TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN

BACHELORARBEIT

Der freie Schrödinger-Operator

ausgeführt am Institut für
Analysis und Scientific Computing
der Technischen Universität Wien

unter der Anleitung von
Ao. Univ. Prof. Dr. techn. Harald Woracek

durch

David Kofler
Gießaufgasse 1/19
1050 Wien

25. November 2015

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

In einem quantenmechanischen Modell treten meistens drei mathematische Problemstellungen auf. Man interessiert sich für

(i) Selbstadjungiertheit von Observablen.

(ii) Spektrum von Observablen.

(iii) Langzeitverhalten und Streutheorie von Observablen.

Wir wollen diese drei Problemstellungen für die freie Schrödingergleichung

$$i\frac{d}{dt}u(t) = -\Delta_x u(t),\ x \in \mathbb{R}^n, t \in \mathbb{R},$$

untersuchen.
In Kapitel 1 beweisen wir die wichtigsten Sätze über unbeschränkte Operatoren, um überhaupt den freien Schrödinger Operator $H_0 = -\Delta_x$ definieren zu können.
In Kapitel 2 definieren wir den Operator H_0. Wir zeigen, dass dieser selbstadjungiert ist und berechnen das Spektrum. Anschließend zeigen wir, wie man das Spektrum in Punktspektrum, absolut-stetiges Spektrum und singulär-stetiges Spektrum zerlegt und beweisen, dass der freie Schrödinger Operator H_0 nur absolut stetiges Spektrum besitzt. Als Beispiel berechnen wir noch die Resolvente für Dimension 1 und 3.
In Kapitel 3 beschäftigen wir uns mit der Zeitentwicklung des freien Schrödinger-Operators, welche durch den Operator e^{-itH_0} gegeben ist. Wir zeigen, dass so ein Ausdruck wohldefiniert werden kann und die freie Schrödingergleichung löst. Weiters berechnen wir eine explizite punktweise Darstellung von e^{-itH_0}. Zum Schluss zeigen wir den RAGE-Satz, welcher uns einen engen Zusammenhang zwischen den spektralen Teilräumen eines selbstadjungieren Operators T und dem asymptotischen Verhalten des Operators e^{-itT} liefert. Als Anwendung dieses Satzes erhalten wir interessante Aussagen über die Asymptotik der freien Schrödingergleichung.

1 Operatortheorie

1.1 Abgeschlossene und selbstadjungierte Operatoren

Wir bezeichnen mit $\mathcal{H}_1$ bzw. $\mathcal{H}_2$ immer einen Hilbertraum mit zugehörigem Skalarprodukt $\langle\cdot,\cdot\rangle_1$ bzw. $\langle\cdot,\cdot\rangle_2$.
Wir verstehen unter einem linearen Operator T eine lineare Abbildung eines linearen Teilraumes von $\mathcal{H}_1$ nach $\mathcal{H}_2$. Den Definitionsbereich von T bezeichnet man mit $\operatorname{dom} T$ und man schreibt $T : \operatorname{dom} T \subseteq \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ oder, abkürzend, $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$.
Weiters setzt man

$$\begin{aligned} \ker T &= \{x \in \operatorname{dom} T : Tx = 0\} \subseteq \mathcal{H}_1 \\ \operatorname{ran} T &= \{y \in \mathcal{H}_2 : \exists x \in \operatorname{dom} T \text{ mit } Tx = y\} \subseteq \mathcal{H}_2 \end{aligned}$$

Der Graph $\mathcal{G}(T)$ eines linearen Operators ist $\mathcal{G}(T) = \{(x, Tx) : x \in \operatorname{dom} T\} \subseteq \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$.
Eine große Klasse von unbeschränkten Operatoren sind die abgeschlossenen bzw. abschließbaren Operatoren.

Definition 1.1.1. *Ein linearer Operator $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ heißt abgeschlossen, wenn $\mathcal{G}(T)$ abgeschlossen bzgl. der Produkttopologie auf $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ ist.*
Ein linearer Operator $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ heißt abschließbar, falls eine abgeschlossene Erweiterung S von T existiert, d.h. S abgeschlossen, $\operatorname{dom} T \subseteq \operatorname{dom} S$ und $Tx = Sx$ für $x \in \operatorname{dom} T$.

Meistens ist die folgende Charakterisierung einfacher zu überprüfen:

Lemma 1.1.2. *Sei $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ ein linearer Operator. Dann sind äquivalent:*

(i) T ist abgeschlossen.

(ii) Sei $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge aus $\operatorname{dom} T$, $\lim_{n\to\infty} x_n = x$ und $\lim_{n\to\infty} Tx_n = y$. Dann folgt $x \in \operatorname{dom} T$ und $Tx = y$.

Lemma 1.1.3. *Ein linearer Unterraum $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ ist genau dann Graph eines Operators, wenn aus $(0, y) \in M$ immer $y = 0$ folgt.*

Beweis. Sei $\mathcal{M} = \mathcal{G}(T)$ Graph eines Operators T. Dann gilt $y = T(0) = T(0 + 0) = T(0) + T(0) = 2y$. Offensichtlich ist dies nur für $y = 0$ erfüllt.
Setze $\operatorname{dom} T := \{x \in \mathcal{H}_1 : \exists y \in \mathcal{H}_2 \text{ sodass } (x, y) \in \mathcal{M}\}$ und $Tx := y$, $x \in \operatorname{dom} T$. Wegen der Voraussetzung und der Linearität ist dadurch ein linearer Operator wohldefiniert. □

Lemma 1.1.4. *Sei $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ ein linearer Operator. Dann sind äquivalent:*

(i) T ist abschließbar.

(ii) Sei $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge aus $\operatorname{dom} T$ mit $\lim_{n\to\infty} x_n = 0$ und $\lim_{n\to\infty} Tx_n = y$. Dann folgt $y = 0$.

(iii) $\overline{\mathcal{G}(T)}$ ist der Graph eines linearen Operators.

Beweis. *(i) ⇒ (iii)*: Sei S eine abgeschlossene Erweiterung von T mit $\mathcal{G}(T) \subseteq \mathcal{G}(S)$. Dann gilt $\overline{\mathcal{G}(T)} \subseteq \mathcal{G}(S)$, also ist $\overline{\mathcal{G}(T)}$ Graph eines Operators.
(ii) ⇔ (iii): Lemma 1.1.3.
(iii) ⇒ (i): Es gilt $\overline{\mathcal{G}(T)} = \mathcal{G}(S)$ für einen abgeschlossenen Operator S und $T \subseteq S$. Also ist T abschließbar. □

Sei $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ ein linearer Operator und $\operatorname{dom} T$ dicht in $\mathcal{H}_1$. Dann ist auf

$$\operatorname{dom} T^* := \{y \in \mathcal{H}_2 : \exists u \in \mathcal{H}_1 \text{ mit } \langle Tx, y\rangle_2 = \langle x, u\rangle_1,\ x \in \operatorname{dom} T\}$$

durch $T^*y = u$ ein linearer Operator definiert.
Nach Riesz-Fischer ist $y \in \operatorname{dom} T^*$ genau dann, wenn das Funktional $x \mapsto \langle Tx, y\rangle_2$ stetig ist. Das zugehörige Element $u \in \mathcal{H}_1$ ist eindeutig, da $\operatorname{dom} T$ dicht in $\mathcal{H}_1$ ist.

Definition 1.1.5. *Sei* $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ *ein linearer Operator und* $\operatorname{dom} T$ *dicht in* $\mathcal{H}_1$*.*
T heißt symmetrisch, falls $T \subseteq T^*$ *und selbstadjungiert, falls* $T = T^*$*.*

Bemerkung 1.1.6. Für unbeschränkte Operatoren ist die Unterscheidung zwischen symmetrisch und selbstadjungiert wesentlich, nur für Letztere gilt der Spektralsatz. Im beschränkten Fall ist jeder symmetrische Operator selbstadjungiert.

Proposition 1.1.7. *Sei* $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ *ein linearer Operator und* $\operatorname{dom} T$ *dicht in* $\mathcal{H}_1$*. Dann gilt*

(i) T^* *ist abgeschlossen.*

(ii) Wenn $\operatorname{dom} T^*$ *dicht in* $\mathcal{H}_2$ *ist, dann gilt* $T \subseteq T^{**}$*, wobei* $T^{**} := (T^*)^*$*.*

Beweis. (i) Sei $(y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge aus $\operatorname{dom} T^*$ mit $\lim\limits_{n\to\infty} y_n = y$ und $\lim\limits_{n\to\infty} T^* y_n = z$. Wir müssen $y \in \operatorname{dom} T^*$ und $T^* y = z$ zeigen:

Sei $x \in \operatorname{dom} T$. Aus der komponentenweisen Stetigkeit des Skalarproduktes folgt

$$\langle x, z\rangle = \lim_{n\to\infty} \langle x, T^* y_n\rangle = \lim_{n\to\infty} \langle Tx, y_n\rangle = \langle Tx, y\rangle.$$

Damit ist $y \in \operatorname{dom} T^*$ und $T^* y = z$.

(ii) Wenn $\operatorname{dom} T^*$ dicht in $\mathcal{H}_2$ ist, ist auf

$$\operatorname{dom} (T^*)^* = \{x \in \mathcal{H}_1 : \exists v \in \mathcal{H}_2 \text{ mit } \langle x, T^* y\rangle = \langle v, y\rangle, y \in \operatorname{dom} T^* \}$$

$(T^*)^*$ definiert. Für $x \in \operatorname{dom} T$ wähle $v = Tx$, dann gilt $\langle x, T^* y\rangle = \langle v, y\rangle$, $y \in \operatorname{dom} T^*$, d.h. $x \in \operatorname{dom} (T^*)^*$. Womit wir $T \subseteq T^{**}$ erhalten.

□

Der Beweis der folgenden Proposition benutzt die sogenannte Graph-Methode. Wir gehen wie in [5, Proposition 1.8] vor:
Sei $V : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_1$ der unitäre Operator definiert durch

$$V(x, y) := (-y, x), \; x \in \mathcal{H}_1, y \in \mathcal{H}_2.$$

Lemma 1.1.8. *Sei* $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ *ein linearer Operator und* $\operatorname{dom} T$ *dicht in* $\mathcal{H}_1$*. Dann gilt*

$$\mathcal{G}(T^*) = V(\mathcal{G}(T))^\perp = V(\mathcal{G}(T)^\perp)$$

Beweis. Seien $x \in \operatorname{dom} T$ und $y \in \operatorname{dom} T^*$. Wegen

$$\langle V(x, Tx), (y, T^* y)\rangle = \langle (-Tx, x), (y, T^* y)\rangle = \langle -Tx, y\rangle_2 + \langle x, T^* y\rangle_1 = 0$$

folgt $\mathcal{G}(T^*) \subseteq V(\mathcal{G}(T))^\perp$.
Sei umgekehrt $(y, u) \in V(\mathcal{G}(T))^\perp$. Für $x \in \operatorname{dom} T$ gilt

$$\langle V(x, Tx), (y, u)\rangle = \langle -Tx, y\rangle_2 + \langle x, u\rangle_1 = 0.$$

Also folgt $\langle Tx, y\rangle = \langle x, u\rangle$. Nach Definition von T^* folgt damit $T^* y = u$ und $y \in \operatorname{dom} T^*$. Daher erhalten wir $V(\mathcal{G}(T))^\perp \subseteq \mathcal{G}(T^*)$.
Die dritte Gleichheit folgt direkt aus der Unitarität von V, da V das Skalarprodukt erhält.

□

Proposition 1.1.9. *Sei* $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ *ein dicht definierter, linearer Operator. Dann gilt*

(i) T ist genau dann abschließbar, wenn $\operatorname{dom} T^*$ *dicht in* $\mathcal{H}_2$ *ist.*

(ii) Ist T abschließbar, dann ist $(\overline{T})^* = T^*$ *und* $\overline{T} = T^{**}$*.*

(iii) T ist genau dann abgeschlossen, wenn $T = T^{**}$*.*

(iv) Ist T invertierbar, dann ist T genau dann abgeschlossen, wenn T^{-1} abgeschlossen ist.

Beweis. (i) Sei T abschließbar und $u \in (\operatorname{dom} T^*)^\perp$. Dann ist $(-u, 0) \in \mathcal{G}(T^*)^\perp$ und mit Lemma 1.1.8 folgt

$$(0, u) = V^{-1}(-u, 0) \in V^{-1}(\mathcal{G}(T^*)^\perp) = V^{-1}(V(\mathcal{G}(T))^{\perp\perp}) = \mathcal{G}(T)^{\perp\perp} = \overline{\mathcal{G}(T)}.$$

Nach Lemma 1.1.4 ist $\overline{\mathcal{G}(T)}$ Graph eines Operators. Also folgt mit Lemma 1.1.3 $u = 0$. Damit ist $\operatorname{dom} T^*$ dicht in $\mathcal{H}_2$, da $(\operatorname{dom} T^*)^\perp = \{0\}$.

Umgekehrt sei $\operatorname{dom} T^*$ dicht in $\mathcal{H}_2$. Dann existiert der Operator T^{**} mit $T \subseteq T^{**}$. Da T^{**} abgeschlossen ist, hat T eine abgeschlossene Erweiterung.

(ii) Für einen abschließbaren Operator T gilt offensichtlich $\mathcal{G}(\overline{T}) = \overline{\mathcal{G}(T)}$, damit folgt

$$\mathcal{G}((\overline{T})^*) = V(\mathcal{G}(\overline{T})^\perp) = V(\overline{\mathcal{G}(T)}^\perp) = V(\mathcal{G}(T)^\perp) = \mathcal{G}(T^*).$$

Daher ist $(\overline{T})^* = T^*$. Wegen der Voraussetzung und Punkt (i) existiert T^{**}. Übertragen wir Lemma 1.1.8 auf T^*, so ist der zugehörige unitäre Operator $-V^{-1}$. Zweimaliges Anwenden liefert

$$\mathcal{G}(T^{**}) = (-V^{-1})(\mathcal{G}(T^*)^\perp) = V^{-1}(V(\mathcal{G}(T))^{\perp\perp}) = \mathcal{G}(T)^{\perp\perp} = \overline{\mathcal{G}(T)} = \mathcal{G}(\overline{T}).$$

Damit ist $T^{**} = \overline{T}$.

(iii) Folgt unmittelbar aus Punkt (ii).

(iv) Betrachte den unitären Operator $U : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2 \times \mathcal{H}_1$ definiert durch

$$U(x, y) := (y, x),\ x \in \mathcal{H}_1, y \in \mathcal{H}_2.$$

Für $x \in \operatorname{dom} T$ und $Tx = y$ gilt wegen der Voraussetzung $U(x, Tx) = (y, T^{-1}y)$. Also bildet U den Graphen $\mathcal{G}(T)$ auf $\mathcal{G}(T^{-1})$ ab, d.h. $U(\mathcal{G}(T)) = \mathcal{G}(T^{-1})$. Damit ist T genau dann abgeschlossen, wenn T^{-1} abgeschlossen ist.

□

Oft lässt sich ein abgeschlossener Operator T als Abschluss eines Operators T_0 schreiben. Dann ist es sinnvoll zunächst Eigenschaften für T_0 nachzuweisen, um dann mit einem Abschlussargument auf T zu schließen.

Definition 1.1.10. *Sei $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ abgeschlossen. Ein linearer dichter Unterraum $\mathcal{D}$ von* $(\operatorname{dom} T, \|\cdot\|_T)$ *heißt Core, wenn gilt $\overline{(T|_\mathcal{D})} = T$, wobei $\|x\|_T = \|x\| + \|Tx\|$.*

1.2 Spektrum abgeschlossener Operatoren

Ähnlich wie für beschränkte Operatoren, definieren wir Resolventenmenge und Spektrum für abgeschlossene Operatoren:

Definition 1.2.1. *Sei $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ abgeschlossen. $\rho(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} : (T - \lambda)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})\}$ und $\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$. Der Operator $R_\lambda(T) : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ mit $R_\lambda(T) = (T - \lambda I)^{-1}$ heißt die Resolvente des Operators T für $\lambda \in \rho(T)$.*

Bemerkung 1.2.2. Ist $\lambda \in \rho(T)$ so ist der auf ganz $\mathcal{H}$ beschränkte Operator $(T - \lambda)^{-1}$ abgeschlossen. Wegen Proposition 1.1.9 damit auch die Inverse $(T - \lambda)$. Wäre T nicht abgeschlossen, würde immer $\rho(T) = \emptyset$ und $\sigma(T) = \mathbb{C}$ gelten.

Proposition 1.2.3. *$\rho(T)$ ist die Menge aller $\lambda \in \mathbb{C}$ sodass $T - \lambda$ bijektiv* $\operatorname{dom} T$ *auf $\mathcal{H}$ abbildet oder äquivalent* $\ker T - \lambda = \{0\}$ *und* $\operatorname{ran} T - \lambda = \mathcal{H}$.

Beweis. Zu zeigen ist, dass aus der Bijektivität von $T-\lambda$ die Beschränktheit des Operators $(T-\lambda)^{-1}$ folgt.
Aus der Abgeschlossenheit von T folgt die von $T-\lambda$ und damit auch die von $(T-\lambda)^{-1}$ nach Proposition 1.1.9 (iv). Da $(T-\lambda)^{-1}$ abgeschlossen ist auf ganz $\mathcal{H}$, folgt mit dem Satz vom abgeschlossenen Graphen, dass $(T-\lambda)^{-1}$ beschränkt ist. □

Als Beispiel betrachten wir den maximal definierten Multiplikationsoperator M_φ mit einer Funktion φ auf $L^2(\mathbb{R}^n)$. Das ist der auf

$$\operatorname{dom} M_\varphi = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : \varphi f \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}$$

durch $M_\varphi f := \varphi f$ definierte lineare Operator.
Ist φ reellwertig und stetig, so hat der Operator M_φ bemerkenswerte Eigenschaften:

Proposition 1.2.4. *Sei $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ stetig. Dann gilt für den Multiplikationsoperator M_φ:*

(i) M_φ ist abgeschlossen und $\operatorname{dom} M_\varphi$ ist dicht in $L^2(\mathbb{R}^n)$.

(ii) M_φ ist selbstadjungiert.

(iii) $\sigma(M_\varphi) = \overline{\varphi(\mathbb{R}^n)}$.

Beweis. (i) Siehe [1, Satz 2.3.1].

(ii) Sei $g \in \operatorname{dom} M_\varphi$. Für $f \in \operatorname{dom} M_\varphi$ gilt $\langle M_\varphi f, g\rangle_{L^2} = \langle f, M_\varphi g\rangle_{L^2}$ für reellwertiges φ. Also ist $g \in \operatorname{dom} M_\varphi^*$ nach Definition des Adjungierten, womit $M_\varphi \subseteq M_\varphi^*$.

Sei umgekehrt $f \in \operatorname{dom} M_\varphi^*$ und $h = M_\varphi^* f$. Sei $\chi_n := \chi_{K_n}$ die charakteristische Funktion von $K_n = \{x \in \mathbb{R}^n : |\varphi(x)| \le n\}$. Wegen $\chi_n \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ sind $\chi_n h \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\chi_n \varphi f \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

Für $g \in \operatorname{dom} M_\varphi$ folgt wegen $\chi_n g \in \operatorname{dom} M_\varphi$

$$\langle g, \chi_n M_\varphi^* f\rangle_{L^2} = \langle \chi_n g, h\rangle_{L^2} = \langle M_\varphi \chi_n g, f\rangle_{L^2} = \langle \varphi\chi_n g, f\rangle_{L^2} = \langle g, \chi_n \varphi f\rangle_{L^2}.$$

Also ist

$$\int_{\mathbb{R}^n} g\chi_n(\overline{h} - \varphi\overline{f})\, d\lambda_n = 0,\ g \in \operatorname{dom} M_\varphi .$$

Da $\operatorname{dom} M_\varphi$ dicht in $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist, folgt $h = \varphi f$ f.ü. auf K_n und damit auf ganz $\mathbb{R}^n$. Jetzt ist $h \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und damit auch $\varphi f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, d.h. aber $f \in \operatorname{dom} M_\varphi$.

(iii) Sei $\lambda = \varphi(x_0)$. Wegen der Stetigkeit von φ existiert $K \subseteq \mathbb{R}^n$ kompakt mit $\lambda_n(K) > 0$, sodass

$$\|\varphi(x) - \varphi(x_0)\| \le \epsilon,\ x \in K.$$

Damit folgt

$$\|(M_\varphi - \lambda)\chi_K\| \le \epsilon \|\chi_K\| .$$

Angenommen $\lambda \in \rho(M_\varphi)$, d.h. $(M_\varphi - \lambda)^{-1}$ ist beschränkt und damit

$$\|\chi_K\| = \left\|(M_\varphi - \lambda)^{-1}(M_\varphi - \lambda)\chi_K\right\| \le \left\|(M_\varphi - \lambda)^{-1}\right\| \epsilon \|\chi_K\| .$$

Für $\epsilon \left\|(M_\varphi - \lambda)^{-1}\right\| < 1$ ist das offensichtlich unmöglich, also muss $\lambda \in \sigma(M_\varphi)$ sein. Wir erhalten $\varphi(\mathbb{R}^n) \subseteq \sigma(M_\varphi)$ und wegen der Abgeschlossenheit des Spektrums auch $\overline{\varphi(\mathbb{R}^n)} \subseteq \sigma(M_\varphi)$.

Sei umgekehrt $\lambda \notin \overline{\varphi(\mathbb{R}^n)}$. Dann existiert ein $c > 0$, sodass $|\varphi(x) - \lambda| \ge c$ für $x \in \mathbb{R}^n$. Damit ist die Funktion $\psi(x) := (\varphi(x) - \lambda)^{-1}$ auf $\mathbb{R}^n$ beschränkt. Daher ist der zugehörige Multiplikationsoperator $M_\psi f = \psi f$ auf ganz $L^2(\mathbb{R}^n)$ definiert und $M_\psi = (M_\varphi - \lambda)^{-1}$. Also ist $(M_\varphi - \lambda)$ beschränkt invertierbar, d.h. $\lambda \in \rho(M_\phi)$.

□

Das Spektrum ist bei unitär äquivalenten Operatoren T, S gleich:

Lemma 1.2.5. *Sei $T = U^{-1}SU$, wobei $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ unitär und $S : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2$. Dann gilt $\sigma(T) = \sigma(S)$.*

Beweis. Sei $\lambda \in \rho(S)$. Mit Proposition 1.2.3 und $T - \lambda = U^{-1}(S-\lambda)U$ folgt

$$\begin{aligned} \operatorname{ran} T - \lambda &= U^{-1}\operatorname{ran} S - \lambda = \mathcal{H}_1 \\ \ker T - \lambda &= U^{-1} \ker S - \lambda = \{0\}. \end{aligned}$$

Also ist $\lambda \in \rho(T)$. Für die andere Richtung vertausche die Rollen von S und T. □

2 Der Freie Schrödinger-Operator H_0

2.1 Definition von H_0

Lemma 2.1.1. *Seien $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt $\langle \Delta f, g\rangle_{L^2} = \langle f, \Delta g\rangle_{L^2}$.*

Beweis. Folgt direkt aus der 2. Green'schen Formel. Die Randintegrale verschwinden, da f, g kompakten Träger haben. □

Um dem Differentialausdruck $-\Delta$ einen operatortheoretischen Sinn zu geben, gibt es mehrere Möglichkeiten. Wir definieren:

(i) Auf $\operatorname{dom} T_0 = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ sei der Operator T_0 durch $T_0 f := -\Delta f$, $f \in \operatorname{dom} T_0$ definiert. Aus Lemma 2.3.3 folgt $T_0 \subseteq T_0^*$, damit ist T_0^* dicht definiert. Nach Proposition 1.1.9 (i) ist T_0 daher abschließbar.

(ii) Sei $T_{\min} = \overline{T_0}$, der minimale Operator.

(iii) Auf $\operatorname{dom} T_{\max} = \big\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : -\Delta f = g \in L^2(\mathbb{R}^n) \text{ im distributionellem Sinn} \big\} = H^2(\mathbb{R}^n)$ sei der maximale Operator $T_{\max}$ durch $T_{\max} f := -\Delta f$, $f \in \operatorname{dom} T_{\max}$ definiert.

(iv) Auf $\operatorname{dom} T_{\mathcal{F}} = \Big\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : |k|^2 \hat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^n) \Big\}$ sei der Operator $T_{\mathcal{F}}$ durch $T_{\mathcal{F}} f = \mathcal{F}^{-1} M_{|k|^2} \mathcal{F} f$, $f \in \operatorname{dom} T_{\mathcal{F}}$ definiert. Wobei $\mathcal{F}$ der Fourier-Plancherel Operator ist und $|k|^2 = \sum_{i=1}^n k_i^2$ für $k \in \mathbb{R}^n$.

Proposition 2.1.2. *$(T_0)^* = (T_{min})^* = T_{max}$ und $(T_{max})^* = T_{min}$.*

Beweis. Sei $f \in \operatorname{dom} T_{\max}$ und $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Wegen $\langle T_{\max} f, \varphi\rangle = \langle -\Delta f, \varphi\rangle = \langle f, -\Delta\varphi\rangle$, folgt $T_{\max} \subseteq T_0^*$ nach Definition des Adjungierten, da $\varphi \in \operatorname{dom} T_0$ ist.
Sei umgekehrt $f \in \operatorname{dom} T_0^*$ und setze $g = T_0^* f$. Dann gilt für $\varphi \in \operatorname{dom} T_0$:

$$\langle g, \varphi\rangle = \langle f, T_0\varphi\rangle = \langle f, -\Delta\varphi\rangle.$$

Andererseits gilt für die reguläre Distribution $-\Delta f$:

$$-\Delta f(\varphi) = f(-\Delta\varphi) = \langle f, -\Delta\varphi\rangle,\ \varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n).$$

Kombinieren wir beide Formeln, so erhalten wir, dass die reguläre Distribution $-\Delta f$ durch $g \in L^2(\mathbb{R}^n)$ gegeben ist und damit $f \in \operatorname{dom} T_{\max}$. Wir haben also gezeigt $(T_0)^* = T_{\max}$.
Da $T_{\min} = \overline{T_0}$ folgt mit Proposition 1.1.9 (ii) $T_{\min}^* = (\overline{T_0})^* = (T_0)^* = T_{\max}$ und $T_{\max}^* = T_{\min}^{**} = \overline{T_{\min}} = T_{\min}$.

□

Proposition 2.1.3. *$(T_{\mathcal{F}})^* = T_{\mathcal{F}}$ und $T_{\mathcal{F}} = T_{min} = T_{max}$.*

Beweis. Wir zeigen $T_{\min} = T_{\mathcal{F}}$. Nach Proposition 1.2.4 ist $M_{|k|^2} = M_{|k|^2}^*$ und da $\mathcal{F}$ unitär ist folgt $T_{\mathcal{F}} = T_{\mathcal{F}}^*$.
Für den Beweis ist es sinnvoll einen weiteren Operator zu definieren. Wir definieren auf $\operatorname{dom} T_1 = \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ den Operator T_1 durch $T_1 f = -\Delta f = \mathcal{F}^{-1}|k|^2\mathcal{F} f$, $f \in \operatorname{dom} T_1$.
Für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ gilt $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ und $-\Delta f = \mathcal{F}^{-1}|k|^2\mathcal{F} f$. Daher ist $\operatorname{dom} T_1 \subseteq \operatorname{dom} T_{\mathcal{F}}$, womit $T_1 \subseteq T_{\mathcal{F}}$. Außerdem ist T_1 abschließbar, da $T_{\mathcal{F}}$ abgeschlossen ist. Da offensichtlich $T_0 \subseteq T_1$ gilt, folgt $T_{\min} = \overline{T_0} \subseteq T_{\mathcal{F}}$.
Für die andere Richtung gehen wir in zwei Schritten vor:

(i) $\overline{T_1} \subseteq T_{\min}$: Sei $f \in \operatorname{dom} T_1$. Wähle $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mit $\varphi(x) = 1$ für $\|x\| \leq 1$. Wir definieren $\varphi_n(x) := \varphi(n^{-1}x)$ und $f_n(x) := \varphi_n(x)f(x)$ für $x \in \mathbb{R}^n$. Offensichtlich ist $f_n \in C_0^\infty$ und $\lim_{n\to\infty} f_n(x) = f(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$. Wegen $f_n \in \operatorname{dom} T_0$ und wegen

$$\Delta f_n = \varphi_n(\Delta f) + \frac{2}{n}\nabla(\varphi_n)\nabla(f) + \frac{1}{n^2}(\Delta\varphi_n)f,$$

folgt $\lim_{n\to\infty} T_0 f_n(x) = \lim_{n\to\infty} -\Delta f_n(x) = -\Delta f(x) = \overline{T_0} f(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$. Also ist f im Abschluss von T_0, d.h. $f \in \operatorname{dom} T_{\min}$ und $T_{\min} f = T_1 f$. Da $T_{\min}$ abgeschlossen ist, folgt damit $\overline{T_1} \subseteq T_{\min}$.

(ii) $T_{\mathcal{F}} \subseteq \overline{T_1}$: Sei $g \in \operatorname{dom} T_{\mathcal{F}}$. Dann ist $\hat{g} \in \operatorname{dom} M_{|k|^2}$ nach Definition von $T_{\mathcal{F}}$. Sei $\varepsilon > 0$. Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ dicht in $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist, gibt es ein $\varphi_\varepsilon \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, sodass $\left\|(1 + |k|^2)(\hat{g} - \varphi_\varepsilon)\right\| < \varepsilon$. Dann ist $\psi_\varepsilon := \mathcal{F}^{-1}(\varphi_\varepsilon) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ und $\hat{\psi}_\varepsilon = \varphi_\varepsilon$, also gilt $\|g - \psi_\varepsilon\| = \|\hat{g} - \varphi_\varepsilon\| < \varepsilon$, da $\mathcal{F}$ unitär. Mit $-\Delta\psi_\varepsilon = \mathcal{F}^{-1}(|k|^2\hat{\psi}_\varepsilon) = \mathcal{F}^{-1}(|k|^2\varphi_\varepsilon)$ erhalten wir

$$\|T_{\mathcal{F}} g - (-\Delta)\psi_\varepsilon\| = \left\|\mathcal{F}^{-1}(|k|^2(\hat{g} - \varphi_\varepsilon))\right\| = \left\||k|^2(\hat{g} - \varphi_\varepsilon)\right\| < \varepsilon.$$

Wir haben also gezeigt, dass $g \in \operatorname{dom} \overline{T_1}$ und $T_{\mathcal{F}} g = \overline{T_1} g$, da $T_{\mathcal{F}} g$ im Abschluss von $(-\Delta)\psi_\varepsilon = T_1\varphi_\varepsilon$ ist.

Damit folgt insgesamt $T_{\mathcal{F}} = T_{\min}$. Wegen $T_{\max} = T_{\min}^* = T_{\mathcal{F}}^* = T_{\mathcal{F}}$ folgt $T_{\mathcal{F}} = T_{\min} = T_{\max}$ mit Proposition 2.1.2. □

Definition 2.1.4. *Der auf* $\operatorname{dom} \mathcal{H}_0 = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : |k|^2 \hat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}$ *durch* $H_0 f = -\Delta f$ *definierte Operator heißt der freie Schrödinger Operator oder der freie Hamiltonian.*

Korollar 2.1.5. H_0 *ist selbstadjungiert mit Spektrum* $\sigma(H_0) = [0, \infty)$ *und Core* $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Beweis. Das Spektrum von $M_{|k|^2}$ ist laut Proposition 1.2.3 $\sigma(M_{|k|^2}) = [0, \infty)$. Wegen unitärer Äquivalenz folgt mit Proposition 1.2.4 $\sigma(H_0) = \sigma(M_{|k|^2}) = [0, \infty)$. Dass $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ Core für H_0 ist, folgt aus der Tatsache, dass H_0 nach Proposition 2.1.3 der Abschluss von T_0 ist. □

2.2 Absolut stetiges Spektrum

Ähnlich wie wir das Spektrum eines Operators T in Punktspektrum, stetiges Spektrum und Resdiualspektrum aufteilen können, wollen wir das Spektrum bzgl. dem Spektralmaß E_T bzw. dem zugehörigen Borelmaß μ_x zerlegen.

Satz 2.2.1 (Stone'sche Formel)**.** *Sei* $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ *selbstadjungiert und* $c \in \mathbb{R}$. *Dann gilt für das Spektralmaß* E *von* T *im Sinne der starken Operatortopologie*

$$E((-\infty, c]) = \lim_{\delta\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\pi i}\int_{-\infty}^{c+\delta} (T - (s + i\varepsilon))^{-1} - (T - (s - i\varepsilon))^{-1}\, ds. \tag{2.2.1}$$

Beweis. Wir definieren für $\lambda, t \in \mathbb{R}$ die Funktionen

$$f_\varepsilon(\lambda, t) := \frac{1}{\pi i}\left[(\lambda - (t + i\varepsilon))^{-1} - (\lambda - (t - i\varepsilon))^{-1}\right],$$

$$f_{\varepsilon,a,b}(\lambda, t) := \int_a^b f_\varepsilon(\lambda, t)\, dt.$$

1. Fall $a, b \in \mathbb{R}$: Sei $(g_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge von Riemann-Summen die punktweise gegen $f_{\varepsilon,a,b}(\lambda, t)$ konvergiert, für alle $\lambda \in \mathbb{R}$. Wegen

$$|f_\varepsilon(\lambda, t)| = \frac{1}{\pi}\frac{|2i\epsilon|}{(\lambda - t)^2 + \varepsilon^2} \leq \frac{2}{\varepsilon\pi},$$

folgt

$$|g_n| \leq \frac{2(b - a)}{\varepsilon\pi}.$$

Also ist $(g_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine gleichmäßig beschränkte Folge, die punktweise gegen $f_{\varepsilon,a,b}$ konvergiert. Damit folgt aus Proposition A.1.2 (v)

$$\lim_{n\to\infty} g_n(T,t) = f_{\varepsilon,a,b}(T,t).$$

in der starken Operatortopologie. Wegen $R_T(z) = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - z)^{-1}\, dE(\lambda)$ erhalten wir

$$f_\varepsilon(T,t) = \frac{1}{\pi i}\left[(T-(t+i\varepsilon))^{-1} - (T-(t-i\varepsilon))^{-1}\right].$$

Somit ist $(g_n(T))_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge von Riemann Summen für das operatorwertige Integral $\int_a^b f_\varepsilon(T,t)\,dt$ und damit folgt $f_{\varepsilon,a,b}(T) = \int_a^b f_\varepsilon(T,t)\,dt$.

2. Fall $a=-\infty$, $b\in\mathbb{R}$: Wegen $\arctan(-\infty) := -\frac{\pi}{2}$ und $\arctan(+\infty) := \frac{\pi}{2}$ folgt

$$|f_{\varepsilon,\alpha,b}| \leq \frac{2}{\pi}\int_\alpha^b \frac{\varepsilon}{(t-\lambda)^2+\varepsilon^2}\,dt = \frac{2}{\pi}\left[\arctan\frac{b-\lambda}{\varepsilon} - \arctan\frac{\alpha-\lambda}{\varepsilon}\right] \leq 2.$$

Damit und wegen $f_{\varepsilon,\alpha,b} \to f_{\varepsilon,-\infty,b}$ für $\alpha\to-\infty$ erhalten wir aus dem Satz von der dominierenden Konvergenz

$$f_{\varepsilon,-\infty,b}(T) = \lim_{\alpha\to-\infty} f_{\varepsilon,\alpha,b}(T) = \int_{-\infty}^b f_\varepsilon(T,t)\,dt.$$

3. Fall $a\in\mathbb{R}$, $b=+\infty$ bzw. 4. Fall $a=-\infty$, $b=+\infty$: Analog.

Wir haben also gezeigt

$$f_{\varepsilon,a,b}(T) = \int_a^b f_\varepsilon(T,t)\,dt \quad \text{für } a,b\in\overline{\mathbb{R}}, a<b.$$

Wir wollen nun das Integral $f_{\varepsilon,a,b}$ explizit berechnen für $\varepsilon\to 0+$

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon\to0+} f_{\varepsilon,a,b}(\lambda) &= \lim_{\varepsilon\to0+}\int_a^b \frac{1}{\pi i}\frac{2i\varepsilon}{(t-\lambda)^2+\varepsilon^2}\,dt = \lim_{\varepsilon\to0+}\frac{2}{\pi}\int_a^b \frac{\varepsilon}{(t-\lambda)^2+\varepsilon^2}\,dt \\
&= \lim_{\varepsilon\to0+}\frac{2}{\pi}\left(\arctan\frac{b-\lambda}{\varepsilon} - \arctan\frac{a-\lambda}{\varepsilon}\right) \\
&= \begin{cases} 0, & \lambda\notin[a,b] \\ 1, & \lambda = a,b \\ 2, & \lambda\in(a,b)\end{cases} = \chi_{[a,b]}(\lambda) + \chi_{(a,b)}(\lambda).
\end{aligned}$$

Da $|f_{\varepsilon,a,b}|\leq 2$ in $\mathbb{R}$ erhalten mit dem Satz von der dominierenden Konvergenz

$$\lim_{\varepsilon\to0+} f_{\varepsilon,a,b}(T) = E([a,b]) + E((a,b)).$$

Für $a=-\infty$ und $b=c$ erhalten wir

$$E((-\infty,c]) + E((-\infty,c)) = \lim_{\varepsilon\to0}\frac{1}{\pi i}\int_{-\infty}^c (T-(s+i\varepsilon))^{-1} - (T-(s-i\varepsilon))^{-1}\,ds.$$

Aus der Rechtsstetigkeit von $E((-\infty,c])$ folgt

$$E((-\infty,c]) = \frac{1}{2}\lim_{\delta\to0}\lim_{\varepsilon\to0}\frac{1}{\pi i}\int_{-\infty}^{c+\delta} (T-(s+i\varepsilon))^{-1} - (T-(s-i\varepsilon))^{-1}\,ds.$$

□

Lemma 2.2.2. *Sei M_φ wieder der maximal definierte Multiplikationsoperator mit $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Dann gilt für das Spektralmaß E_{M_φ}:*

$$E_{M_\varphi}(\Delta)f = \chi_{\varphi^{-1}(\Delta)}f, \;\; f \in L^2(\mathbb{R}^n),\, \Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}).$$

Beweis. Für $z \in \rho\,(M_\varphi)$ gilt $(M_\varphi - z)^{-1} f = \frac{1}{\varphi - z} f$. Damit und mit der Stone'schen Formel (2.2.1) erhalten wir für $c \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}
\langle E((-\infty, c]f, g\rangle &= \lim_{\delta\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{c+\delta}\int_{\mathbb{R}^n}\left[(M_\varphi - (s+i\varepsilon))^{-1} - (M_\varphi - (s-i\varepsilon))^{-1}\right] f\overline{g}\,d\lambda(x)\,ds \\
&= \lim_{\delta\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathbb{R}^n}\int_{-\infty}^{c+\delta}\left(\frac{1}{\varphi(x)-(s+i\varepsilon)} - \frac{1}{\varphi(x)-(s-i\varepsilon)}\right) f\overline{g}\,ds\,d\lambda(x) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\lim_{\delta\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{c+\delta}\frac{2i\varepsilon}{(s-\varphi(x))^2+\varepsilon^2} f\overline{g}\,ds\,d\lambda(x) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\lim_{\delta\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{c+\delta}\frac{\varepsilon}{(s-\varphi(x))^2+\varepsilon^2} f\overline{g}\,ds\,d\lambda(x) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\lim_{\delta\to 0}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\arctan\frac{s-\varphi(x)}{\varepsilon}\Big|_{-\infty}^{c+\delta} f\overline{g}\,d\lambda(x) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\pi} h\, f\overline{g}\,d\lambda(x),
\end{aligned}$$

wobei

$$h = \begin{cases} 1, & c+\delta > \varphi(x) \\ 1/2, & c+\delta = \varphi(x) \\ 0, & c+\delta < \varphi(x) \end{cases}$$

Also erhalten wir

$$\begin{aligned}
\langle E((-\infty, c]f, g\rangle &= \int_{\mathbb{R}^n}\chi_{\{x:\varphi(x)\le c\}} f\overline{g}\,d\lambda(x) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n}\chi_{\varphi((-\infty,c])^{-1}} f\overline{g}\,d\lambda(x) \\
&= \langle \chi_{\varphi((-\infty,c])^{-1}} f, g\rangle.
\end{aligned}$$

Da die Mengen $(-\infty, c]$ für $c \in \mathbb{R}$ die Sigmaalgebra der Borelmengen $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ erzeugen, gilt die Gleichheit für alle $\Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$. □

Lemma 2.2.3. *Seien $S : \operatorname{dom} S \to \mathcal{H}$ und $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ selbstadjungiert mit $T = U^{-1}SU$, wobei $U : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ unitär ist. Dann gilt*

(i) $\left[\int f\, dE_T\right] = U^{-1}\left[\int f\, dE_S\right] U.$

(ii) $E_T = U^{-1}E_S U.$

Beweis. Wir zeigen, dass durch das Spektralmaß $\tilde{E}(\Delta) := U^{-1}E_S(\Delta)U$ ein Funktionalkalkül für T definiert wird.
Wegen $\tilde{E}^2(\Delta) = U^{-1}E_S(\Delta)UU^{-1}E_S(\Delta)U = \tilde{E}(\Delta)$ und $\langle \tilde{E}(\Delta)x, y\rangle = \langle E(\Delta)Ux, Uy\rangle = \langle x, \tilde{E}(\Delta)y\rangle$, $x, y \in \mathcal{H}$ ist $\tilde{E}$ wirklich eine orthogonale Projektion. Die anderen Eigenschaften folgen leicht aus der Tatsache, dass E_S ein Spektralmaß ist. Sei nun f Borel messbar auf $\sigma\,(S) = \sigma\,(T)$ und $\{\Delta_1, \ldots, \Delta_{m(n)}\}$ eine $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$-Partition von $\sigma\,(S)$. Dann gilt für $x \in \mathcal{H}$

$$\int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, d\tilde{E}(\lambda)x = \lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{m(n)} f(\xi_i^n)\tilde{E}(\Delta_i^n)x = \lim_{n\to\infty} U^{-1}\sum_{i=1}^{m(n)} f(\xi_i^n)E_S(\Delta_i^n)Ux = U^{-1}\int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, dE(\lambda)Ux.$$

Insbesondere für $f = id$ und damit $\int_{\mathbb{R}} \lambda\, d\tilde{E}(\lambda)x = U^{-1}SUx = Tx$ für alle $x \in \mathcal{H}$. Also ist $\tilde{E}$ wirklich ein Spektralmaß für T. Wegen der Eindeutigkeit folgt $E_T = \tilde{E}$. □

Für den freien Schrödinger Operator, wo der unitäre Operator U genau die Fouriertransformation $\mathcal{F}$ ist, erhalten wir eine elegante Darstellung für den Funktionalkalkül als Faltungsoperator. Dieses Lemma wird uns helfen die Resolvente R_{H_0} und den Zeitentwicklungsoperator e^{-itH_0} zu definieren:

Lemma 2.2.4. *Sei g Borel messbar auf $\sigma(H_0)$, sodass $g \circ |k|^2 \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt*

$$(g(H_0)f)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{F}^{-1}(g \circ |k|^2))(x-y)f(y)\,dy.$$

Beweis. Sei $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt wegen Lemma 2.2.2

$$g(H_0) = \mathcal{F}^{-1}(g(|k|^2)\mathcal{F}(f)) = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(\mathcal{F}^{-1}(g(|k|^2))\mathcal{F}(f)).$$

Da $\mathcal{F}^{-1}(g(|k|^2) \in L^2(\mathbb{R}^n)$ nach Voraussetzung, folgt aus der Faltungsregel für die Fouriertransformation

$$g(H_0)f = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\mathcal{F}^{-1}(g(|k|^2)) * f = (g(H_0)f)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{F}^{-1}(g \circ |k|^2))(x-y)f(y)\,dy.$$

□

Definition 2.2.5. *Sei $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ ein linearer Operator und $\mathcal{H}_0$ ein abgeschlossener, linearer Teilraum von $\mathcal{H}$. Wir sagen $\mathcal{H}_0$ reduziert den Operator T, falls es lineare Operatoren $T_0 : \operatorname{dom} T \cap \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}$ und $T_1 : \operatorname{dom} T \cap \mathcal{H}_0^\perp \to \mathcal{H}$ gibt mit $T = T_0 \oplus T_1$.*

Lemma 2.2.6. *Sei $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ ein linearer Operator, $\mathcal{H}_0$ ein abgeschlossener, linearer Teilraum von $\mathcal{H}$ und $P_{\mathcal{H}_0}$ die Projektion auf $\mathcal{H}_0$. Gilt $P_{\mathcal{H}_0}T \subseteq TP_{\mathcal{H}_0}$, dann reduziert $\mathcal{H}_0$ den Operator T.*

Beweis. Da $\mathcal{H}_0$ abgeschlossen ist, existiert ein orthogonales Komplement $\mathcal{H}_0^\perp$, sodass $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_0^\perp$. Sei $x \in \operatorname{dom} T$. Aus $P_{\mathcal{H}_0}Tx = TP_{\mathcal{H}_0}x$ folgt $TP_{\mathcal{H}_0} \subseteq \mathcal{H}_0$ für $x \in \operatorname{dom} T$. Analog folgt $T(I - P_{\mathcal{H}_0}) \subseteq \mathcal{H}_0^\perp$. Also sind $\mathcal{H}_0$ und $\mathcal{H}_0^\perp$ invariant unter T und wir definieren

$$\begin{aligned} T_0 &: \operatorname{dom} T \cap \mathcal{H}_0,\ T_0x = TP_{\mathcal{H}_0}x \\ T_1 &: \operatorname{dom} T \cap \mathcal{H}_0^\perp,\ T_1x = T(I - P_{\mathcal{H}_0})x. \end{aligned}$$

Offensichtlich gilt $T = T_0 \oplus T_1$. Also reduziert $\mathcal{H}_0$ den Operator T. □

Proposition 2.2.7. *Sei $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ selbstadjungiert mit Spektralmaß E und $S \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Ist $SE(\Delta) = E(\Delta)S$ für alle $\Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$, dann folgt $ST \subseteq TS$.*

Beweis. Sei f Borel messbar auf $\sigma(T)$ und $x \in \operatorname{dom}[\int f\,dE] = \{x \in \mathcal{H} : \int |f|^2\,d\langle Ex, x\rangle < \infty\}$. Weiteres sei $(\Delta_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine aufsteigende Folge aus $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ mit $\lim_{n\to\infty} \Delta_n = \sigma(T)$. Dann gilt

$$S\left[\int f\,dE\right]x = \lim_{n\to\infty} S\left[\int \chi_{\Delta_n} f\,dE\right]x = \lim_{n\to\infty}\left[\int \chi_{\Delta_n} f\,dE\right]Sx.$$

Aus dem Satz von der monotonen Konvergenz folgt

$$\left[\int |f|^2\,d\langle E(\lambda)Sx, x\rangle\right] = \lim_{n\to\infty}\left[\int |\chi_{\Delta_n} f|^2\,d\langle E(\lambda)Sx, x\rangle\right] = \lim_{n\to\infty}\left\|\left[\int \Delta_n f\,dE\right]Sx\right\|^2 < \infty.$$

Also ist $Sx \in \operatorname{dom}\left[\int f\,dE\right]$. Womit $\lim_{n\to\infty}\left[\int \chi_{\Delta_n} f\,dE\right]Sx = \left[\int f\,dE\right]Sx$. Insbesondere für $f = id$. □

Für den wichtigen Satz 2.2.14 werden wir den Hilbertraum $\mathcal{H}$ geschickt zerlegen. Für die grundlegenden Eigenschaften benötigen wir folgende Propositionen. Wir gehen wie in [5, Chapter 9.1] vor.

Definition 2.2.8. *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralmaß E und $x, y \in \mathcal{H}$ fest. Wir bezeichnen mit $\mu_x(\cdot)$ das nichtnegative endliche Borelmaß $\langle E(\cdot)x, x\rangle$ und mit $\mu_{x,y}(\cdot)$ das endliche komplexe Maß $\langle E(\cdot)x, y\rangle$.*

Definition 2.2.9. *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralmaß E. Wir definieren*

$\mathcal{H}_p(T) := \operatorname{cls}\{\ker(T-\lambda) : \lambda \in \mathbb{R}\}$
$\mathcal{H}_c(T) := \{x \in \mathcal{H} : \lambda \mapsto \mu_x((-\infty, \lambda])$ *stetig in* $\mathbb{R}\}$
$\mathcal{H}_{ac}(T) := \{x \in \mathcal{H} : \mu_x(\cdot)$ *ist absolut stetig bzgl. dem Lebesguemaß*$\}$
$\mathcal{H}_{sing}(T) := \{x \in \mathcal{H} : \mu_x(\cdot)$ *ist singulär bzgl.* $\lambda\} = \{x \in \mathcal{H} : E(N)x = x$ *für alle Lebesgue Nullmengen* $N \subseteq \mathbb{R}\}$
$\mathcal{H}_{sc}(T) := \mathcal{H}_c(T) \cap \mathcal{H}_{sing}(T)$

Proposition 2.2.10. *Sei T selbstadjungiert mit Spektralmaß E. Dann gilt*

(i) *$x \in \mathcal{H}_p(T)$ genau dann, wenn eine höchstens abzählbar unendliche Menge $N \subseteq \mathbb{R}$ existiert, sodass $E(N)x = x$.*

(ii) *$x \in \mathcal{H}_c(T)$ genau dann, wenn für jede einelementige Menge $N \subseteq \mathbb{R}$ gilt $E(N)x = 0$ (und damit auch für jede abzählbar unendliche Menge $N \subseteq \mathbb{R}$).*

(iii) *$\mathcal{H}_p(T)$ und $\mathcal{H}_c(T)$ sind abgeschlossen und orthogonal aufeinander.*

Beweis. (i) Sei $x \in \mathcal{H}_p(T)$. Dann ist x von der Form $\sum_{n=1}^{\infty} x_n$, wobei $Tx_n = \lambda_n x_n$ mit $\lambda_n \in \mathbb{R}$. Da $E(\{\lambda_n\})$ genau die orthogonale Projektion auf den Eigenraum von λ_n ist, gilt $E(\{\lambda_n\}x_n = x_n$. Setze $N := \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\}$, dann folgt

$$E(N)x = E(N)\sum_{n=1}^{\infty} x_n = \sum_{n=1}^{\infty} E(\{\lambda_n\})x_n = \sum_{n=1}^{\infty} x_n = x.$$

Existiere umgekehrt eine höchstens abzählbare Menge $N \subseteq \mathbb{R}$, deren Elemente wir mit λ_n indizieren, sodass $E(N)x = x$. Setze $x_n := E(\{\lambda_n\})x$. Aus Proposition A.1.3 folgt, dass x_n genau dann ungleich 0 ist, wenn x_n Eigenvektor zum Eigenwert λ_n ist. Mit $Tx_n = \lambda_n x_n$ erhalten wir

$$x = E(N)x = \sum_{n=1}^{\infty} E(\{\lambda_n\})x = \sum_{n=1}^{\infty} x_n.$$

Womit $x \in \mathcal{H}_p(T)$.

(ii) Die monoton steigende Funktion $\lambda \mapsto \langle E((-\infty, \lambda])x, x\rangle$ ist genau dann stetig, wenn sie keine Sprungstellen besitzt. Das ist genau dann der Fall, wenn $\langle E(\lambda)x, x\rangle = 0$ bzw. $E(\lambda)x = 0$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$, da E orthogonale Projektion ist. Aus der Sigmaadditivität von E folgt schließlich die Behauptung für abzählbares N.

(iii) $\mathcal{H}_p(T)$ ist laut Definition abgeschlossen, wir zeigen $\mathcal{H}_c(T) = \mathcal{H}_p(T)^{\perp}$. Damit ist $\mathcal{H}_c(T)$ als orthogonales Komplement abgeschlossen.

Sei $x \in \mathcal{H}_p(T)^{\perp}$ und setze $x_\lambda := E(\{\lambda\})x \in \ker T - \lambda \subseteq \mathcal{H}_p(T)$ für $\lambda \in \mathbb{R}$. Wegen $0 = \langle x_\lambda, x\rangle = \langle E(\{\lambda\})x, x\rangle$, folgt $E(\{\lambda\})x = 0$ und daher mit Punkt (ii) $x \in \mathcal{H}_c(T)$.

Sei umgekehrt $x \in \mathcal{H}_c(T)$ und $y \in \mathcal{H}_p(T)$. Nach Punkt (i) existiert eine höchstens abzählbare Menge $N \subseteq \mathbb{R}$, sodass $E(N)y = y$. Außerdem gilt $E(N)x = 0$ wegen Punkt (ii) und daher folgt

$$\langle x, y\rangle = \langle x, E(N)y\rangle = \langle E(N)x, y\rangle = 0.$$

Also ist $x \in \mathcal{H}_p(T)^{\perp}$.

□

Proposition 2.2.11. *$\mathcal{H}_p(T)$, $\mathcal{H}_c(T)$, $\mathcal{H}_{ac}(T)$, $\mathcal{H}_{sing}(T)$ und $\mathcal{H}_{sc}(T)$ sind abgeschlossene lineare Teilräume von $\mathcal{H}$, sodass $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ac}(T) \oplus \mathcal{H}_{sing}(T)$ und $\mathcal{H}_{sing}(T) = \mathcal{H}_p(T) \oplus \mathcal{H}_{sc}(T)$.*

Beweis. Zuerst zeigen wir, dass $\mathcal{H}_{sing}(T)$ ein linearer Raum ist. Offensichtlich ist mit $x \in \mathcal{H}_{sing}(T)$ auch $\lambda x \in \mathcal{H}_{sing}(T)$ für $\lambda \in \mathbb{C}$. Seien $x_1, x_2 \in \mathcal{H}_{sing}(T)$, dann gibt es Lebesgue Nullmengen N_1, N_2 mit $E(N_1)x_1 = x_1$ und $E(N_2)x_2 = x_2$. Offensichtlich ist $N := N_1 \cup N_2$ eine Lebesgue Nullmenge und

es gilt $E(N)x_j = E(N_j)x_j = x_j$ für $j = 1, 2$. Daher erhalten wir $E(N)(x_1 + x_2) = x_1 + x_2$, womit $x_1 + x_2 \in \mathcal{H}_{sing}(T)$.
Wir zeigen , dass $\mathcal{H}_{sing}(T)$ abgeschlossen ist. Sei $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge aus $\mathcal{H}_{sing}(T)$, die gegen ein $x \in \mathcal{H}$ konvergiert. Nach der Definition von $\mathcal{H}_{sing}(T)$ gibt es Lebesgue Nullmengen N_n, sodass $E(N_n)x_n = x_n$. Dann ist $N = \bigcup_{n=1}^{\infty} N_n$ auch eine Lebesgue Nullmenge und $E(N)x_n = E(N_n)x_n = x_n$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Womit $x = \lim\limits_{n\to\infty} x_n = \lim\limits_{n\to\infty} E(N)x_n = E(N)x$. Also ist $x \in \mathcal{H}_{sing}(T)$.
Wir zeigen $\mathcal{H}_{ac}(T) = \mathcal{H}_{sing}(T)^{\perp}$. Sei $x \in \mathcal{H}_{ac}(T)$ und $y \in \mathcal{H}_{sing}(T)$. Nach der Definition von $\mathcal{H}_{ac}(T)$ und $\mathcal{H}_{sing}(T)$ existiert eine Lebesgue Nullmenge N mit $E(N)x = 0$ und $E(N)y = y$. Daher folgt $\langle x, y\rangle = \langle x, E(N)y\rangle = \langle E(N)x, y\rangle = 0$, somit ist $x \in \mathcal{H}_{sing}(T)^{\perp}$. Sei umgekehrt $x \in \mathcal{H}_{sing}(T)^{\perp}$ und N eine Lebesgue Nullmenge. Für $y \in \mathcal{H}$ erhalten wir $u_y := E(N)y \in \mathcal{H}_{sing}(T)$ und somit $\langle E(N)x, y\rangle = \langle x, E(N)y\rangle = \langle x, u_y\rangle = 0$ für alle $y \in \mathcal{H}$. Also folgt $E(N)x = 0$. Da N beliebig war, folgern wir $x \in \mathcal{H}_{ac}(T)$.
Somit folgt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ac}(T) \oplus \mathcal{H}_{sing}(T)$.
Für $x \in \mathcal{H}_p(T)$ gilt wegen Proposition 2.2.10 (i) $E(N)x = x$ für alle höchstens abzählbar unendlichen Mengen $N \subseteq \mathbb{R}$. Da solche N immer Lebesgue Nullmengen sind, erhalten wir $\mathcal{H}_p(T) \subseteq \mathcal{H}_{sing}(T)$. Da $\mathcal{H}_{sc}(T) = \mathcal{H}_c(T) \cap \mathcal{H}_{sing}(T)$ erhalten wir aus $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p(T) \oplus \mathcal{H}_c(T)$ die Zerlegung $\mathcal{H}_{sing}(T) = \mathcal{H}_p(T) \oplus \mathcal{H}_{sc}(T)$.

□

Proposition 2.2.12. *$\mathcal{H}_p(T)$, $\mathcal{H}_c(T)$, $\mathcal{H}_{ac}(T)$, $\mathcal{H}_{sing}(T)$, und $\mathcal{H}_{sc}(T)$ reduzieren den selbstadjungierten Operator T, d.h. $T = T_{sing} \oplus T_{ac} = T_p \oplus T_{sc} \oplus T_{ac}$.*

Beweis. Wir zeigen, dass $\mathcal{H}_{sing}(T)$ den Operator T reduziert. Sei dazu $x \in \mathcal{H}_{sing}(T)$ und bezeichne P_s die orthogonale Projektion auf $\mathcal{H}_{sing}(T)$. Dann existiert eine Lebesgue Nullmenge N, sodass $E(N)x = x$. Wegen $E(N)E(\lambda)x = E(\lambda)E(N)x = E(\lambda)x$, erhalten wir $E(\lambda)x \subseteq \mathcal{H}_{sing}(T)$. Mit Adjungieren folgt $P_sE(\lambda) = (E(\lambda)P_s)^* = (P_sE(\lambda)P_s)^* = P_sE(\lambda)P_s = E(\lambda)P_s$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$. Damit kommutiert E mit P_s für alle Borelmengen $B \in \mathfrak{B}(\mathbb{R})$. Mit Proposition 2.2.7 folgt $P_sT \subseteq TP_s$ und damit folgt mit Proposition 2.2.6, dass $\mathcal{H}_{sing}(T)$ den Operator T reduziert.
Ist $x \in \mathcal{H}_p(T)$, dann existiert eine höchstens abzählbar unendliche Menge $N \subseteq \mathbb{R}$, sodass $E(N)x = x$. Derselbe Beweis zeigt, dass auch $\mathcal{H}_p(T)$ den Operator T reduziert.
Die Unterräume $\mathcal{H}_c(T)$, $\mathcal{H}_{ac}(T)$ und $\mathcal{H}_{sc}(T)$ reduzieren den Operator T, da sie orthogonale Komplemente von reduzierenden Unterräumen sind, siehe Proposition 2.2.10 (iii) und Proposition 2.2.11.

□

Definition 2.2.13. *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralmaß E. Wir definieren*

$$\begin{aligned}\sigma_{pp}(T) &:= \sigma(T|\mathcal{H}_p),\\ \sigma_{ac}(T) &:= \sigma(T|\mathcal{H}_{ac}),\\ \sigma_{sc}(T) &:= \sigma(T|\mathcal{H}_{sc}).\end{aligned}$$

Wir wenden die neue Zerlegung des Spektrums auf den freien Schrödinger Operator H_0 an und zeigen, dass es nur absolut stetiges Spektrum gibt.

Satz 2.2.14. *Der freie Schrödinger Operator H_0 hat rein absolut stetiges Spektrum, d.h. $\sigma_{ac}(H_0) = [0, \infty)$ und $\sigma_{pp}(H_0) = \sigma_{sc}(H_0) = \emptyset$.*

Beweis. Das Spektrum kennen wir aus Korollar 2.1.5. Bleibt zu zeigen, dass das Borelmaß $\mu(\cdot)_f$ rein absolut stetig bzgl. dem Lebesgue Maß λ für alle $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist.
Da H_0 unitär äquivalent zum Multiplikationsoperator M_φ mit $\varphi(x) = \|x\|_2^2$ ist, gilt wegen Lemma 2.2.3 $E_{H_0} = \mathcal{F}^{-1}E_{M_\varphi}\mathcal{F}$. Weiters wissen wir aus Lemma 2.2.2, dass das Spektralmaß E_{M_φ} durch $E_{M_\varphi}(N)f = \chi_{\varphi^{-1}(N)}f$ gegeben ist. Damit folgt

$$\begin{aligned}\mu_f(N) = \|E_{H_0}(N)f\|^2 = \left\|\mathcal{F}^{-1}E_{M_\varphi}(N)\mathcal{F}f\right\|^2 &= \left\|\chi_{\varphi^{-1}(N)}\mathcal{F}f\right\|^2\\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \chi_{\varphi^{-1}(N)}(x)|\mathcal{F}f(x)|^2\, d\lambda_n(x),\\ &\text{wobei } \varphi^{-1}(N) = \left\{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_2^2 \in N\right\}.\end{aligned}$$

Aufgrund der besonderen Gestalt von $\varphi^{-1}(N)$ bietet es sich an, das Integral auf sphärische Koordinaten zu transformieren und in Radial- und Oberflächenanteil aufzuteilen:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^n} \chi_{\varphi^{-1}(N)}(x)|\mathcal{F}f(x)|^2\, d\lambda_n(x) &= \int_{(0,+\infty)} r^{n-1} \int_{S^{n-1}} \chi_{\varphi^{-1}(N)}(ry)|\mathcal{F}f(ry)|^2\, d\nu(y)\, d\lambda(r)\\ &= \int_{(0,+\infty)} r^{n-1} \int_{S^{n-1}} C_n\chi_{\varphi^{-1}(N)}(r)|\mathcal{F}f(ry)|^2\, d\nu(y)\, d\lambda(r)\\ &= \int_{\{r\geq 0: r^2\in N\}} r^{n-1} \int_{S^{n-1}} C_n|\mathcal{F}f(ry)|^2\, d\nu(y)\, d\lambda(r).\end{aligned}$$

Dabei ist $S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\| = 1\}$ die n-dimensionale Einheitssphäre, ν das zugehörige $(n-1)$-dimensionale Oberflächenmaß und C_n eine nur von n abhängige Konstante.
Ist N eine Lebesgue-Nullmenge, so ist $\{r \geq 0 : r^2 \in N\}$ als injektives Bild von N wieder eine Lebesgue-Nullmenge. Also ist $\mu_f(\cdot)$ absolut stetig bezüglich dem Lebesguemaß λ für beliebiges $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. □

Wir erhalten also für den freien Schrödinger Operator H_0, $\mathcal{H}_{ac}(H_0) = L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\mathcal{H}_p(H_0) = \mathcal{H}_{sc}(H_0) = \{0\}$.

2.3 Freie Resolvente und Green'sche Funktion

Als Beispiel wollen wir die Resolvente $R_{H_0}(z)$ von H_0 explizit berechnen. Wir beschränken uns hier auf die Fälle $n = 1$ und $n = 3$.

Lemma 2.3.1. *Sei $G \subseteq \mathbb{C}$ ein Gebiet und $f : G \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ eine Funktion. Weiters sei $x \mapsto f(x, z)$ messbar für alle z und $z \mapsto f(x, z)$ analytisch für alle x. Existiert für alle kompakten Teilmengen $K \subseteq G$ eine integrierbare Funktion g, sodass $|f(x, z)| \leq g(x)$ für alle $z \in K$, dann ist die Funktion*

$$F(z) = \int_{\mathbb{R}} f(x, z)\, dx$$

analytisch auf ganz G.

Beweis. Sei $K \subseteq \mathbb{C}$ kompakt. Wegen

$$\int_K \int_{\mathbb{R}} |f(x, z)|\, dx\, dz \leq \int_K \int_{\mathbb{R}} g(x)\, dxdz < \infty$$

können wir Fubini anwenden und erhalten mit der Voraussetzung

$$\int_K F(z)\, dz = \int_K \int_{\mathbb{R}} f(x, z)\, dx\, dz = \int_{\mathbb{R}} \int_K f(x, z)\, dz\, dx = 0.$$

Nach dem Satz von Morera ist $F(z)$ daher analytisch in G.

□

Lemma 2.3.2. *Sei $f(x) = e^{-z|x|^2/2} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, $Re(z) > 0$. Dann gilt $\hat{f}(k) = \frac{1}{z^{n/2}} e^{-|k|^2/(2z)}$, wobei $z^{n/2}$ durch den komplexen Logarithmus auf $G = \mathbb{C} \setminus \{z \in \mathbb{C} : Re(z) \leq 0\}$ definiert sei.*

Beweis. Wegen

$$e^{-z|x|^2/2} = e^{-z\sum_{i=1}^n x_i^2/2} = \prod_{i=1}^n e^{-zx_i^2/2},$$

reicht es die Behauptung für $x \in \mathbb{R}$ zu beweisen.
Sei zunächst $z > 0$ und setze $\phi_z(x) = e^{-zx^2/2}$. Dann erfüllt $\phi_z(x)$ die Differentialgleichung

$$\phi_z(x)' + zx\phi_z(x) = 0,\ \phi_z(0) = 1.$$

Betrachten wir die Fouriertransformierte Gleichung

$$i(k\hat{\phi}_z(k) + z\hat{\phi}'_z(k)) = 0.$$

Dann erfüllt $\hat{\phi}_z(k)$ dieselbe Differentialgleichung wie $\phi_{1/z}(x)$. Wegen der Eindeutigkeit der Lösung folgt $\hat{\phi}_z(k) = C\phi_{1/z}(x)$, wobei

$$C = \hat{\phi}_z(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-zx^2/2}\, dx = \frac{1}{\sqrt{z}}.$$

Also erhalten wir $\hat{\phi}_z(k) = \frac{1}{\sqrt{z}} e^{-x^2/(2z)}$ für $z > 0$.
Sei nun $z \in \mathbb{C}$ mit $Re(z) > 0$. Offensichtlich ist $e^{-zx^2/2}$ analytisch in z. Setze für jede kompakte Teilmenge $K \subseteq G := \{z \in \mathbb{C} : Re(z) > 0\}$ $m := \min_{z\in K} Re(z)$, dann gilt

$$|e^{-zx^2/2}| \leq e^{-mx^2/2} =: g(x).$$

Also sind die Voraussetzungen von Lemma 2.3.1 erfüllt, daher ist $F(z) = \int_{\mathbb{R}} e^{-zx^2/2}$ analytisch in $z \in G$. Da $F(z) = \frac{1}{\sqrt{z}}$ für $z > 0$ gilt und beide Funktionen analytisch in G sind, folgt die Gleichheit für alle $z \in G$ und damit die Behauptung.

□

Lemma 2.3.3. *Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ mit $f(x) = f(|x|)$. Dann gilt $\hat{f}(k) = \hat{f}(|k|)$ und $\check{f}(k) = \check{f}(|k|)$.*

Beweis. Sei U eine orthogonale lineare Transformation, sodass $|U(x)| = |x|$. Dann folgt wegen $\det U = 1$ und $\lambda_n(U(\cdot)) = \det U \lambda_n(\cdot)$

$$\hat{f}(Uk) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-iUk\cdot x} f(x)\, d\lambda_n(x) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ik\cdot U^{-1}x} f(U^{-1}x)\, d\lambda_n(x) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ik\cdot x} f(x)\, d\lambda_n(x) = \hat{f}(k).$$

Analog für $\check{f}$. □

Satz 2.3.4. *Sei $z \in \rho(H_0)$ und $\sqrt{z}$ so definiert, dass $Im\sqrt{z} > 0$ gilt. Dann gilt für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$*

(i) $n = 1$

$$R_{H_0}(z)f(x) = \int_{\mathbb{R}} G_0(z, x-y) f(y)\, d\lambda(y) = \int_{\mathbb{R}} \frac{i}{2\sqrt{z}} e^{i\sqrt{z}|x-y|} f(y)\, d\lambda(y).$$

(ii) $n = 3$

$$R_{H_0}(z)f(x) = \int_{\mathbb{R}^3} G_0(z, x-y) f(y)\, d\lambda_3(y) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4\pi|x-y|} e^{i\sqrt{z}|x-y|} f(y)\, d\lambda_3(y).$$

Beweis. Da die Funktion $\frac{1}{|x|^2 - z} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist, erhalten wir mit Proposition 2.2.4 für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$

$$R_{H_0}(z)f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \mathcal{F}^{-1}(\frac{1}{|x|^2 - z})(x-y) f(y)\, d\lambda_n(y) = \int_{\mathbb{R}^n} G_0(z, x-y) f(y)\, d\lambda_n(y).$$

Wir müssen also die Fourierkotransformation von $\frac{1}{|x|^2-z}$ berechnen. Für $n = 1$ bzw. $n = 3$ erhalten wir:

(i) Betrachte das Integral

$$G_0(z, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{i|x|k}}{|k|^2 - z}\, dx.$$

Es bietet sich an das Integral mittels Residuensatz auszuwerten, da der Integrand nach Voraussetzung nur bei $|k| = \sqrt{z}$ einen Pol 1-ter Ordnung hat und sonst analytisch ist.
Sei $\gamma_R(t) : [0, \pi] \to \mathbb{C}$ durch $\gamma_R(t) := Re^{it}$ definiert. Dann gilt

$$\begin{aligned} |\frac{1}{2\pi} \int_{\gamma_R} \frac{e^{i|x|k}}{|k|^2 - z}\, dk| &= |\frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \frac{e^{i|x|Re^{it}}}{R^2e^{2it} - z} Rie^{it}\, dt| \leq \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \frac{e^{-R|x|sin(t)}}{|R^2e^{2it} - z|} R\, dt \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \frac{R}{|R^2 - |z||}\, dt \to 0 \text{ für } R \to \infty. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$G_0(z,x) = \lim_{R\to\infty}\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-R}^{R}\frac{e^{i|x|k}}{|k|^2-z}\,dk + \int_{\gamma_R}\frac{e^{i|x|k}}{|k|^2-z}\,dk\right) = 2\pi i \mathrm{Res}(f(\zeta),\zeta=\sqrt{z})$$
$$= 2\pi i\frac{1}{2\pi}\frac{e^{i|x|\sqrt{z}}}{2\sqrt{z}} = \frac{i}{2\sqrt{z}}e^{i|x|\sqrt{z}}.$$

(ii) Da $\frac{1}{|k|^2-z}$ nur von Betrag von k abhängt, folgt mit Lemma 2.3.3 z.B.

$$G_0(z,x) = G_0(z,|x|e_3) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{e^{i|x|k_3}}{|k|^2-z}.$$

Wir transformieren das Integral auf Kugelkoordinaten mit Funktionaldeterminante $r^2\sin(\theta)$ und erhalten

$$\begin{aligned}\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{i|x|r\cos(\theta)}}{r^2-z}r^2\sin(\theta)\,dr\,d\theta\,d\varphi &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{i|x|r\cos(\theta)}}{r^2-z}r^2\sin(\theta)\,dr\,d\theta\\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\frac{r^2}{r^2-z}\frac{e^{i|x|r\cos(\theta)}}{i|x|r}\Big|_0^{\pi}\,dr\\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{|x|}\int_0^{\infty}\frac{r}{r^2-z}\left(e^{i|x|r}-e^{-i|x|r}\right)\,dr\\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{|x|}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{r}{r^2-z}e^{i|x|r}\,dr.\end{aligned}$$

Analog wie im 1-dimensionalen Fall, wollen wir auch hier wieder den Residuensatz anwenden, um das Integral auszuwerten. Dafür sei $\gamma_R(t)$ gleich wie in (i) und es gilt

$$\begin{aligned}\left|\int_{\gamma_R}\frac{r}{r^2-z}e^{i|x|r}\,dr\right| &= \left|\int_0^{\pi}\frac{Re^{it}}{R^2e^{2it}-z}e^{i|x|Re^{it}}Rie^{it}\,dt\right| \le \int_0^{\pi}\frac{R^2e^{-|x|R\cos(t)}}{|R^2e^{2it}-z|}\,dt\\ &\le \int_0^{\pi}\frac{R^2e^{-|x|R\cos(t)}}{|R^2-|z||}\,dt.\end{aligned}$$

Der letzte Integrand ist für hinreichend großes R durch $1+\varepsilon$ beschränkt und konvergiert gegen die 0 Funktion für $R\to\infty$. Also erhalten wir mit dem Residuensatz

$$\begin{aligned}\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{|x|}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{r}{r^2-z}e^{i|x|r}\,dr &= \lim_{R\to\infty}\left(\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{|x|}\int_{-R}^{R}\frac{r}{r^2-z}e^{i|x|r}\,dr + \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{|x|}\int_{\gamma_R}\frac{r}{r^2-z}e^{i|x|r}\,dr\right)\\ &= 2\pi i\mathrm{Res}(f(\zeta),\zeta=\sqrt{z}) = 2\pi i\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{|x|}\frac{\sqrt{z}}{2\sqrt{z}}e^{i|x|\sqrt{z}} = \frac{1}{4\pi|x|}\frac{e^{i\sqrt{z}|x|}}{|x|}.\end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.3.5. Für allgemeines n ist es schwierig die Fourierkotransformation von $\frac{1}{|x|^2-z}$ zu berechnen. Man kann zeigen, dass gilt

$$R_{H_0}(z)\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^n}G_0(z,|x-y|)\psi(y)\,d\lambda_n(y),$$

wobei

$$\begin{aligned}G_0(z,r) &= \int_0^{\infty}\frac{1}{(4\pi t)^{n/2}}e^{-\frac{r^2}{4t}+zt}\,dt\\ &= \frac{1}{2\pi}\left(\frac{\sqrt{-z}}{2\pi r}\right)^{\frac{n}{2}-1}K_{\frac{n}{2}-1}(\sqrt{-z}r).\end{aligned}$$

Dabei sind $K_n(\nu)$ modifizierte Besselfunktionen von der zweiten Art.

3 Quantendynamik der freien Schrödingergleichung

Beispiel 3.0.6. Sei $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine Matrix und betrachte das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}u(t) &= Tu(t), \\ u(0) &= u_0. \end{aligned}$$

Aus der Theorie über Differentialgleichungen wissen wir, dass die Lösung von der Form

$$u(t) = e^{-itT}u_0$$

ist und das asymptotische Verhalten von den Eigenwerten der Matrix T abhängt.

Wir interessieren uns für die Verallgemeinerung des Anfangswertproblems, wo T keine Matrix mehr ist, sondern ein selbstadjungierter Operator. Betrachten wir zum Beispiel das abstrakte Anfangswertproblem für die freie Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}u(t) &= Tu(t), \\ u(0) &= u_0, \end{aligned}$$

für einen selbstadjungierten Operator T. Wir werden sehen, dass der Ausdruck $e^{-itT}u_0$ wohldefiniert ist und die eindeutige Lösung dieses Anfangswertproblems ist. Weiters berechnen wir eine explizite punktweise Darstellung von e^{-itH_0}. Anschließend zeigen wir, dass ein enger Zusammenhang zwischen der Asymptotik von Operatoren der Art e^{-itT} und den spektralen Teilräumen $\mathcal{H}_c(T)$ bzw. $\mathcal{H}_p(T)$ besteht, was auch als RAGE-Satz bekannt ist.

3.1 Der Operator e^{-itT}

Definition 3.1.1. *Eine Menge $U = \{U(t) : t \in \mathbb{R}\}$ auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ heißt stark stetige Gruppe, wenn gilt*

(i) $U(t)U(s) = U(t+s)$ *für* $t, s \in \mathbb{R}$.

(ii) $\lim_{h\to 0} U(t+h)x = U(t)x$ *für* $x \in \mathcal{H}$ *und* $t \in \mathbb{R}$.

Für einen selbstadjungierten Operator $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ mit Spektralmaß E können wir den Operator e^{-itT} mittels Funktionalkalkül definieren. Wegen

$$\operatorname{dom} e^{itT} = \left\{ x \in \mathcal{H} : \int_{\mathbb{R}} |e^{it\lambda}|^2 \, d\langle E(\lambda)x, x\rangle \right\} = \mathcal{H}$$

ist der durch $e^{itT} := \int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} \, dE(\lambda)$ definierte Operator auf ganz $\mathcal{H}$ definiert. Die folgende Proposition zeigt, dass Definition 3.1.1 genau das richtige Setting ist, um Lösungen für Gleichungen wie die freie Schrödingergleichung zu definieren.

Proposition 3.1.2. *Sei $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ selbstadjungiert mit Spektralmaß E und $U = \big\{U(t) := e^{itT} : t \in \mathbb{R}\big\}$. Dann gilt*

(i) Der Operator $U(t) = e^{itT}$ ist unitär für $t \in \mathbb{R}$.

(ii) Die Menge U bildet eine C_0-Gruppe aus unitären Operatoren.

(iii) Der Operator T ist durch U eindeutig festgelegt, d.h.

$$\operatorname{dom} T = \left\{ x \in \mathcal{H} : \frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} U(t)x = \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)x \textit{ existiert} \right\}$$

(iv) Ist $x \in \operatorname{dom} T$, dann gilt

$$iTx = \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} U(t)x. \tag{3.1.1}$$

(v) Ist $x \in \operatorname{dom} T$ und $t \in \mathbb{R}$, dann ist $U(t)x \in \operatorname{dom} T$ und es gilt

$$\frac{d}{dt} U(t)x = iTU(t)x = iU(t)Tx. \tag{3.1.2}$$

Beweis. Wir gehen wie in [5, Proposition 6.1] vor:

(i) Wegen Satz A.1.2 (ii) und (iv) gilt $\|U(t)\| = \left\|e^{it\lambda}\right\|_\infty = 1$ und $U(t)^* = U(-t)$, womit $U(t)^*U(t) = U(t)U(t)^* = I$ für $t \in \mathbb{R}$. Also ist $U(t)$ unitär.

(ii) Bedingung (i) aus Definition 3.1.1 folgt direkt aus Satz A.1.2 (iii). Für die Bedingung (ii) sei $x \in \mathcal{H}$ und definiere $f_h(\lambda) = e^{-it\lambda} - 1$ für $\lambda \in \mathbb{R}$. Offensichtlich gilt $\lim_{h\to 0} f_h(\lambda) = 0$ und $|f_h(\lambda)| \leq 2$. Aus dem Satz von der dominierenden Konvergenz erhalten wir

$$\lim_{h\to 0} \|U(h)x - x\|^2 = \lim_{h\to 0} \int_{\mathbb{R}} |f_h(\lambda)|^2 \, d\langle E(\lambda)x, x\rangle = 0.$$

(iii) Wir definieren einen weiteren Operator auf

$$\operatorname{dom} S = \left\{ x \in \mathcal{H} : \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)x \text{ existiert} \right\}$$

durch $Sx := -i \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)x$.

Wegen $U(h)^* = U(-h)$ folgt für $x \in \operatorname{dom} S$

$$\langle Sx, y\rangle = \lim_{h\to 0} \langle -ih^{-1}(U(h) - I)x, y\rangle = \lim_{h\to 0} \langle x, -i(-h)^{-1}(U(-h) - I)y\rangle = \langle x, Sy\rangle.$$

Also ist S symmetrisch.

Wir zeigen $T \subseteq S$. Sei dazu $x \in \operatorname{dom} T$ und definiere $g_h(\lambda) := h^{-1}(e^{ih\lambda} - 1) - i\lambda$ für $\lambda \in \mathbb{R}$. Offensichtlich gilt $\lim_{h\to 0} g_h(\lambda) = 0$. Wegen $|g_h'(\lambda)| = |i(e^{ih\lambda} - 1)| \leq 2$ folgt weiters mit dem Mittelwertsatz $|g_h(\lambda)|^2 = |g_h(\lambda) - g_h(0)|^2 \leq 4\lambda^2$. Damit erhalten wir aus dem Satz von der dominierenden Konvergenz

$$\lim_{h\to 0} \left\|h^{-1}(U(h) - I)x - iTx\right\|^2 = \lim_{h\to 0} \int_{\mathbb{R}} |g_h(\lambda)|^2 \, d\langle E(\lambda)x, x\rangle = 0.$$

Also folgt $iTx = \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)x$ für $x \in \operatorname{dom} T$, womit $T \subseteq S$. Wegen $T \subseteq S \subseteq S^* \subseteq T^* = T$ folgt schließlich $T = S$.

(iv) Sei $x \in \operatorname{dom} T$, wegen $T = S$ gilt

$$iTx = iSx = i(-i) \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)x = \frac{d}{dt}\Big|_{t=0} U(t)x.$$

(v) Sei $x \in \operatorname{dom} T$ und $t \in \mathbb{R}$. Wegen

$$\lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)U(t)x = \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(t+h) - U(t))x = U(t) \lim_{h\to 0} h^{-1}(U(h) - I)x = U(t)iTx$$

und wegen $\operatorname{dom} T = \operatorname{dom} S$, folgt $U(t)x \in \operatorname{dom} T$ und $iTU(t)x = \frac{d}{dt}U(t)x = U(t)iTx$.

□

Als Anwendung betrachten wir das abstrakte Cauchy-Problem für die freie Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} &i\frac{d}{dt}u(t,x) = -iTu(t,x),\ \ t \in \mathbb{R}, x \in \mathcal{H}, \\ &u(0,\cdot) = u_0. \end{aligned}$$

Gesucht ist eine Lösung $u \in C^1(\mathbb{R}, \mathcal{H})$, sodass $u(t,x) \in \operatorname{dom} T$ und die Gleichung für alle $t \in \mathbb{R}$ erfüllt ist.

Proposition 3.1.3. *Sei $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ selbstadjungiert und $u_0 \in \operatorname{dom} T$. Dann ist*

$$u(t) = e^{-itT}u_0,\ \ t \in \mathbb{R}$$

die eindeutige Lösung des Cauchy-Problems für die freie Schrödingergleichung.

Beweis. Offensichtlich ist $u(t)$ nach Proposition 3.1.2 (v) eine Lösung. Zu zeigen ist nur die Eindeutigkeit. Angenommen es existieren zwei Lösungen u_1 und u_2. Setze $v(t) = u_1(t) - u_2(t)$. Dann gilt $v(0) = u_0 - u_0 = 0$ und

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle v(t), v(t)\rangle &= \langle v'(t), v(t)\rangle + \langle v(t), v'(t)\rangle = \langle -iTv(t), v(t)\rangle + \langle v(t), -iTv(t)\rangle \\ &= \langle -iTu(t), v(t)\rangle + \langle iTv(t), v(t)\rangle = 0. \end{aligned}$$

Also ist $\|v(t)\|$ konstant auf $\mathbb{R}$. Wegen $v(0) = 0$ folgt $v(t) = 0$ auf ganz $\mathbb{R}$ und somit $u_1(t) = u_2(t)$. □

3.2 Die explizite Form von e^{-itH_0}

Wir wollen die stark stetige Gruppe $U = \{U(t) := e^{-itH_0} : t \in \mathbb{R}\}$ explizit für den freien Schrödinger-Operator H_0 berechnen. Wegen $\operatorname{dom} U(t) = L^2(\mathbb{R}^n)$ können wir zumindest für $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ eine explizite Form im L^2-Sinn angeben. Ist $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n) \cap L^1(\mathbb{R}^n)$ so bekommen wir sogar eine explizite Darstellung die punktweise gilt und erhalten, dass die Lösung für große Zeiten verschwindet.
Offensichtlich ist die Funktion $g(x) = e^{-it|x|^2}$ nicht im $L^2(\mathbb{R}^n)$, wir können also nicht wie beim Beispiel der freien Resolvente Proposition 2.2.4 anwenden, um e^{-itH_0} explizit zu berechnen.
Für den nächsten Abschnitt führen wir für $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ folgende Notation ein:

$$\begin{aligned} &u(t)(x) := e^{-itH_0}u_0(x),\ \ t \in \mathbb{R}\setminus\{0\}, x \in \mathbb{R}^n, \\ &u(0) := u_0. \end{aligned}$$

Proposition 3.2.1. *Sei $u_0 \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt*

(i)

$$u(t)(x) = \frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} u_0(y)\, d\lambda_n(y),\ \ x \in \mathbb{R}^n, \tag{3.2.1}$$

$$\|u(t)\|_\infty \le \frac{1}{|4\pi t|^{n/2}} \|u_0\|_1 . \tag{3.2.2}$$

Sei $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt

(ii)

$$u(t) = \lim_{R\to\infty} \frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{K_R(0)} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} u_0(y)\, d\lambda_n(y)$$

im L^2-Sinn.

(iii) $u(t) \in C(\mathbb{R}^n)$ *für* $t \neq 0$.

(iv)

$$\|u(t)\|_2 = \|u_0\|_2 .$$

Beweis. (i) Betrachte die Folge $f_{\varepsilon_n}(x) := e^{-(it+\varepsilon_n)x}$ für eine Nullfolge $(\varepsilon_n)_{n\in\mathbb{N}}$ mit $\varepsilon_n > 0$. Die Folge f_{ε_n} ist gleichmäßig beschränkt durch 1 und konvergiert punktweise gegen $f(x) = e^{-itx}$. Aus Satz A.1.2 (v) folgt, dass $f_\varepsilon(H_0)u_0 \to f(H_0)u_0$ in der starken Operatortopologie.

Da $f_{\varepsilon_n} \circ |x|^2 = e^{-(it+\varepsilon_n)|x|^2} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ können wir Proposition 2.2.4 anwenden, um eine explizite Darstellung zu berechnen. Die inverse Fouriertransformation liefert uns Lemma 2.3.2. Damit ergibt sich für $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} f_\varepsilon(H_0)u_0(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \mathcal{F}^{-1}(f_\varepsilon(|x|^2))(x-y)u_0(y)\,d\lambda_n(y) \\ &= \frac{1}{(4\pi(it+\varepsilon))^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4(it+\varepsilon)}} u_0(y)\,d\lambda_n(y). \end{aligned}$$

Wegen der Konvergenz im starken Sinn, existiert eine Teilfolge $f_{\varepsilon_n}(H_0)(x)$ die punktweise gegen $f(H_0)(x)$ konvergiert. Die Abschätzung

$$\begin{aligned} &|\frac{1}{(4\pi(it+\varepsilon))^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4(it+\varepsilon)}} u_0(y)\,d\lambda_n(y)| \\ &\le C(t) \int |u_0(y)|\,d\lambda_n(y) = C(t)\,\|u_0\|_{L^1} < \infty \end{aligned}$$

zeigt, dass u_0 eine integrierbare Majorante von f_ϵ ist. Damit folgt mit dem Satz von der dominierenden Konvergenz

$$\begin{aligned} e^{-itH_0}u_0(x) &= \lim_{\varepsilon_n\to 0} \frac{1}{(4\pi(it+\varepsilon))^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4(it+\varepsilon)}} u_0(y)\,d\lambda_n(y) \\ &= \frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-y|^2}{4it}} u_0(y)\,d\lambda_n(y). \end{aligned}$$

Die Voraussetzung $u_0 \in L^1(\mathbb{R}^n)$ kann also nicht weggelassen werden.

Aus der expliziten Darstellung erhalten wir für $x \in \mathbb{R}^n$

$$|u(t)(x)| = |\frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} u_0(y)\,d\lambda_n(y)| \le |\frac{1}{(4\pi t)^{n/2}}| \int_{\mathbb{R}^n} |u_0(y)| = |\frac{1}{(4\pi t)^{n/2}}|\,\|u_0\|_1 .$$

(ii) Für allgemeines $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ approximiere u_0 durch $\chi_{K_R(0)}u_0$, wobei $K_R(0) = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\| \le R\}$. Da $\chi_R u_0 \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ gilt die Darstellung (i) im L^2-Sinn, aber nicht mehr punktweise.

(iii) Folgt aus der Stetigkeit von $e^{-|x|^2/2}$.

(iv) Der Opertor e^{-itH_0} ist nach Proposition 3.1.2 (i) unitär. Also folgt $\|u(t)\|_2 = \left\|e^{-itH_0}u_0\right\|_2 = \|u_0\|_2$. □

Nach (3.2.2) zerfließt die Lösung der freien Schrödingergleichung für große Zeiten t. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\|u_0\|_{L^2}$ ist jedoch zeitlich konstant. Die explizite Form (3.2.1) von e^{-itH_0} lässt uns sogar etwas über die Asymptotik der Lösung sagen:

Korollar 3.2.2. *Sei $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt*

$$\lim_{|t|\to\infty} \left\| u(t)(x) \;-\; \left(\frac{1}{2it}\right)^{n/2} e^{i\frac{x^2}{4t}} \hat{u_0}(\frac{x}{2t}) \right\|_{L^2} = 0.$$

Beweis. Sei $u_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Die explizite Darstellung (3.2.1) ergibt

$$\begin{aligned} e^{-itH_0}u_0(x) &= \frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|x-y|^2}{4t}} u_0(y)\, d\lambda_n(y) \\ &= \frac{1}{(4\pi it)^{n/2}} e^{i\frac{|x|^2}{4t}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\frac{|y|^2}{4t}} e^{-i\frac{xy}{2t}} u_0(y)\, d\lambda_n(y) \\ &= \frac{1}{(2it)^{n/2}} e^{i\frac{|x|^2}{4t}} \widehat{e^{i\frac{|y|^2}{4t}} u_0(y)}(\frac{x}{2t}). \end{aligned}$$

Mit der Abschätzung

$$|e^{i\frac{|y|^2}{4t}} - 1| = |\int_0^{|y|^2/4t} ie^{ix}\, dx| \leq \frac{|y|^2}{4t}$$

folgt

$$\begin{aligned} \left\| e^{-itH_0}u_0(x) - \frac{1}{(2it)^{n/2}} e^{i\frac{x^2}{4t}} \hat{u_0}(\frac{x}{2t}) \right\|_{L^2} &= \frac{1}{(2t)^{n/2}} \left\| \widehat{e^{i\frac{|y|^2}{4t}} u_0(y)} - \hat{u_0}(\frac{x}{2t}) \right\|_{L^2} \\ &= \frac{1}{(2t)^{n/2}} \left\| (e^{i\frac{|y|^2}{4t}} - 1)u_0(y) \right\|_{L^2} \\ &= \frac{1}{(2t)^{n/2}} \left(\int_{\mathbb{R}^n} |(e^{i\frac{|y|^2}{4t}} - 1)u_0(y)|^2\, d\lambda_n(y) \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{1}{(2t)^{n/2}} \frac{1}{4t} \left\| |y|^2 u_0(y) \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Die Funktion $|y|^2u_0$ ist im $L^2(\mathbb{R}^n)$, da $u_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ ist. Für $|t| \to \infty$ folgt die Behauptung.
Für allgemeines $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ approximiere u_0 durch eine Folge $u_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. $\square$

Interpretiert man $\|u_0\|_{L^2(\Omega)}$ als Aufenthaltswahrscheinlichkeit und $\|\hat{u_0}\|_{L^2(\Omega)}$ als Impulswahrscheinlichkeit eines Teilchens in einem quantenmechanischen System, so sagt Korollar 3.2.2 gerade: die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen in dem Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ zu finden ist asymptotisch äquivalent dazu, den Impuls des Teilchens im Gebiet $\frac{1}{2t}\Omega$ zu finden.

3.3 RAGE

Wir werden in diesem Abschnitt zeigen, dass es einen direkten Zusammenhang zwischen dem Spektrum eines selbstadjungierten Operators T und dem asymptotischen Verhalten des Operators $U(t) = e^{-itT}$ gibt. Der Hauptsatz 3.3.5 beschreibt eine vollständige Charakterisierung der Räume $\mathcal{H}_p(T)$ und $\mathcal{H}_c(T)$. In gewissem Sinn ist Satz 3.3.5 eine Verallgemeinerung des Lemma's von Riemann-Lebesgue für Operatoren. Wir verbinden [6, Abschnitt 5.2] und [7, Abschnitt 12.2 und 12.3].

Definition 3.3.1. *Ein Operator S heißt relativ kompakt bzgl. einem Operator T, falls $SR_T(z)$ kompakt ist für $z \in \rho(T)$.*

Lemma 3.3.2. *Sei T selbstadjungiert mit Spektralmaß E und $x \in \mathcal{H}$ fest. Ist das Maß $\mu_x(\cdot)$ ac, sc oder pp bzgl. dem Lebesguemaß, so auch das komplexe Maß $\mu_{x,y}$ für alle $y \in \mathcal{H}$.*

Beweis. Sei $x \in \mathcal{H}_{xx}$ und P_{xx} die Projektion auf den Raum $H_{xx}(T)$, wobei $xx \in \{ac, sc, pp\}$. Da $H_{xx}(T)$ den Operator T reduziert folgt

$$\mu_{x,y}(\Delta) = \langle E(\Delta)x, y\rangle = \langle E(\Delta)P_{xx}x, y\rangle = \langle P_{xx}E(\Delta)x, y\rangle = \langle E(\Delta)x, P_{xx}y\rangle = \mu_{x,P_{xx}y},\ \Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}).$$

Sei jetzt μ_x xx bzgl. dem Lebesguemaß und $\tilde{y} = P_{xx}y$. Da $\mathcal{H}_{xx}$ ein linearer Raum ist und wegen

$$4\mu_{x,y}(\Delta) = 4\mu_{x,\tilde{y}}(\Delta) = 4\langle E(\Delta)x, E(\Delta)\tilde{y}\rangle = \mu_{x+\tilde{y}}(\Delta) - \mu_{x-\tilde{y}}(\Delta) + i\mu_{x+i\tilde{y}}(\Delta) - i\mu_{x-i\tilde{y}}(\Delta),$$

ist $\mu_{x,y}$ auch xx bzgl. dem Lebesguemaß. $\square$

Satz 3.3.3 (Wiener). *Sei μ ein endliches komplexes Borelmaß auf $\mathbb{R}$, d.h. $\mu : \mathfrak{B}(\mathbb{R}) \to \mathbb{C}$. Weiters sei $F_\mu(t) := \int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda}\, d\mu(\lambda)$ die Fourier-Transformation von μ. Dann gilt*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} |F_\mu(t)|^2\, dt = \sum_{\lambda\in\mathbb{R}} |\mu(\{\lambda\})|^2.$$

Beweis.

$$\frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} |F_\mu(t)|^2\, dt = \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \int_{\mathbb{R}} e^{-itx}\, d\mu(x) \int_{\mathbb{R}} e^{ity}\, d\overline{\mu}(y)\, dt = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} e^{-it(x-y)}\, dt \right) d\mu(x)\, d\overline{\mu}(y)$$

Setze für festes y

$$H(N,x) = \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} e^{-it(x-y)}\, dt = \frac{1}{N(x-y)} \sin(N(x-y)).$$

Für $x \neq y$ folgt $\lim\limits_{N\to\infty} H(N,x) = 0$. Für $x = y$ erhalten wir mit der Regel von L'Hospital

$$\lim_{N\to\infty} \lim_{x\to y} \frac{1}{N(x-y)} \sin(N(x-y)) = \lim_{N\to\infty} \lim_{x\to y} \frac{1}{N} N \cos(N(x-y)) = 1.$$

Also gilt $\lim\limits_{N\to\infty} H(T,x) = \chi_{\{0\}}(x-y)$. Wegen $|H(N,x)| \leq 1$ folgt mit dem Satz von der dominierenden Konvergenz

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} e^{-it(x-y)}\, dt\, d\mu(x)\, d\overline{\mu}(y) &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \chi_{\{0\}}(x-y)\, dt\, d\mu(x)\, d\overline{\mu}(y) \\
&= \int_{\mathbb{R}} \mu(\{y\})\, d\overline{\mu}(y) = \sum_{\lambda\in\mathbb{R}} |\mu(\{y\})|^2.
\end{aligned}$$

Der letzte Term ist endlich, da μ nach Voraussetzung ein endliches Maß ist. □

Proposition 3.3.4. *Sei T selbstadjungiert und K relativ kompakt bzgl. T. Dann gilt*

(i)

$$\operatorname{dom} T \cap \mathcal{H}_c(T) \subseteq \left\{ x \in \mathcal{H} : \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \left\| K e^{-itT} x \right\|^2 dt = 0 \right\}.$$

(ii)

$$\operatorname{dom} T \cap \mathcal{H}_{ac}(T) \subseteq \left\{ x \in \mathcal{H} : \lim_{|t|\to\infty} \left\| K e^{-itT} x \right\| = 0 \right\}.$$

Ist K zusätzlich beschränkt so gilt (i) für ganz $\mathcal{H}_c(T)$ bzw. (ii) für ganz $\mathcal{H}_{ac}(T)$.

Beweis. Wir führen den Beweis in mehreren Schritten. Zuerst sei K kompakt mit $\dim \operatorname{ran} K < \infty$, dann K kompakt und zuletzt schließlich sei K relativ kompakt bzgl. T.

1. Schritt: Ist $\dim \operatorname{ran} K = 1$, d.h. $K = \langle \psi, \cdot \rangle \varphi$ mit $\|\varphi\| = 1$. So gilt $\left\| K e^{-itT} x \right\| = \left\| \langle \psi, e^{-itT} x \rangle \varphi \right\| = |\langle \psi, e^{-itT} x \rangle| = |\int_{\mathbb{R}} e^{-itT}\, d\langle \psi, E(\lambda) x \rangle| = |\int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda}\, d\mu_{\psi,x}|$.

   Im ersten Fall $x \in \mathcal{H}_c(T)$ folgt mit Satz von Wiener angewandt auf das Maß $\mu_{\psi,x}$

   $$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int_{0}^{N} |\int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda}\, d\mu_{\psi,x}|^2\, dt = \sum_{\lambda\in\mathbb{R}} \mu_{\psi,x}(\{\lambda\}) = 0,$$

   da $E(\{\lambda\})x = 0$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ nach Proposition 2.2.10 (ii).

Im zweiten Fall $x \in \mathcal{H}_{ac}(T)$ gilt $\int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda}\, d\mu_{\psi,x}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} h(\lambda)\, d\lambda$ für ein $h \in L^1(\mathbb{R})$, da $\mu_{\psi,x}$ absolut stetig bzgl. dem Lebesguemaß ist nach Lemma 3.3.2. Mit dem Lemma von Riemann-Lebesgue erhalten wir schließlich

$$\lim_{|t|\to\infty} \left\|Ke^{-itT}x\right\| = \lim_{|t|\to\infty} \left|\int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} h(\lambda)\, d\lambda\right| = 0.$$

Also gilt die Behauptung für K mit $\dim \operatorname{ran} K = 1$.

2. Schritt: Ist $\dim \operatorname{ran} K = n$, so wähle eine Orthonormalbasis $(e_i)_{i=1}^n$ von $\operatorname{ran} K$. Dann gilt

$$Kx = \sum_{i=1}^{n} \langle f_i, x\rangle e_i \text{ mit } f_i = K^* e_i,\ x \in \mathcal{H}.$$

Im ersten Fall $x \in \mathcal{H}_c(T)$ folgt analog mit dem Satz von Wiener

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \left\|Ke^{-itT}x\right\|^2 dt &\le \sum_{i=1}^{n} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \left|\int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda}\, d\mu_{f_i,x}\right|^2 dt \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{\lambda\in\mathbb{R}} |\mu_{f_i,x}(\{\lambda\})|^2 = 0.\end{aligned}$$

Im zweiten Fall $x \in \mathcal{H}_{ac}(T)$ folgt analog mit dem Lemma von Riemann-Lebesgue

$$\lim_{|t|\to\infty} \left\|Ke^{-itT}x\right\| \le \sum_{i=1}^{n} \lim_{|t|\to\infty} \left|\int_{\mathbb{R}} e^{-it\lambda} h_i(\lambda)\, d\lambda\right| = 0.$$

3. Schritt: Sei K kompakt. Wegen der Singulärwertzerlegung existieren Orthonormalsysteme $(e_i)_{i\in\mathbb{N}}$, $(f_i)_{i\in\mathbb{N}}$ in $\mathcal{H}$ und eine monoton fallende Nullfolge $(s_i)_{i\in\mathbb{N}}$ in $\mathbb{R}$, sodass gilt

$$Kx = \sum_{i=1}^{\infty} s_i \langle f_i, x\rangle e_i,\ x \in \mathcal{H}.$$

Setze $K_n = \sum_{n=1}^{n} s_i \langle f_i, \cdot\rangle e_i$, dann ist K_n kompakt und $\dim \operatorname{ran} K_n = n$. Insbesondere gilt $\|K - K_n\| \le \frac{1}{n}$ in der Operatornorm für hinreichend großes n. Mit der Dreiecksungleichung erhalten wir

$$\left\|Ke^{-itT}x\right\| \le \left\|K_n e^{-itT}x\right\| + \frac{1}{n}\|x\|.$$

Nach dem 2. Schritt gilt die Behauptung für K_n und der letzte Term wird beliebig klein für hinreichend großes n. Also folgt die Behauptung für kompaktes K.

4. Schritt: Der Operator $(T - z)$ ist bijektiv von $\operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$ für $z \in \rho(T)$. Also können wir $x \in \operatorname{dom} T$ schreiben als $x = (T - z)^{-1} y$ für ein $y \in \mathcal{H}$. Dabei gilt $y \in \mathcal{H}_c(T)$ genau dann, wenn $x \in \mathcal{H}_c(T)$, da $\mathcal{H}_c(T)$ den Operator T reduziert. Nach Voraussetzung ist $K(T - z)^{-1}$ kompakt. Wegen $Kx = K(T - z)^{-1} y$ folgt die Behauptung aus dem 3. Schritt.

   Für $\mathcal{H}_{ac}(T)$ analog, da $\mathcal{H}_{ac}(T)$ ebenfalls T reduziert.

Sei schließlich K beschränkt und $x \in \mathcal{H}$. Da $\operatorname{dom} T$ dicht in $\mathcal{H}$ ist, finden wir eine Folge $x_n \in \operatorname{dom} T$ mit $\|x - x_n\| \le \frac{1}{n}$ und damit folgt aus der Dreiecksungleichung

$$\left\|Ke^{-itT}x\right\| \le \left\|Ke^{-itT}x_n\right\| + \frac{1}{n}\|K\|.$$

□

Satz 3.3.5 (RAGE)**.** *Sei T selbstadjungiert und K_n eine Folge relativ kompakter Operatoren bzgl. T mit $\lim_{n\to\infty} K_n x = x$, $x \in \mathcal{H}$. Dann gilt*

(i)

$$\mathcal{H}_c(T) = \left\{ x \in \mathcal{H} : \lim_{n\to\infty} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \left\| K_n e^{-itT} x \right\| \, dt = 0 \right\}.$$

(ii)

$$\mathcal{H}_p(T) = \left\{ x \in \mathcal{H} : \lim_{n\to\infty} \sup_{t\geq 0} \left\| (I - K_n) e^{-itT} x \right\| = 0 \right\}.$$

Beweis. (i) Sei $x \in \mathcal{H}_c(T)$. Dann gilt

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int_{-N}^{N} \left\| K_n e^{-itT} x \right\| \, dt \leq \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \left(\int_{-N}^{N} \left\| K_n e^{-itT} x \right\|^2 \, dt \right)^2 \to 0,$$

wegen der Hölder-Ungleichung und Proposition 3.3.4 (i).

Sei umgekehrt $x \notin \mathcal{H}_c(T)$, wegen $\mathcal{H} = \mathcal{H}_c(T) \oplus \mathcal{H}_p(T)$ reicht es zu zeigen, dass $\left\| K_n e^{-itT} x_p \right\| \geq \epsilon$ bzw.

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{t\geq 0} \left\| (I - K_n) e^{-itT} x \right\| = 0.$$

Wir können $e^{-itT} x_p$ mit dem Spektralsatz darstellen als

$$x_p(t) := e^{-itT} x_p = e^{-itT} \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j x_j = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-it\lambda_j} \alpha_j x_j.$$

Setze $x_p^N(t) := \sum_{j=1}^{N} e^{-it\lambda_j} \alpha_j x_j$ und sei $\varepsilon > 0$. Wähle N und n hinreichend groß, sodass gilt

$$\begin{aligned} \left\| (I - K_n) x_p^N(t) \right\| &= \left\| (I - K_n) \sum_{j=1}^{N} e^{-it\lambda_j} \alpha_j x_j \right\| \leq \sum_{j=1}^{N} \left\| (I - K_n) e^{-it\lambda_j} \alpha_j x_j \right\| \\ &\leq \sum_{j=1}^{N} \left\| (I - K_n) \alpha_j x_j \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2 + \|K_n\|}, \end{aligned}$$

und

$$\left\| x_p(t) - x_p^N(t) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2 + \|K_n\|}.$$

Funktioniert wegen der starken Konvergenz von K_n. Dann folgt

$$\begin{aligned} \left\| (I - K_n) e^{-itT} x_p \right\| &\leq \left\| (I - K_n)(x_p(t) - x_p^N(t)) \right\| + \left\| (I - K_n) x_p^N(t) \right\| \\ &\leq \left\| x_p(t) - x_p^N(t) \right\| + \|K_n\| \left\| x_p(t) - x_p^N(t) \right\| + \left\| (I - K_n) x_p^N(t) \right\| \\ &\leq \frac{\varepsilon}{2 + \|K_n\|} + \|K_n\| \frac{\varepsilon}{2 + \|K_n\|} + \frac{\varepsilon}{2 + \|K_n\|} = \varepsilon. \end{aligned}$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig war, folgt

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{t\geq 0} \left\| (I - K_n) e^{-itT} x \right\| = 0.$$

(ii) Sei $x \in \mathcal{H}_p(T)$ dann gilt $\lim_{n\to\infty} \sup_{t\geq 0} \left\|(I-K_n)e^{-itT}x\right\| = 0$ wie gerade gezeigt. Sei umgekehrt $x \notin \mathcal{H}_p(T)$, dann reicht es zu zeigen, dass $\lim_{n\to\infty} \left\|(I-K_n)e^{-itT}x\right\| \neq 0$.

Angenommen $\lim_{n\to\infty} \left\|(I-K_n)e^{-itT}x\right\| = 0$. Dann folgt mit der Dreiecksungleichung nach unten der Widerspruch

$$\begin{aligned}
0 &= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \lim_{n\to\infty} \left\|(I-K_n)e^{-itT}x\right\| \, dt = \lim_{n\to\infty} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \left\|(I-K_n)e^{-itT}x\right\| \, dt \\
&\geq \Big| \left\|e^{-itT}x\right\| - \underbrace{\lim_{n\to\infty} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2N} \int_{-N}^{N} \left\|K_n e^{-itT}x\right\| \, dt}_{=0} \Big| = \left\|e^{-itT}x\right\|.
\end{aligned}$$

□

Bemerkung 3.3.6. Sei $\mathcal{H}$, T und K_n wie in Satz 3.3.5. Nach [7, S. 22] kann man den Satz 3.3.5 wie folgt physikalisch interpretieren:

- Ein $x \in \mathcal{H}$ heißt *gebundener Zustand*, wenn für jedes $\varepsilon > 0$ gilt

$$\left\|(I-K_n)e^{-itT}x\right\| \leq \varepsilon \text{ für alle } t \in \mathbb{R}.$$

  Ein gebundener Zustand ist ein solcher, im dem das Teilchen für alle Zeiten mit Wahrscheinlichkeit beliebig nahe bei 1 in einer hinreichend großen Kugel bleibt.

- Ein $x \in \mathcal{H}$ heißt *Streuzustand*, wenn für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt

$$K_n e^{-itT}x \to 0 \text{ für } |t| \to \infty.$$

  Ein Streuzustand ist ein solcher, in dem das Teilchen für $|t| \to \infty$ jede Kugel endgültig verlassen wird.

- Ein $x \in \mathcal{H}$ heißt *Streuzustand im zeitlichen Mittel*, wenn für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int_{-N}^{N} \left\|K_n e^{-itT}x\right\| \, dt = 0.$$

  Ein Streuzustand im zeitlichen Mittel ist ein solcher, in dem das Teilchen für große Zeitintervalle jede Kugel im zeitlichen Mittel verlassen wird.

Betrachten wir den Spezialfall $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$, $T = H_0$ und $K_n = \chi_{K_n(0)}$. Nach Satz 2.2.14 hat der freie Schrödinger Operator rein absolut stetiges Spektrum. Für die freie Schrödingergleichung existieren also keine gebundenen Zustände, jedes $x \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist ein Streuzustand für H_0 und damit auch ein Streuzustand im zeitlichen Mittel.

Bemerkung 3.3.7. Betrachten wir den Spezialfall $K_n = I$ in Satz 3.3.5. Nach Voraussetzung ist $I(T - \lambda I)^{-1}$ kompakt. Wir wissen, dass die Resolvente genau dann kompakt ist, wenn der Operator T nur diskretes Spektrum hat. Betrachten wir die Darstellung von $\mathcal{H}_p(T)$ in Satz 3.3.5 in diesem Spezialfall, so erhalten wir

$$\mathcal{H}_p(T) = \left\{ x \in \mathcal{H} : \lim_{n\to\infty} \sup_{t\geq 0} \left\|(I-I)e^{-itT}x\right\| = 0 \right\} = \{x \in \mathcal{H} : 0 = 0\} = \mathcal{H}.$$

Als Anwendung von Satz 3.3.5 zeigen wir, dass für den Operator Multiplikation mit χ_K, wobei $K \subset \mathbb{R}^n$ kompakt, die Voraussetzungen erfüllt sind.

Proposition 3.3.8. *Sei $K \subseteq \mathbb{R}^n$ kompakt, dann ist der Operator $\chi_K(H_0 - z)^{-1}$ kompakt für jedes $z \in \rho(H_0) = \mathbb{C} \setminus [0, +\infty)$.*

Beweis. Nach Proposition 2.2.4 (i) gilt

$$\chi_K(x)(H_0-z)^{-1}f(x) = \chi_K(x)\mathcal{F}^{-1}(\frac{1}{|y|^2-z}\mathcal{F}f)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{\mathbb{R}^n}\chi_K(x)e^{ixy}\frac{1}{|y|^2-z}\mathcal{F}f(y)\,dy.$$

Setze

$$k(x,y) = \begin{cases} \frac{e^{ixy}}{(2\pi)^{n/2}}\frac{1}{|y|^2-z}, & x\in K, |y|\le R \\ 0, & \text{sonst.}\end{cases}$$

Offensichtlich ist $k(x,y)\in L^2(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n)$, also ist der durch k erzeugte Integraloperator

$$(K\psi)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} k(x,y)\mathcal{F}\psi(y)\,dy$$

kompakt. Außerdem gilt

$$\begin{aligned}\left\|\chi_K(x)(H_0-z)^{-1}-K\right\| &= \left\|\chi_K\mathcal{F}^{-1}\chi_{\{|y|>R\}}(\frac{1}{|y|^2-z})\mathcal{F}\right\| \le \left\|\chi_{\{|y|>R\}}(\frac{1}{|y|^2-z})\mathcal{F}\right\|_\infty \\ &\le |\frac{1}{|R|^2-z}| \to 0 \text{ für } R\to\infty.\end{aligned}$$

Als Normlimes kompakter Operatoren ist $\chi_K(x)(H_0-z)^{-1}$ kompakt. □

Proposition 3.3.8 gilt auch für Störungen T von H_0, wenn diese immer noch selbstadjungiert sind und $\operatorname{dom} T\subseteq \operatorname{dom} H_0$ gilt.

Korollar 3.3.9. *Sei $T:\operatorname{dom}T\to\mathcal{H}$ selbstadjungiert mit $\operatorname{dom}T\subseteq\operatorname{dom}H_0$. Dann ist $\chi_K(T-z)^{-1}$ kompakt für jede kompakte Teilmenge $K\subseteq\mathbb{R}^n$.*

Beweis. Betrachte den Operator $S:=(H_0-z)(T-z)^{-1}$ für $z\in\rho(T)$. Wegen $(T-z)^{-1}:\mathcal{H}\to\operatorname{dom}T$ ist S nach Voraussetzung wohldefiniert und wegen $\operatorname{dom}(T-z)^{-1}=\mathcal{H}$ gilt $\operatorname{dom}S=\mathcal{H}$. Weiters ist S abgeschlossen, da H_0-z abgeschlossen ist. Mit dem Satz von abgeschlossenen Graphen folgt, dass S beschränkt sein muss. Es gilt

$$\chi_K(T-z)^{-1} = \chi_K(H_0-z)^{-1}(H_0-z)(T-z)^{-1}$$

Als Produkt eines kompakten und eines beschränkten Operators ist $\chi_K(T-z)^{-1}$ kompakt. □

Korollar 3.3.10. *Sei $\Omega\subseteq\mathbb{R}^n$ beschränkt und $u_0\in L^2(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt*

$$\lim_{|t|\to\infty}\left\|\chi_\Omega e^{-itH_0}u_0\right\|_2 = 0.$$

Beweis. Nach Proposition 3.3.8 ist $\chi_\Omega(H_0-z)^{-1}$ kompakt für $z\in\rho(H_0)$. Außerdem hat der freie Schrödinger Operator H_0 rein absolut stetiges Spektrum, d.h. $\mathcal{H}(H_0)=\mathcal{H}_{ac}(H_0)$. Somit folgt mit Proposition 3.3.4 (ii) die Behauptung. □

Zusammenfassend erhalten wir für die Asymptotik der freien Schrödingergleichung folgende Resultate:

(i) Die Lösung zerfließt in der Zeit (Dispersion).
Proposition 3.2.1: Für $u_0\in L^2(\mathbb{R}^n)\cap L^1(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$\|u(t)\|_\infty \le \frac{1}{|4\pi t|^{n/2}}\|u_0\|_1.$$

(ii) Das Teilchen verlässt jede Kugel für große Zeiten t, da die Wahrscheinlichkeit das Teilchen in einem beschränkten Gebiet $\Omega\subseteq\mathbb{R}^n$ zu finden gegen 0 konvergiert.
Korollar 3.3.10: Für $u_0\in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\Omega\subseteq\mathbb{R}^n$ beschränkt gilt

$$\lim_{t\to\infty}\|\chi_\Omega u(t)\|_2 = 0.$$

(iii) Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im $\mathbb{R}^n$ zu finden ist zeitlich konstant.

Proposition 3.2.1: Für $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ gilt

$$\|u(t)\|_2 = \|u_0\|_2 .$$

(iv) Jeder Anfangswert $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist ein Streuzustand und damit ein Streuzustand im zeitlichen Mittel. Insbesondere existieren keine gebundenen Zustände für die freie Schrödingergleichung.

Satz 2.2.14 und Bemerkung 3.3.6: $\sigma_{ac}(H_0) = L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\sigma_{pp}(H_0) = \sigma_{sc}(H_0) = \{0\}$.

A Anhang

Satz A.1.1 (Spektralsatz für unbeschränkte selbstadjungierte Operatoren)**.** *Sei* $T : \operatorname{dom} T \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *ein selbstadjungierter Operator. Dann gibt es genau ein Spektralmaß* E_T *für* $\langle \mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), \mathcal{H} \rangle$*, sodass*

$$T = \int \lambda \, dE(\lambda).$$

Dabei gilt $E(\mathbb{R} \setminus \sigma(T)) = 0$.

Beweis. Siehe [1, Satz 4.6.1]. $\square$

Bezeichne die Menge aller $\mathcal{A}$ messbaren Funktionen $f : \Omega \to \mathbb{C}$ mit $U(\Omega, \mathcal{A})$ und die Menge aller beschränkt $\mathcal{A}$-messbaren Funktionen $f : \Omega \to \mathbb{C}$ mit $\mathcal{B}(\Omega, \mathcal{A})$.

Satz A.1.2 (Funktionalkalkül)**.** *Seien* $f, g \in U(\Omega, \mathcal{A})$.

(i) Für $x \in \mathcal{H}$ *gilt:* $x \in \operatorname{dom} \left[\int f \, dE\right]$ *genau dann, wenn* $\int_\Omega |f|^2 \, d\langle Ex, x\rangle < \infty$.

(ii) $\left[\int f \, dE\right]^* = \int \overline{f} \, dE$ *(Adjungieren bzw. Konjugieren in* $\mathbb{C}$*).*

(iii) $\left[\int fg \, dE\right] = \overline{\left[\int f \, dE\right] \left[\int g \, dE\right]}$ *(Abschluss eines Operators).*

(iv) Ist f *beschränkt, so gilt* $\|f\|_\infty = \left\|\int f \, dE\right\|$.

(v) Ist $f_n \in \mathcal{B}(\Omega, \mathcal{A})$ *eine gleichmäßig beschränkte Folge, die punktweise gegen ein* $f : \Omega \to \mathbb{C}$ *konvergiert, so ist* $f \in \mathcal{B}(\Omega, \mathcal{A})$ *und* $\int f_n \, dE$ *konvergiert gegen* $\int f \, dE$ *bzgl. der starken Operatortopologie.*

Beweis. Siehe [1, Proposition 4.5.6], [2, Bemerkung 7.2.5] und [2, Satz 7.1.8]. $\square$

Proposition A.1.3. *Eine reelle Zahl* λ *ist genau dann Eigenwert für einen selbstadjungierten Operator* $T : \operatorname{dom} T \to \mathcal{H}$*, wenn* $E_T(\{\lambda\}) \neq 0$*. In diesem Fall ist* $E_T(\{\lambda\})$ *die Projektion auf den Eigenraum von* T *bei* λ*.*

Beweis. Siehe [2, Korollar 7.2.11]. $\square$

Literatur

[1] Michael Kaltenbäck. Funktionalanalysis 2. `http://www.asc.tuwien.ac.at/funkana/skripten/main.pdf`, 2014. (25. November 2015).

[2] Michael Kaltenbäck, Harald Woracek, and Martin Blümlinger. Funktionalanalysis 1. `http://www.asc.tuwien.ac.at/funkana/skripten/fana2015.pdf`, 2015. (25. November 2015).

[3] Tosio Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*, volume 132. Springer Science & Business Media, 1995.

[4] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics: Vol.: 2.: Fourier Analysis, Self-Adjointness.* Academic Press, 1975.

[5] Konrad Schmüdgen. *Unbounded self-adjoint operators on Hilbert space*, volume 265. Springer Science & Business Media, 2012.

[6] Gerald Teschl. *Mathematical methods in quantum mechanics*, volume 157. American Mathematical Soc., 2014.

[7] Joachim Weidmann. *Lineare Operatoren in Hilberträumen: Teil 2 Anwendungen.* Teubner, 2003.