Tr}(|x| R(t) |x|) < \infty$.

Somit ist $\|R(t)\|_{\mathcal{E}} < \infty$ und $R(t) \in \mathcal{E}$.

□

Anhang D

Berechnungen für $\dot{\alpha} = 0$

In diesem Anhang betrachten wir ausschließlich den Fall, dass $\dot{\alpha} = 0$. Dies tritt dann ein, wenn wir uns im ersten Fall (siehe (3.29)) mit $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ befinden.

Es ergeben sich explizit:

$$Q_1 \left(x, \xi, \frac{k\pi}{\omega} \right) = (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi \quad (\text{D.1})$$

$$Q_2 \left(x, \xi, \frac{k\pi}{\omega} \right) = (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x \quad (\text{D.2})$$

Im Fall, dass $\gamma \neq 0$ ist, erhalten wir außerdem mit Hilfe einiger Formeln aus [BSMM05]:

$$r_1 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = \frac{\omega^2}{4\omega_0^2} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right) \left(\frac{1}{\omega_0^2\gamma} D_{pp} + \left(\frac{5\gamma}{\omega^2} + \frac{1}{\gamma} \right) D_{qq} + \frac{4}{\omega^2} D_{pq} \right) \quad (\text{D.3})$$

$$r_2 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = \frac{\omega^2}{4\omega_0^2} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right) \left(\left(\frac{5\gamma}{\omega^2} + \frac{1}{\gamma} \right) D_{pp} + \frac{\omega_0^4}{\omega^2\gamma} D_{qq} + \frac{4\omega_0^2}{\omega^2} D_{pq} \right) \quad (\text{D.4})$$

$$r_3 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = -\frac{1}{\omega_0^2} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right) D_{pp} \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned} \lambda \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) &= \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right)^2}{4} \left(\frac{1}{\omega_0^2\gamma^2} D_{pp}^2 + \frac{4\gamma^2 + \omega_0^2}{\gamma^2} D_{qq}^2 + \frac{16}{\omega_0^2} D_{pq}^2 \right) \\ &+ \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right)^2}{4} \left(\frac{2\omega_0^4 + 16\gamma^4 + 8\gamma^2\omega_0^2}{\omega_0^4\gamma^2} D_{pp}D_{qq} \right) \\ &+ \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right)^2}{4} \left(\frac{8\omega_0^2 + 16\gamma^2}{\omega_0^4\gamma} D_{pp}D_{pq} + \frac{8\omega_0^2 + 16\gamma^2}{\omega_0^2\gamma} D_{qq}D_{pq} \right) \quad (\text{D.6}) \end{aligned}$$

Für den Fall, dass $\gamma = 0$ ist, bekommen wir:

$$r_1 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = \frac{k\pi}{2\omega} \left(\frac{D_{pp}}{\omega^2} + D_{qq} \right) \quad (\text{D.7})$$

$$r_2 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = \frac{k\pi}{2\omega} (D_{pp} + \omega^2 D_{qq}) \quad (\text{D.8})$$

$$r_3 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = 0 \quad (\text{D.9})$$

$$\lambda \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) = \left(\frac{k\pi}{\omega^2} \right)^2 (D_{pp} + \omega^2 D_{qq})^2 \quad (\text{D.10})$$

Für unser $\rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right)$ erhalten wir die folgende Darstellung, die wir vereinfachen, indem wir die ξ_0 -Integration schon ausführen.

$$\begin{aligned} & \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \\ &= \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{4\pi^2} \right)^d \lambda^{-\frac{d}{2}} \\ & \quad \int_{\mathbb{R}^{4d}} e^{-\frac{r_1 |(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \xi_0|^2 + r_2 |(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2 - r_3 \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \xi_0 \right) \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right)}{\lambda} \\ & \quad e^{-i\xi_0 \cdot y_0} e^{i\xi \cdot (x-y)} \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) dy_0 dx_0 d\xi_0 d\xi \\ &= \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{2\pi} \right)^d \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \\ & \quad \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right) \right)} \\ & \quad e^{i\xi \cdot (x-y)} \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) dy_0 dx_0 d\xi \quad (\text{D.11}) \end{aligned}$$

D.1 Positivität von $R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right)$

Wir zeigen nun, dass für einen positiven selbstadjungierten Operator R_0 auch der Operator $R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right)$ im ersten Fall (siehe (3.29)) positiv ist.

Proposition D.1

Für einen positiven selbstadjungierten Hilbert-Schmidt-Operator R_0 ist auch $R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ positiv.

Beweis: Sei $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

$$\begin{aligned} & \langle \psi, R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \bar{\psi}(x) \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \psi(y) dx dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \stackrel{(D.11)}{=} \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{5d}} \bar{\psi}(x) e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) \\
& \quad e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right) \right)} e^{i\xi(x-y)} dy_0 dx_0 d\xi dx dy \\
& \stackrel{=\xi\text{-Int}}{=} \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{4d}} \bar{\psi}(x) e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{i\frac{r_3}{2r_1} y_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right)} \\
& \quad \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) \delta_d \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 - (x - y) \right) \\
& \quad \psi(y) dy_0 dx_0 dx dy \\
& = \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \\
& \quad \int_{\mathbb{R}^{4d}} \bar{\psi}(x) e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - \frac{w+z}{2}|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |w-z|^2} e^{i\frac{r_3}{2r_1} (w-z) \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - \frac{w+z}{2} \right)} \\
& \quad \rho_0(w, z) \delta_d \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} (w - z) - (x - y) \right) \psi(y) dw dz dx dy
\end{aligned}$$

Mit der Transformation

$$\begin{aligned}
g & := (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} w - x \\
h & := (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} z - y
\end{aligned}$$

erhalten wir:

$$\begin{aligned}
& \langle \psi, R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\
& = \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \\
& \quad \int_{\mathbb{R}^{4d}} \bar{\psi} \left(-g + (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} w \right) e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{g+h}{2} - \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \frac{w+z}{2}|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |w-z|^2} \\
& \quad e^{-i\frac{r_3}{2r_1} (w-z) \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{g+h}{2} - \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \frac{w+z}{2} \right)} \rho_0(w, z) \\
& \quad \delta_d(g - h) \psi \left(-h + (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} z \right) dw dz dg dh \\
& \stackrel{=g\text{-Int}}{=} \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \\
& \quad \int_{\mathbb{R}^{3d}} \bar{\psi} \left(-h + (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} w \right) e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} h - \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \frac{w+z}{2}|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |w-z|^2} \\
& \quad e^{-i\frac{r_3}{2r_1} (w-z) \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} h - \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \frac{w+z}{2} \right)} \rho_0(w, z)
\end{aligned}$$

$$\psi \left(-h + (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} z \right) dwdzdh$$

Wir definieren nun die Funktion

$$\begin{aligned} \kappa_h(z) := & \psi \left(-h + (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} z \right) e^{-\frac{1}{4r_1} \left(\left(\frac{(1-e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}})^2}{4} + \lambda \right) z^2 + (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) h \cdot z \right)} \\ & e^{-i\frac{r_3}{2r_1} \left(\frac{1-e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{2} z^2 - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} h \cdot z \right)} \end{aligned}$$

und benutzen die Potenzenentwicklung der Exponentialfunktion.

$$\begin{aligned} & \langle \psi, R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \\ &= \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{1}{4r_1} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} h^2} \overline{\kappa_h}(w) e^{\frac{\lambda - \frac{1}{4} \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right)^2}{2r_1} w \cdot z} \rho_0(w, z) \kappa_h(z) dwdzdh \\ &= \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{2^d (\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{\lambda - \frac{1}{4} \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right)^2}{2r_1} \right)^n}{n!} \\ & \quad \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{1}{4r_1} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} h^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \overline{\kappa_h}(w) (w \cdot z)^n \rho_0(w, z) \kappa_h(z) dwdzdh \end{aligned}$$

Da R_0 nach Voraussetzung ein positiver Operator ist, ist der Ausdruck

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} \overline{\kappa_h}(w) (w \cdot z)^n \rho_0(w, z) \kappa_h(z) dwdz \geq 0$$

und somit

$$\int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{1}{4r_1} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} h^2} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \overline{\kappa_h}(w) (w \cdot z)^n \rho_0(w, z) \kappa_h(z) dwdzdh \geq 0$$

Wir zeigen, dass $\frac{\lambda - \frac{1}{4} \left(1 - e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right)^2}{2r_1} \geq 0$.

Da $r_1 > 0$, bleibt nur noch zu zeigen, dass $\lambda \geq \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1 \right)^2}{4}$.

1. $\gamma = 0$

Für $\gamma = 0$ vereinfacht sich die Ungleichung zu $\lambda \geq 0$. Dies wurde schon gezeigt (siehe(3.40)).

2. $\gamma \neq 0$

$$\begin{aligned}
\lambda\left(\frac{k\pi}{\omega}\right) &= \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{1}{\omega_0^2\gamma^2} D_{pp}^2 + \frac{4\gamma^2 + \omega_0^2}{\gamma^2} D_{qq}^2 + \frac{16}{\omega_0^2} D_{pq}^2 \right) \\
&\quad + \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{2\omega_0^4 + 16\gamma^4 + 8\gamma^2\omega_0^2}{\omega_0^4\gamma^2} D_{pp}D_{qq} \right) \\
&\quad + \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{8\omega_0^2 + 16\gamma^2}{\omega_0^4\gamma} D_{pp}D_{pq} + \frac{8\omega_0^2 + 16\gamma^2}{\omega_0^2\gamma} D_{qq}D_{pq} \right) \\
&\quad + \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{4}{\gamma^2} D_{pq}^2 - \frac{4}{\gamma^2} D_{pp}D_{qq} + \frac{4}{\gamma^2} (D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2) \right) \\
&= \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{1}{\omega_0^2\gamma^2} (D_{pp} - \omega_0^2 D_{qq})^2 + 4D_{qq}^2 + \frac{16}{\omega_0^2} D_{pq}^2 \right) \\
&\quad + \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{16\gamma^2 + 8\omega_0^2}{\omega_0^4} D_{pp}D_{qq} \right) \\
&\quad + \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \left(\frac{8\omega_0^2 + 16\gamma^2}{\omega_0^4\gamma} D_{pp}D_{pq} + \frac{8\omega_0^2 + 16\gamma^2}{\omega_0^2\gamma} D_{qq}D_{pq} \right) \\
&\quad + \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \frac{4}{\gamma^2} (D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2) \\
&\geq \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \frac{4}{\gamma^2} (D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2) \\
&\geq \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4} \frac{4}{\gamma^2} \frac{\gamma^2}{4} \\
&= \frac{\left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - 1\right)^2}{4}
\end{aligned}$$

Hierbei wurden (3.6), (3.7), (3.8) und (3.9) benutzt.

Zusammenfassend erhalten wir also, dass für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ $\langle \psi, R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)\psi \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)} \geq 0$.

□

D.2 $\mathcal{J}_1(L^2(\mathbb{R}^d))$ -Norm von $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$

Für einen positiven Operator $R_0 \in \mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$ ist der Operator $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ ebenfalls ein positiver Operator aus $\mathcal{J}_1^s(L^2(\mathbb{R}^d))$. Dies ist die Aussage der Proposition 4.13 für den Spezialfall $t = \frac{k\pi}{\omega}$. Damit der Beweis der Proposition vollständig ist, müssen wir noch die Rechnung $\int_{\mathbb{R}^d} \rho\left(x, x, \frac{k\pi}{\omega}\right) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx$ für diesen Spezialfall nachvollziehen.

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^d} \rho\left(x, x, \frac{k\pi}{\omega}\right) \\
& \stackrel{(D.11)}{=} \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{2\pi}\right)^d \left(\frac{1}{4\pi r_1}\right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{4d}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1}|y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0\right)\right)} \\
& \quad e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} \rho_0\left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2}\right) dy_0 d_0 d\xi dx \\
& \stackrel{=\xi\text{-Int}}{=} \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{(4\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1}|y_0|^2} e^{i\frac{r_3}{2r_1} y_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0\right)} \\
& \quad \rho_0\left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2}\right) \delta_d\left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0\right) dy_0 d_0 d\xi dx \\
& = \frac{e^{\frac{2dk\pi\gamma}{\omega}}}{(4\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - \frac{w+z}{2}|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1}|w-z|^2} e^{i\frac{r_3}{2r_1} y_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - \frac{w+z}{2}\right)} \\
& \quad \rho_0(w, z) \delta_d\left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} (w-z)\right) dw dz dx \\
& \stackrel{=w\text{-Int}}{=} \frac{e^{\frac{dk\pi\gamma}{\omega}}}{(4\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - z|^2}{4r_1}} e^{i\frac{r_3}{2r_1} y_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - z\right)} \rho_0(z, z) dz dx \\
& \stackrel{=x\text{-Int}}{=} \frac{e^{\frac{dk\pi\gamma}{\omega}}}{(4\pi r_1)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{dk\pi\gamma}{\omega}} (4\pi r_1)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(z, z) dz \\
& = \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x, x) dx
\end{aligned}$$

Wir beachten hierbei, dass nach [LP93] $\rho_0\left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2}\right)$ stetig in $y_0 = 0$ ist.

D.3 Kinetische und potentielle Energie von $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$

In diesem Anhang berechnen wir für den Fall $0 \leq \gamma < \omega_0$ die Integrale

$$\int_{\mathbb{R}^d} [\nabla_x \cdot \nabla_y \rho\left(x, y, \frac{k\pi}{\omega}\right)]_{(x,x)} dx \quad \text{und} \quad \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 \rho\left(x, x, \frac{k\pi}{\omega}\right) dx.$$

Dies entspricht der zweifachen kinetischen Energie beziehungsweise der zweifachen potentiellen Energie des Operators $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$, falls $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$ positiv ist.

Wir führen die Abkürzung

$$C := \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{2\pi} \right)^d \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}}$$

ein.

$$\begin{aligned} & \nabla_y \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \\ = & C \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right) \right)} e^{i\xi \cdot (x-y)} \\ & \left(-\frac{1}{4r_1} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) + i \frac{r_3}{4r_1} (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 - i\xi \right) \\ & \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) dy_0 dx_0 d\xi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \nabla_x \cdot \nabla_y \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \\ = & C \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right) \right)} e^{i\xi \cdot (x-y)} \\ & \left(-\frac{1}{4r_1} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) + i \frac{r_3}{4r_1} (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 - i\xi \right) \\ & \left(-\frac{1}{4r_1} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) + i \frac{r_3}{4r_1} (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 + i\xi \right) \\ & \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) dy_0 dx_0 d\xi \\ + & C \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{x+y}{2} - x_0 \right) \right)} e^{i\xi \cdot (x-y)} \\ & \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) \left(-\frac{d}{8r_1} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) dy_0 dx_0 d\xi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} \left[\nabla_x \cdot \nabla_y \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \right]_{(x,x)} dx \\ = & C \int_{\mathbb{R}^{4d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-iy_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \xi - \frac{r_3}{2r_1} \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0 \right) \right)} \\ & \left(\left(-\frac{1}{4r_1} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} x - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) + i \frac{r_3}{4r_1} (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 \right)^2 + \xi^2 - \frac{de^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{8r_1} \right) \\ & \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) dy_0 dx_0 d\xi dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= C \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{i\frac{r_3}{2r_1} y_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0 \right)} \\
&\quad \left(\left(-\frac{1}{4r_1} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} x - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) + i\frac{r_3}{4r_1} (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 \right)^2 - \frac{de^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{8r_1} \right) \\
&\quad \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) (2\pi)^d \delta_d \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 \right) dy_0 dx_0 dx \\
&+ C e^{-\frac{dk\pi\gamma}{\omega}} \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} |z|^2} e^{i\frac{r_3}{2r_1} (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} z \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0 \right)} \\
&\quad \rho_0 \left(x_0 + (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{z}{2}, x_0 - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{z}{2} \right) (2\pi)^d i^2 \delta_d^{(2)}(z) dz dx_0 dx
\end{aligned}$$

Führen wir nun die y_0 - beziehungsweise z -Integration aus, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} \left[\nabla_x \cdot \nabla_y \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \right]_{(x,x)} dx \\
&= \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} \rho_0(x_0, x_0) \\
&\quad \left(\left(-\frac{1}{4r_1} \left(e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} x - (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) \right)^2 - \frac{de^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{8r_1} \right) dx_0 dx \\
&- \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} \rho_0(x_0, x_0) \\
&\quad \left(\left(i\frac{r_3}{2r_1} \left(x - (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) \right)^2 - \frac{2d\lambda}{4r_1} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) dx_0 dx \\
&- \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} i\frac{r_3}{2r_1} (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \left(x - (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x_0 \right) \\
&\quad [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 dx \\
&- \left(\frac{e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} \frac{1}{4} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \\
&\quad [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 dx \\
&= \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|z|^2}{4r_1}} \left(\frac{1}{16r_1^2} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} z^2 - \frac{de^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{8r_1} \right) \rho_0(x_0, x_0) dx_0 dz \\
&- \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|z|^2}{4r_1}} \left(-\frac{r_3^2}{4r_1^2} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} z^2 - \frac{2d\lambda}{4r_1} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \rho_0(x_0, x_0) dx_0 dz
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|z|^2}{4r_1}} i \frac{r_3}{2r_1} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega} z} [(\nabla_x - \nabla_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 dz \\
& - \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\frac{|z|^2}{4r_1}} \frac{1}{4} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega} z} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 dz
\end{aligned}$$

Durch Ausführen der z -Integration bekommen wir:

$$\begin{aligned}
2E_{kin} \left(R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \right) &= \int_{\mathbb{R}^d} \left[\nabla_x \cdot \nabla_y \rho \left(x, y, \frac{k\pi}{\omega} \right) \right]_{(x, x)} dx \\
&= \left(\frac{2dr_1}{16r_1^2} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} - \frac{d}{8r_1} e^{\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) dx_0 \\
&\quad + \left(\frac{r_3^2}{4r_1^2} 2dr_1 e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} + \frac{2d\lambda}{4r_1} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \right) \int_{\mathbb{R}^d} \rho_0(x_0, x_0) dx_0 \\
&\quad - \frac{1}{4} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \int_{\mathbb{R}^d} [(\Delta_x - 2\nabla_x \cdot \nabla_y + \Delta_y) \rho_0(x, y)]_{(x_0, x_0)} dx_0 \\
&= 2de^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} r_2 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) Tr(R_0) \\
&\quad + 2e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} E_{kin}(R_0)
\end{aligned}$$

Falls $R_0 \in \mathcal{E}$ positiv ist, ist die kinetische Energie von $R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) < \infty$.

Berechnen wir nun die potentielle Energie von $R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right)$.

$$\begin{aligned}
& 2E_{pot} \left(R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \right) \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 \rho \left(x, x, \frac{k\pi}{\omega} \right) dx \\
&= C \int_{\mathbb{R}^{4d}} |x|^2 e^{-\frac{|(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda}{4r_1} |y_0|^2} e^{-i(-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} y_0 \cdot \xi + i \frac{r_3}{2r_1} y_0 \cdot \left((-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} x - x_0 \right)} \\
&\quad \rho_0 \left(x_0 + \frac{y_0}{2}, x_0 - \frac{y_0}{2} \right) dy_0 dx_0 d\xi dx \\
&= \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^{3d}} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} |y + x_0|^2 e^{-\frac{|y|^2}{4r_1}} e^{-\frac{\lambda e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}}}{4r_1} |z|^2} e^{i \frac{r_3}{2r_1} (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} z \cdot y} \\
&\quad \rho_0 \left(x_0 + (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{z}{2}, x_0 - (-1)^k e^{-\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \frac{z}{2} \right) \delta_d(z) dz dy dx_0 \\
&= \left(\frac{1}{4\pi r_1} \right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} (y^2 + 2y \cdot x_0 + x_0^2) e^{-\frac{|y|^2}{4r_1}} \rho_0(x_0, x_0) dy dx_0 \\
&= e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \int_{\mathbb{R}^d} (2dr_1 + x_0^2) \rho_0(x_0, x_0) dx_0
\end{aligned}$$

$$= 2de^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} r_1 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) Tr(R_0) + 2e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} E_{pot}(R_0)$$

Also ist die potentielle Energie von $R\left(\frac{k\pi}{\omega}\right)$ endlich, falls R_0 ein positiver Operator aus dem Energierraum ist.

D.4 Stetigkeit der Energienorm in $t = \frac{k\pi}{\omega}$

In diesem Anhang beenden wir den Beweis des Lemmas 4.18.

Wir müssen noch zeigen, dass die Energienorm von $R(t)$ in den Zeitpunkten $t = \frac{k\pi}{\omega}$, $k \in \mathbb{N}$ stetig ist, falls wir uns im ersten Fall (siehe (3.29)) befinden.

Sei also die Anfangsbedingung R_0 aus dem Energierraum \mathcal{E} mit R_0 positiv.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit nehmen wir wieder an, dass $\rho_0(x, y) = \phi(x) \bar{\phi}(y)$. Aus Satz 4.16 und Anhang D.2 wissen wir bereits, dass für alle Zeiten die Spur von $R(t)$ identisch ist mit der Spur von R_0 . Für $t \neq \frac{k\pi}{\omega}$ erhalten wir aus dem Beweis des Lemmas 4.18 die kinetische und die potentielle Energie von $R(t)$.

$$\begin{aligned} & 2E_{kin}(R(t)) \\ &= \frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right) Tr(R_0) \\ & \quad + 2\beta^2 e^{-4\gamma t} E_{pot}(R_0) + 2\alpha^2 e^{-4\gamma t} E_{kin}(R_0) - 2\alpha\beta e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \\ & \\ & 2E_{pot}(R(t)) \\ &= \frac{2de^{-4\gamma t}}{\omega_0^4} \left(\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha}\dot{\beta} r_3 \right) Tr(R_0) \\ & \quad + 2\frac{\dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} E_{kin}(R_0) + 2\frac{\dot{\beta}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} E_{pot}(R_0) - 2\frac{\dot{\alpha}\dot{\beta}}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} \int_{\mathbb{R}^d} \Im(\bar{\phi}(x) \nabla_x \phi(x)) \cdot x dx \end{aligned}$$

Die kinetische und potentielle Energie für $t = \frac{k\pi}{\omega}$ entnehmen wir aus dem Anhang D.3.

$$\begin{aligned} 2E_{kin} \left(R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \right) &= 2de^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} r_2 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) Tr(R_0) + 2e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} E_{kin}(R_0) \\ 2E_{pot} \left(R \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \right) &= 2de^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} r_1 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) Tr(R_0) + 2e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} E_{pot}(R_0) \end{aligned}$$

Aus (3.29) wissen wir, dass

$$\lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \alpha(t) = (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}}$$

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \beta(t) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \dot{\alpha}(t) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \dot{\beta}(t) &= \omega_0^2 (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}}\end{aligned}$$

Wir vergleichen nun die einzelnen zeitabhängigen Koeffizienten für $t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}$. Wir beginnen mit der potentiellen Energie.

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(2 \frac{\dot{\alpha}\dot{\beta}}{\omega_0^4} e^{-4\omega t} \right) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(2 \frac{\dot{\beta}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} \right) &= 2e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(2 \frac{\dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} \right) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(\frac{2de^{-4\gamma t}}{\omega_0^4} \left(\dot{\beta}^2 r_1 + \dot{\alpha}^2 r_2 - \dot{\alpha}\dot{\beta} r_3 \right) \right) &= 2de^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} r_1 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right)\end{aligned}$$

Nun betrachten wir die Terme der kinetischen Energie.

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} (-2\alpha\beta e^{-4\gamma t}) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} (2\alpha^2 e^{-4\gamma t}) &= 2e^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} (2\beta^2 e^{-4\gamma t}) &= 0\end{aligned}$$

Für den zeitabhängigen Koeffizienten vor $Tr(R_0)$ benötigen wir wieder die Regel von de l'Hospital.

Es gilt:

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \ddot{\alpha} &= \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} (-\dot{\beta}) \\ &= -\omega_0^2 (-1)^k e^{\frac{k\pi\gamma}{\omega}} \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \frac{d}{dt} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) &= \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(-\frac{e^{-2\gamma t}}{\omega_0^2} \left(\dot{\alpha}\dot{\beta} + \alpha\ddot{\beta} - 2\gamma\alpha\dot{\beta} \right) \right) \\ &= 0\end{aligned}$$

Die Regel von de l'Hospital liefert uns dann:

$$\lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \frac{1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t}}{\dot{\alpha}} = 0$$

Somit erhalten wir für den Term vor $Tr(R_0)$:

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \frac{k\pi}{\omega}} \left(\frac{2d\omega_0^4}{\dot{\alpha}^2} \left(\left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right)^2 r_1 + \frac{\alpha^2 \dot{\alpha}^2}{\omega_0^4} e^{-4\gamma t} r_2 + \frac{\alpha\dot{\alpha}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \left(1 - \frac{\alpha\dot{\beta}}{\omega_0^2} e^{-2\gamma t} \right) r_3 \right) \right) \\ &= 2de^{-\frac{2k\pi\gamma}{\omega}} r_2 \left(\frac{k\pi}{\omega} \right) \end{aligned}$$

Also ist sowohl die Spur als auch die kinetische und die potentielle Energie von $R(t)$ stetig in $t = \frac{k\pi}{\omega}$.

Die selbstständige und eigenhändige Anfertigung dieser Arbeit versichere ich an Eides statt.

Münster, 02. November 2007