(10) Allgemeine Eigenschaften der Schrödinger - Gleichung in $\mathbb{R}^n$

Formal

$$H = -\Delta + V(x),$$

wobei

$$H_0 = -\Delta = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}\right) \qquad \left(\hbar = 1, m = \tfrac{1}{2}\right)$$

der Operator der kinetischen Energie ist, und V ~~[illegible]~~ - der Multiplikationsoperator mit einer meßbaren Funktion $V: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

H_0 ist s.a. mit $D(H_0) = W^{2,2}(\mathbb{R}^n)$ und einem absolut stetigem Spektrum

V is s.a. (und beschränkt) wenn $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Die Summe $H_0 + V$ ist nicht unbedingt s.a.

Ein nützliches Kriterium dafür ist gegeben in Satz von Kato - Rellich. Es sei A ein unbeschränkter Operator mit dichtem $D(A) \subset \mathcal{H}$.

Es sei B ein symmetrischer Operator mit $D(B) \supset D(A)$ und

$$\|B\psi\| \leq a\,\|A\psi\| + b\,\|\psi\| \quad \text{mit} \quad a < 1, \quad \forall \psi \in D(A)$$

$\Updownarrow$

$$\|B\psi\|^2 \leq \alpha\,\|A\psi\|^2 + \beta\,\|\psi\|^2 \quad \text{mit} \quad \alpha < 1, \quad \forall \psi \in D(A).$$

Dann $H = A + B$ mit $D(H) = D(A)$ ist s.a.

Beweis. Da A s.a., gilt $\forall \lambda \in i\mathbb{R}$:

$$R_\lambda = (A - \lambda I)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \text{ und Bild } R_\lambda = D(A)$$

($A - \lambda I : D(A) \to \mathcal{H}$ ist eine Bijektion mit beschränkten Umkehroperator)

Wir brauchen zu zeigen, dass

$$\text{Bild}\,(H+\lambda I) = \text{Bild}\,(H-\lambda I) = \mathcal{H}$$

für ein $\lambda \in i\mathbb{R}$ (dann für alle $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \sigma(H)$).

Es gilt:

$$H-\lambda I = A-\lambda I + B = (I + BR_\lambda)(A-\lambda I).$$

Um zu zeigen, daß $\text{Bild}\,(H-\lambda I) = \mathcal{H}$, reicht es zu zeigen, daß $\|BR_\lambda\| < 1$ für genügend großes λ, weil es würde folgen, daß $I+BR_\lambda$ beschränkt und umkehrbar ist, und $\text{Bild}\,(I+BR_\lambda) = \mathcal{H}$.

$$\|(A-\lambda I)\psi\|^2 = \|A\psi\|^2 + |\lambda|^2\|\psi\|^2, \quad \text{einsetzen } \varphi = (A-\lambda I)\psi$$

$$\Leftrightarrow \quad \|\varphi\|^2 = \|A\psi\|^2 + |\lambda|^2\|R_\lambda\varphi\|^2 > |\lambda|^2\|R_\lambda\varphi\|^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \|R_\lambda\varphi\| \le \frac{1}{|\lambda|}\|\varphi\|$$

$$> \|A\psi\|^2 = \|AR_\lambda\varphi\|^2$$

$$\Longrightarrow \|AR_\lambda\varphi\| \le \|\varphi\|$$

Jetzt die Bedingung mit $\psi = R_\lambda\varphi$ gibt

$$\|BR_\lambda\varphi\| \le a\|AR_\lambda\varphi\| + b\|R_\lambda\varphi\| \le \left(a + \frac{b}{|\lambda|}\right)\|\varphi\|$$

$$< \|\varphi\| \Longrightarrow \|BR_\lambda\| < 1,$$

wenn λ genügend groß ist. $\square$

<u>Anwendungsbeispiel</u>:

$H = H_0 + V_1 + V_2$ in $\mathbb{R}^3$,

wobei $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, ist s.a. mit $D(H) = W^{2,2}(\mathbb{R}^3)$.

Wir zeigen, daß die Bedingung von Kato erfüllt ist auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \subset W^{2,2}(\mathbb{R}^3)$. Für $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ haben wir:

$$\|V\varphi\|_2 \leq \|V_1\|_2 \|\varphi\|_\infty + \|V_2\|_\infty \|\varphi\|_2$$

Wir zeigen: $\forall a > 0 \; \exists b > 0$:

$$\|\varphi\|_\infty \leq a \|H_0\varphi\|_2 + b\|\varphi\|_2 \qquad (*)$$

Denn

$$\|V\varphi\|_2 \leq \underbrace{a\|V_1\|_2}_{\text{kann beliebig klein gemacht werden}} \|H_0\varphi\|_2 + (b\|V_1\|_2 + \|V_2\|_\infty)\|\varphi\|_2,$$

und wir können Kato-Rellich anwenden.

Es bleibt, $(*)$ zu zeigen. Es genügt, zu zeigen:

$$\|\hat\varphi\|_1 \leq a\|\lambda^2\hat\varphi\|_2 + b\|\hat\varphi\|_2$$

(da die FT ist beschränkt als $L^1 \to L^\infty$ und isometrisch als $L^2 \to L^2$). Für $n=3$ und $\varphi \in D(H_0)$,

$$(1+\lambda^2)\hat\varphi \text{ und } (1+\lambda^2)^{-1} \in L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow \left(\text{Schwarzsche Ungleichung}\right)$$

$$\Rightarrow \|\hat\varphi\|_1 \leq c\,\|(\lambda^2+1)\hat\varphi\|_2 \leq c(\|\lambda^2\hat\varphi\|_2 + \|\hat\varphi\|_2)$$

$$\left(\text{mit } c^2 = \int (1+\lambda^2)^{-2} d\lambda\right)$$

$\boxed{\text{VL 19, 11.01.2011}}$

Jetzt ersetze $\hat\varphi(\lambda)$ durch $\hat\varphi_r(\lambda) = r^3\hat\varphi(r\lambda)$, $r>0$.

Dann

$$\left.\begin{aligned} &\|\hat\varphi_r\|_1 = \|\hat\varphi\|_1 \\ &\|\hat\varphi_r\|_2 = r^{3/2}\|\hat\varphi\|_2 \\ &\|\lambda^2\hat\varphi_r\|_2 = r^{-1/2}\|\lambda^2\hat\varphi\|_2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{aligned} &\|\hat\varphi_r\|_1 \leq c(\|\lambda^2\hat\varphi_r\|_2 + \|\hat\varphi_r\|_2) \\ &\Updownarrow \\ &\|\hat\varphi\|_1 \leq c r^{-1/2}\|\lambda^2\hat\varphi\|_2 + \\ &\quad + c r^{3/2}\|\hat\varphi\|_2 \end{aligned}$$

92

__Beispiel.__ $H = -\Delta - \frac{e^2}{|x|}$ ist s.a.

$V := -\frac{e^2}{r} = V_1 + V_2$, wobei $V_1 = \chi(|x| \leq 1) V \in L^2$ und
$V_2 \equiv (1 - \chi(|x| \leq 1)) V \in L^\infty$

11 Drehimpuls

$$L_1 = Q_2 P_3 - Q_3 P_2, \quad L_2 = Q_3 P_1 - Q_1 P_3, \quad L_3 = Q_1 P_2 - Q_2 P_1$$

(keine Anordnungsprobleme, da alles kommutiert).

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

Kommutationsrelationen:

$$[L_1, L_2] = i\hbar L_3, \quad [L_2, L_3] = i\hbar L_1, \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2$$

$$[L^2, L_1] = [L^2, L_2] = [L^2, L_3] = 0$$

(in der Tat,

$$[L_1, L_2] = [Q_2 P_3 - Q_3 P_2, Q_3 P_1 - Q_1 P_3]$$
$$= Q_2 P_1 [P_3, Q_3] + Q_1 P_2 [Q_3, P_3]$$
$$= i\hbar (Q_1 P_2 - Q_2 P_1) = i\hbar L_3$$

und

$$[L^2, L_1] = [L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, L_1] = [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1]$$
$$= [L_2, L_1] L_2 + L_2 [L_2, L_1] + [L_3, L_1] L_3 + L_3 [L_3, L_1]$$
$$= -i\hbar L_3 L_2 - i\hbar L_2 L_3 + i\hbar L_2 L_3 + i\hbar L_3 L_2 = 0)$$