Schrödinger Dynamik

Markus Penz - Seminar Mathematische Physik - Okt 2011

1. Das abstrakte Cauchy-Problem

$$\left.\begin{array}{l} \mathrm{i}\partial_t\psi = H\psi \\ \psi|_{t=0} = \psi_0 \end{array}\right\} \tag{1}$$

Dabei ist der Hamiltonian $H : \mathcal{H} \supset D(H) \to \mathcal{H}$ ein linearer, dicht definierter und selbstadjungierter Operator auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$, zum Beispiel $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$. Auch bei zeitabhängigem $H(t)$ wird ein gemeinsamer Definitionsbereich $D(H)$ für alle t angenommen. Für die hier untersuchte Schrödinger Dynamik ist $H = -\Delta + V$ mit V einer reellen (i.A. zeitabhängigen) Funktion, welche auch die Wechselwirkungen der „Quanten“ beinhalten kann.

Definition 1 *Eine Schrödinger Dynamik* ***existiert****, wenn das Cauchy Problem (1) für alle $\psi_0 \in D(H)$ eine eindeutige Lösung $\psi : \mathbb{R} \to \mathcal{H}$ hat.*

Vorbereitend einige grundlegende Definitionen.

Definition 2 *Ein linearer, dicht definierter Operator $T : \mathcal{H} \supset D(T) \to \mathcal{H}$ heißt* ***symmetrisch****, wenn für alle $\varphi, \psi \in D(T)$ gilt*

$$\langle T\varphi, \psi\rangle = \langle \varphi, T\psi\rangle.$$

Diese Eigenschaft lässt sich noch ausdehnen. Sei $D(T^*)$ die Menge aller $\psi \in \mathcal{H}$ für die es zugehörige $\eta \in \mathcal{H}$ gibt, sodass für alle $\varphi \in D(T)$

$$\langle T\varphi, \psi\rangle = \langle \varphi, \eta\rangle.$$

Dies definiert den ***adjungierten*** *oder* ***dualen*** *Operator $T^*\psi = \eta$ auf ganz $D(T^*)$. Für solche symmetrischen Operatoren gilt $D(T^*) \supseteq D(T)$. Gilt für einen symmetrischen Operator $D(T^*) = D(T)$ so heißt er* ***selbstadjungiert****. Wie man leicht sieht ist jeder beschränkte symmetrische Operator somit automatisch selbstadjungiert.*

Definition 3 *Ein linearer, dicht definierter Operator $T : \mathcal{H} \supset D(T) \to \mathcal{H}$ heißt* ***abgeschlossen****, wenn für jede Folge φ_n in $D(T)$ mit $\varphi_n \to \varphi \in \mathcal{H}$ und $T\varphi_n \to \xi \in \mathcal{H}$ gilt, dass $\varphi \in D(T)$ und $\xi = T\varphi$ ist.*

Lemma 1 *Ein selbstadjungierter Operator A ist immer abgeschlossen.*

Beweis. Für alle $\psi \in D(A)$ gilt mit den Bezeichnungen aus der Definition von abgeschlossenen Operatoren $\langle A\varphi_n, \psi\rangle = \langle \varphi_n, A\psi\rangle$ und damit im Limes $n \to \infty$, dass $\langle \xi, \psi\rangle = \langle \varphi, A\psi\rangle$. Damit ist aber $\varphi \in D(A)$ und $\xi = A\varphi$. $\square$

2. Beschränkte, konstante Hamiltonians

Für die Beschränktheit genügt es nach dem Satz von Hellinger-Toeplitz auch, H als symmetrisch und auf ganz $\mathcal{H}$ definiert anzunehmen, wir könnten diese Voraussetzung also ersetzen. Zudem genügt es für beschränkte Operatoren natürlich, „symmetrisch“ statt „selbstadjungiert“ vorauszusetzen, da sie ohnehin auf ganz $\mathcal{H}$ definiert sind.

Definition 4 *Für einen beschränkten Operator A definieren wir*

$$\mathrm{e}^A := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}.$$

Wie man leicht sieht liefert dies wiederum einen beschränkten Operator mit $\|\mathrm{e}^A\| \leq \mathrm{e}^{\|A\|}$.

Theorem 1 *Im Fall H selbstadjungiert, beschränkt und zeitlich konstant existiert eine Schrödinger Dynamik mit $\psi(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\psi_0$.*

Beweis. Einsetzen der Definition für die Exponentialfunktion und gliedweises Differenzieren zeigt sofort, dass $\psi(t)$ eine Lösung von (1) ist.
Angenommen es existiert eine zweite Lösung $\tilde{\psi}(t)$ mit demselben Anfangswert ψ_0 dann löst auch deren Differenz $\varphi = \psi - \tilde{\psi}$ die Differentialgleichung, da H linear ist, und es gilt $\varphi(0) = 0$. Nun ist aber mit Einsetzen der Schrödinger-Gleichung und dem Wissen, dass der Erwartungswert eines selbstadjungierten Operators immer reell ist,

$$\partial_t \|\varphi\|^2 = 2\Re\langle\varphi, \partial_t\varphi\rangle = -2\Re(\mathrm{i}\langle\varphi, H\varphi\rangle) = 0$$

also $\|\varphi(t)\| = \|\varphi(0)\| = 0$ und damit $\psi = \tilde{\psi}$. Dies zeigt auch, dass der Evolutionsoperator $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$ unitär ist. □

Da der Hamiltonian in der Quantenmechanik üblicherweise nicht beschränkt ist, kommt dem folgenden Fall besondere Bedeutung zu.

3. Unbeschränkte, konstante Hamiltonians

Theorem 1 lässt sich auch für unbeschränkte Operatoren formulieren, indem man H durch eine Folge von beschränkten Operatoren H_λ approximiert und darüber den beschränkten, unitären Operator $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$ definiert. Der allgemeinere Fall in Banachräumen wird im Satz von Hille-Yosida behandelt. Als Vorbereitung sind folgende Lemmate vonnöten.

Lemma 2 (von Neumann Formel) *Sei T ein symmetrischer Operator und $z \in \mathbb{C}$ dann gilt*

$$\operatorname{ran}(z - T)^\perp = \ker(\bar{z} - T^*).$$

Beweis. Wir zeigen zuerst, dass $\operatorname{ran}(z - T)^\perp \subseteq \ker(\bar{z} - T^*)$. Ein $\psi \in \operatorname{ran}(z - T)^\perp$ erfüllt natürlich für alle $\varphi \in D(T)$, dass $\langle(z - T)\varphi, \psi\rangle = 0$ also gleichbedeutend $\langle T\varphi, \psi\rangle = \langle\varphi, \bar{z}\psi\rangle$. Damit ist aber nach Definition $\psi \in D(T^*)$ und $\langle\varphi, (\bar{z} - T^*)\psi\rangle = 0$. Da $D(T)$ dicht in $\mathcal{H}$ ist, gilt $(\bar{z} - T^*)\psi = 0$ und damit $\psi \in \ker(\bar{z} - T^*)$.
Für die umgekehrte Inklusion kann man denselben Weg rückwärts beschreiten. □

Lemma 3 *Sei A ein selbstadjungierter Operator und $z \in \mathbb{C}$ mit $\Im z \neq 0$, dann ist $(z-A)^{-1}$ beschränkt und erfüllt*

$$\|(z-A)^{-1}\| \leq |\Im z|^{-1}.$$

Anders gesprochen gehören alle diese z zur Resolventenmenge eines selbstadjungierten Operators. Das Spektrum liegt somit zur Gänze auf der reellen Achse.

Beweis. Für alle $\psi \in D(A)$ gilt

$$\begin{aligned}\|(z-A)\psi\|^2 &= |z|^2\|\psi\|^2 + \|A\psi\|^2 - 2|\Re z|\langle\psi, A\psi\rangle \\ &\geq |z|^2\|\psi\|^2 + \|A\psi\|^2 - 2|\Re z|\,\|\psi\|\,\|A\psi\| \\ &= (\|A\psi\| - |\Re z|\,\|\psi\|)^2 + |\Im z|^2\|\psi\|^2 \\ &\geq |\Im z|^2\|\psi\|^2\end{aligned}$$

und somit

$$\|(z-A)\psi\| \geq |\Im z|\,\|\psi\|. \tag{2}$$

Die gleiche Ungleichung (2) gilt für $\bar{z} - A$ und damit ist $\ker(\bar{z} - A) = \{0\}$. Lemma 2 sagt uns, dass $\operatorname{ran}(z-A)^{\perp} = \ker(\bar{z} - A)$, also muss $\operatorname{ran}(z-A)$ dicht in $\mathcal{H}$ sein. Wir können also einen inversen Operator

$$(z-A)^{-1} : \operatorname{ran}(z-A) \to \mathcal{H}$$

mit dichtem Definitionsbereich definieren, der wegen $\Im z \neq 0$ und (2) die Ungleichung aus Lemma 3 erfüllt und zu einem beschränkten Operator auf ganz $\mathcal{H}$ fortgesetzt werden kann. □

Theorem 2 *Im Fall H selbstadjungiert und zeitlich konstant existiert eine Schrödinger Dynamik mit $\psi(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\psi_0$.*

Beweis. Wir wählen $\lambda > 0$ für $t > 0$ (und entsprechend analog $\lambda < 0$ für $t < 0$, was wir nicht extra zeigen) und definieren $H_\lambda := -\mathrm{i}\lambda - \lambda^2(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}$ welches nach Lemma 3 beschränkt ist und zeigen, dass $H_\lambda \to H$ auf $D(H)$ stark konvergiert, wenn $|\lambda| \to \infty$. Im Anschluss konstruieren wir $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$ als den starken Limes von $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\lambda t}$ auf ganz $\mathcal{H}$.
Im ersten Schritt zeigen wir durch einfaches ausmultiplizieren $(\mathrm{i}\lambda - H)H_\lambda = \mathrm{i}\lambda H$ und somit $H_\lambda = \mathrm{i}\lambda(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}H$ auf $D(H)$. Die Familie $\mathrm{i}\lambda(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}$ ist nach Lemma 3 gleichmäßig durch 1 beschränkt und erfüllt für ein $\psi \in D(H)$

$$\|\mathrm{i}\lambda(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}\psi - \psi\| = \|(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}H\psi\| \leq \frac{1}{|\lambda|}\|H\psi\| \to 0,$$

wodurch $H_\lambda \to H$ stark auf $D(H)$ wenn $|\lambda| \to \infty$. Mit H_λ beschränkt kann die Exponentialreihe $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\lambda t}$ wie in Definition 4 konstruiert werden. Diese sind mit der Ungleichung aus Lemma 3 gleichmäßig beschränkt.

$$\left\|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\lambda t}\right\| = \mathrm{e}^{-\lambda t}\left\|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda^2(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}t}\right\| \leq \mathrm{e}^{-\lambda t}\mathrm{e}^{\lambda^2|t|\cdot\|(\mathrm{i}\lambda - H)^{-1}\|} \leq 1$$

Es bleibt noch zu zeigen, dass diese für $|\lambda| \to \infty$ einen starken Limes haben. Betrachten wir dazu die Norm von

$$\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\lambda t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\mu t}\right)\psi = \int_0^t \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\lambda s}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_\mu(t-s)}\psi\right)\mathrm{d}s.$$

Um die üblichen Eigenschaften der Exponentialfunktion ausnutzen zu können, muss die Familie $\{e^{-iH_\lambda t}\}_{\lambda>0}$ kommutieren. Dies ist jedoch gewährleistet, da offensichtlich $\{H_\lambda\}_{\lambda>0}$ eine kommutierende Familie ist.

$$\begin{aligned}\left\|\left(e^{-iH_\lambda t} - e^{-iH_\mu t}\right)\psi\right\| &\leq \int_0^t \left\|e^{-iH_\lambda s}e^{-iH_\mu(t-s)}\right\| \|(H_\lambda - H_\mu)\psi\| \, ds \\ &\leq |t| \, \|(H_\lambda - H_\mu)\psi\|\end{aligned}$$

Für $|\lambda|, |\mu| \to \infty$ konvergiert dies für $\psi \in D(H)$ gegen 0 und die so gewonnene Cauchy-Folge definiert e^{-iHt} eindeutig auf ganz $D(H)$. Da die $\{e^{-iH_\lambda t}\}_\lambda$ wie oben gezeigt gleichmäßig beschränkt sind und $D(H) \subset \mathcal{H}$ nach Voraussetzung dicht ist, kann das so gewonnene e^{-iHt} eindeutig auf einen beschränkten Operator auf ganz $\mathcal{H}$ fortgesetzt werden.

Wir wollen noch zeigen, dass e^{-iHt} auch für unbeschränkte H unitär ist. Dazu stellen wir fest, dass nach Definition $H_\lambda^* = H_{-\lambda}$ und nach obigem Ergebnis $H_{\pm\lambda} \to H$ auf $D(H)$ gilt. Somit konvergieren aber auch die selbstadjungierten $H_{(\lambda)} := \frac{1}{2}(H_\lambda + H_{-\lambda}) \to H$ auf $D(H)$ und wir können e^{-iHt} genauso gut damit definieren.

$$\langle e^{-iHt}\varphi, e^{-iHt}\psi\rangle = \lim_{|\lambda|\to\infty} \langle e^{-iH_{(\lambda)}t}\varphi, e^{-iH_{(\lambda)}t}\psi\rangle = \langle\varphi, \psi\rangle$$

Der Evolutionsoperator ist damit unitär, was im folgenden auch gleich ausnutzen.

Für die Eindeutigkeit der Lösung $\psi(t) = e^{-iHt}\psi_0$ müssen wir zeigen, dass es keine davon verschiedene direkte Lösung $\tilde{\psi} \in D(H)$ mit derselben Anfangsbedingung $\psi_0 \in D(T)$ des Cauchy-Problems (1) geben kann. Wir betrachten wie in Theorem 1

$$\partial_t\|e^{-iHt}\psi_0 - \tilde{\psi}(t)\|^2 = \partial_t\left(\|e^{-iHt}\psi_0\|^2 + \|\tilde{\psi}(t)\|^2 - 2\Re\langle e^{-iHt}\psi_0, \tilde{\psi}(t)\rangle\right)$$

Die ersten zwei Terme fallen weg, da der Evolutionsoperator unitär ist und aus H selbstadjungiert wie in Theorem 1 $\|\tilde{\psi}(t)\| = const$ für alle t folgt. Im letzten Term nutzen wir ebenso die Unitarität des Evolutionsoperators und wenden die Zeitableitung somit nur auf den rechten Teil an. Nach Vertauschen von Ableitung und $\lim_\lambda$, über den der Evolutionsoperator ja erst definiert ist, ergibt sich mit der Produktregel und Einsetzen der Schrödinger-Gleichung auf $D(H)$ somit

$$\partial_t\left(e^{iHt}\tilde{\psi}(t)\right) = e^{iHt}\left(iH\tilde{\psi}(t) + \partial_t\tilde{\psi}(t)\right) = 0.$$

Damit ist auch die Eindeutigkeit gezeigt. □

Ein interessantes Lemma lässt sich noch notieren, wonach Trajektorien die einmal in $D(H)$ sind immer in $D(H)$ bleiben und umgekehrt.

Lemma 4 *Sei $\psi(t)$ eine Schrödinger Dynamik wie in Theorem 2. Dann gilt zu allen Zeiten $\psi(t) \in D(H)$ wenn $\psi_0 \in D(H)$ und umgekehrt.*

Beweis. Wir betrachten $He^{-iHt}\psi_0$ und zeigen, dass man H und das beschränkte e^{-iHt} vertauschen kann. Somit ist

$$He^{-iHt}\psi_0 = e^{-iHt}H\psi_0$$

und $e^{-iHt}\psi_0$ damit in $D(H)$. Zuerst schreiben wir die Operatoren als Grenzwerte der H_λ Folgen an, wobei wir uns darunter die $H_{(\lambda)}$ Folge aus Theorem 2 vorstellen, bei welcher egal ist, ob $t > 0$ oder $t < 0$.

$$He^{-iHt}\psi_0 = \lim_\lambda H_\lambda \lim_\mu e^{-iH_\mu t}\psi_0 = \lim_\lambda \lim_\mu H_\lambda e^{-iH_\mu t}\psi_0$$

Hier kann man Vertauschen, da $\{H_\lambda\}_\lambda$ eine kommutierende Familie ist und hat damit auf $D(H)$

$$H\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}H.$$

Würde nun für ein $\psi_0 \notin D(H)$ zu irgendeiner Zeit $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\psi_0 \in D(H)$ gelten, so könnte man dieses als neuen Startwert in $D(H)$ auffassen und kommt so zu einem Widerspruch. Demnach gilt auch die Umkehrung. □

Obwohl die Differentialgleichung in (1) eigentlich nur für $\psi \in D(H)$ sinnvoll scheint, kann auf diese Weise eine Lösung zum abstrakten Cauchy-Problem für alle Anfangswerte $\psi_0 \in \mathcal{H}$ durch Evolution mit dem unitären Operator $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$ gewonnen werden. Dies rechtfertigt die übliche Praxis, Lösungen der Schrödinger-Gleichung als Wege in L^2 aufzufassen, obwohl dies nicht dem Definitionsbereich des Hamilton-Operators entspricht.
Die kritische Bedingung an H ist natürlich, dass dies ein selbstadjungierter Operator mit dichtem Definitionsbereich ist. Welche Voraussetzungen dafür an das Potential V gestellt werden müssen, soll der folgende Abschnitt klären.

4. Bedingungen an ein konstantes Potential V

Ein typisches Beispiel wäre der Hamilton eines Atoms mit N Elektronen und punktförmigem, fixem Kern mit Ladungszahl Z im Ursprung.

$$H = \underbrace{-\sum_{i=1}^{N} \Delta_i}_{A} \underbrace{-\sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}_i|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}}_{B}$$

Der Operator A wird im Folgenden als Grundbaustein des Hamiltonians angesehen, der von B nur „gestört“ wird. Wir wollen Bedingungen für B ableiten, unter denen für A selbstadjungiert auf $D(A)$ auch $A + B$ selbstadjungiert auf $D(A)$ ist.

Lemma 5 (Kriterium für Selbstadjungiertheit) *Sei T ein symmetrischer Operator, dann ist er genau dann selbstadjungiert, wenn* $\mathrm{ran}(T \pm \mathrm{i}) = \mathcal{H}$.

Beweis. Angenommen T ist selbstadjungiert, dann ist $\ker(T + \mathrm{i}) = \{0\}$, da es sonst ein $0 \neq \varphi \in D(T)$ mit $T\varphi = -\mathrm{i}\varphi$ gäbe, welches sofort einen Widerspruch verursacht.

$$-\mathrm{i}\langle\varphi, \varphi\rangle = \langle\varphi, T\varphi\rangle = \langle T\varphi, \varphi\rangle = \mathrm{i}\langle\varphi, \varphi\rangle$$

Nach Lemma 2 ist $\mathrm{ran}(T - \mathrm{i})^\perp = \ker(T + \mathrm{i})$, also $\mathrm{ran}(T - \mathrm{i})$ dicht in $\mathcal{H}$.
Es bleibt noch zu zeigen, dass $\mathrm{ran}(T - \mathrm{i})$ abgeschlossen ist. Sei dazu $\varphi_n \in D(T)$ und $(T - \mathrm{i})\varphi_n \to \psi_0$. Wir müssen zeigen, dass es ein $\varphi_0 \in D(T)$ mit $(T - \mathrm{i})\varphi_0 = \psi_0$ gibt. Laut Voraussetzung ist $(T - \mathrm{i})\varphi_n$ aber eine Cauchy-Folge, also

$$\begin{aligned}\|(T - \mathrm{i})(\varphi_n - \varphi_m)\|^2 &= \|T(\varphi_n - \varphi_m) - \mathrm{i}(\varphi_n - \varphi_m)\|^2 \\ &= \|T(\varphi_n - \varphi_m)\|^2 + \|\varphi_n - \varphi_m\|^2 \to 0.\end{aligned}$$

Deshalb müssen auch $T\varphi_n$ und φ_n konvergieren und wir setzen $\varphi_0 = \lim \varphi_n$. Da T nach Lemma 1 abgeschlossen ist, folgt $\psi_0 = \lim(T - \mathrm{i})\varphi_n = (T - \mathrm{i}) \lim \varphi_n = (T - \mathrm{i})\varphi_0$ und $\varphi_0 \in D(T)$. $\mathrm{ran}(T + \mathrm{i}) = \mathcal{H}$ zeigt man analog.

Die umgekehrte Richtung zeigen wir folgendermaßen. Sei $\varphi \in D(T^*)$, dann existiert wegen $\mathrm{ran}(T - \mathrm{i}) = \mathcal{H}$ ein $\psi \in D(T)$ mit $(T - \mathrm{i})\psi = (T^* - \mathrm{i})\varphi$. Nun gilt aber $D(T) \subset D(T^*)$ und somit $\varphi - \psi \in D(T^*)$ und

$$(T^* - \mathrm{i})(\varphi - \psi) = 0.$$

Wegen Lemma 2 und $\mathrm{ran}(T + \mathrm{i}) = \mathcal{H}$ ist aber $\ker(T^* - \mathrm{i}) = \{0\}$ und deshalb $\varphi = \psi \in D(T)$. Dies zeigt $D(T^*) = D(T)$. □

Definition 5 *Seien A, B dicht definierte Operatoren, dann nennt man B einen A-beschränkten Operator, wenn*

(i) $D(B) \supset D(A)$ *und*

(ii) man $a, b \in \mathbb{R}$ *findet, sodass für alle* $\varphi \in D(A) : \|B\varphi\| \leq a\|A\varphi\| + b\|\varphi\|$.

Theorem 3 (Kato-Rellich) *Sei A ein selbstadjungierter Operator und B symmetrisch und A-beschränkt mit relativer Schranke $a < 1$, dann ist $A + B$ selbstadjungiert auf $D(A)$.*

Beweis. Nach dem Kriterium für Selbstadjungiertheit müssen wir zeigen, dass es ein $\mu_0 > 0$ gibt, für welches $\mathrm{ran}(A + B \pm \mathrm{i}\mu_0) = \mathcal{H}$. Der Beweis funktioniert für beliebige $\mu_0 > 0$ genau gleich wie oben für $\mu_0 = 1$.
Nun gilt für alle $\varphi \in D(A)$ und $\mu > 0$

$$\|(A + \mathrm{i}\mu)\varphi\|^2 = \|A\varphi\|^2 + \mu^2\|\varphi\|^2$$

und damit für $\varphi = (A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\psi$ ähnlich wie in Lemma 3

$$1 = \|A(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\|^2 + \mu^2\|(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\|^2$$

und damit $\|A(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\| \leq 1$ und $\|(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\| \leq \mu^{-1}$. Mit der Bedingung, dass B A-beschränkt ist, erhalten wir

$$\|B(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\| \leq a\|A(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\| + b\|(A + \mathrm{i}\mu)^{-1}\| \leq a + \frac{b}{\mu}.$$

Für ein entsprechend großes μ_0 hat $C = B(A + \mathrm{i}\mu_0)^{-1}$ wegen $a < 1$ damit Norm < 1. Deshalb ist $-1 \notin \sigma(C)$, $(\mathrm{id} + C)^{-1}$ als Resolvente beschränkt und somit $\mathrm{ran}(\mathrm{id} + C) = \mathcal{H}$. Wegen A selbstadjungiert ist aber auch $\mathrm{ran}(A + \mathrm{i}\mu_0) = \mathcal{H}$ und deshalb gilt auch für die Zusammensetzung $(\mathrm{id} + C)(A + \mathrm{i}\mu_0) = A + B + \mathrm{i}\mu_0$, die auf $D(A)$ definiert ist

$$\mathrm{ran}((\mathrm{id} + C)(A + \mathrm{i}\mu_0)) = \mathrm{ran}(A + B + \mathrm{i}\mu_0) = \mathcal{H}.$$

Analog funktioniert der Beweis mit $-\mathrm{i}\mu_0$. □

Um den quantenmechanischen Fall mit dem Kato-Theorem behandeln zu können, benötigen wir noch folgendes, eher technisches Lemma.

Lemma 6 *Sei $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\Delta\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, also genau im Defintionsbereich des selbstadjungierten Laplace-Operators $D(\Delta)$, $n \leq 3$ und φ beschränkt und stetig. Dann gibt es für alle $\alpha > 0$ ein $\beta > 0$ unabhängig von φ so, dass*

$$\|\varphi\|_\infty \leq \alpha\|\Delta\varphi\| + \beta\|\varphi\|.$$

Beweis. (wird ausgelassen, zu finden in [Reed-Simon 1975, Th. IX.29]) □

Theorem 4 (Kato) *Ein reelles Potential sei mit $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ gegeben, dann ist $-\Delta + V$ selbstadjungiert auf $D(\Delta) \subset L^2(\mathbb{R}^3)$.*

Beweis. V ist natürlich selbstadjungiert auf $D(V) = \{\varphi : \varphi \in L^2, V\varphi \in L^2\}$ und sei gegeben durch $V = V_1 + V_2$ mit $V_1 \in L^2, V_2 \in L^\infty$. Damit ist

$$\|V\varphi\| \leq \|V_1\| \, \|\varphi\|_\infty + \|V_2\|_\infty \|\varphi\|.$$

und deshalb $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3) \subset D(V)$. Für beliebiges $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ gilt nun aber zusammen mit Lemma 6

$$\|V\varphi\| \leq \underbrace{\alpha\|V_1\|}_{a} \, \|\Delta\varphi\| + (\underbrace{\beta\|V_1\| + \|V_2\|_\infty}_{b})\|\varphi\|.$$

Ist $\varphi \in D(\Delta)$ so wählen wir eine Folge in $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ mit Limes φ und nutzen die Abgeschlossenheit von Δ nach Lemma 1 um zu zeigen, dass obige Ungleichung immer noch gilt.
Da nun α beliebig klein gewählt werden kann, ist V somit Δ-beschränkt mit relativer Schranke $a < 1$ und mit dem Theorem von Kato-Rellich ist $-\Delta + V$ selbstadjunigiert auf $D(\Delta)$. $\square$

Man kann zeigen, dass auch Summen solcher Hamiltonians selbstadjungiert sind, was das typische Problem aus der Quantenmechanik von Anfang des Kapitels löst. Abschließend soll noch auf den Definitionsbereich des selbstadjungierten Laplace-Operators hingewiesen werden, der mit den Schreibweisen aus der Theorie der Sobolev-Räume auch so bezeichnet werden kann:

$$D(\Delta) = \{\varphi : \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n), \Delta\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)\} = H^2(\mathbb{R}^n) = W^{2,2}(\mathbb{R}^n).$$

Im Fall eines beschränkten, offenen Gebietes $\Omega \in \mathbb{R}^n$ muss man für den korrekten Definitionsbereich auch die Randbedingung beachten und erhält:

$$D(\Delta) = H^2(\mathbb{R}^n) \cap H_0^1(\mathbb{R}^n) = W^{2,2}(\mathbb{R}^n) \cap W_0^{1,2}(\mathbb{R}^n).$$

5. Ausblick

Der physikalisch wichtige Fall eines nichtkonstanten Potentials $V(t)$ ist damit natürlich noch nicht einmal angeschnitten und tatsächlich wird das erforschte Feld ab diesem Punkt auch wesentlich dünner. Die Existenz von Lösungen des ursprünglichen Cauchy Problems mit $V(t)$, das auch sich bewegende Singularitäten umfasst, wird in [Yajima 1987] gezeigt. Die erlaubte spezifische Form des externen Potentials ist hier aber insbesondere von der Dimension des Konfigurationsraums und damit der Teilchenzahl abhängig.

Referenzen

Gustafson S J and Sigal I M, *Mathematical Concepts of Quantum Mechanics* (Springer, 2003)
Reed M and Simon B, *Methods of Modern Mathematical Physics* (Academic Press, 1975), Vol. 1-2
Yajima K, *Commun. Math. Phys.* **110**, 415-26 (1987)