STREUTHEORIE

Joachim Weidmann

Fachbereich Mathematik
der Universität Frankfurt

Februar 1995

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

1.1 Bemerkungen zum Streuprozeß

Obwohl zur Mathematischen Streutheorie auch zahlreiche Bereiche gerechnet werden, die mit der physikalischen Vorstellung von Streuung nichts zu tun haben, ist die gesamte Theorie ohne ein gewisses Verständnis des Streuprozesses kaum denkbar. Es soll deshalb zunächst kurz darauf eingegangen werden. Dabei wird hier die klassische Physik im Vordergrund stehen; später werden wir uns dagegen hauptsächlich mit quantenmechanischer Streuung befassen.

Tatsächlich tritt Streuung in praktisch jedem Bereich der Physik auf, z. B.: Streuung klassischer Teilchen an einem Potential, Streuung quantenmechanischer Teilchen an einem Kern (oder den Kernen eines Gitters, ...), Streuung einer Schallwelle an einem Hindernis. Immer geht man dabei von der Vorstellung aus, daß ein Prozeß in der fernen Vergangenheit und in der fernen Zukunft „frei" abläuft (da weit entfernt). Ein Streuproblem wird als gelöst betrachtet, wenn man zu jedem „freien Zustand" in der Vergangenheit den zugehörigen „freien Zustand" in der Zukunft (und evtl. umgekehrt) angeben kann; diese Abbildung wird dann meist als „Streuoperator" bezeichnet.

Wir wollen versuchen, dies mathematisch etwas präziser zu formulieren: Ein physikalischer Vorgang wird in der Regel durch eine ***Evolutionsgleichung***

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t) = F(u(t))$$

beschrieben, wobei $u(t)$ den Zustand des Systems zur Zeit t beschreibt, z. B.

$$u(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ \dot{x}(t) \end{pmatrix} = \left\{ \begin{array}{l} \text{„Ort" eines klassischen Teilchens} \\ \text{im Phasenraum } \mathbb{R}^6 \text{ zur Zeit } t\,, \end{array} \right.$$

$$u(\cdot\,,t) \in L_2(\mathbb{R}^3) \left\{ \begin{array}{l} \text{die Wellenfunktion eines quantenmechanischen} \\ \text{Teilchens zur Zeit } t\,. \end{array} \right.$$

Im zweiten Fall beschreibt $|u(\cdot,t)|^2$ die Dichte für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens. Die rechte Seite der Evolutionsgleichung ist in diesen Fällen gegeben durch:

$$F \begin{pmatrix} x(t) \\ \dot{x}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{x}(t) \\ -\dfrac{1}{m}\operatorname{grad} V(x(t)) \end{pmatrix},$$

wobei V das ***Potential*** (d. h. $-\operatorname{grad} V$ das Kraftfeld) ist, in dem sich das klassische Teilchen bewegt, bzw.

$$F(u(\cdot,t)) = -iHu(\cdot,t)\,,$$

wobei H der ***Schrödingeroperator*** des Teilchens ist, also z. B. $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\cdot)$ für ein Teilchen der Masse m im Potential V.

Auf den quantenmechanischen Fall werden wir noch sehr ausführlich zurückkommen. Hier betrachten wir nur den (zumindest begrifflich) einfacheren Fall eines klassischen Teilchens.

Nehmen wir der Einfachheit halber an, daß das Potential (und damit das Kraftfeld) einen kompakten Träger hat und das Teilchen sich für große $|t|$ außerhalb dieses Trägers bewegt. Dann gilt

$$\begin{aligned} \text{für } t \text{ nahe } -\infty: \qquad x(t) &= x_- + tv_-\,, \\ \text{für } t \text{ nahe } +\infty: \qquad x(t) &= x_+ + tv_+\,, \end{aligned}$$

wobei wegen Energieerhaltung offenbar $|v_+| = |v_-|$ ist. Dabei ist klar, daß man prinzipiell, d. h. wenn das Potential so „gutartig" ist, daß das Teilchen nicht eingefangen werden kann (non–trapping), die Größen x_+ und $v_+ = \dot{x}(t)\Big|_{t \longrightarrow \infty}$ aus x_- und $v_- = \dot{x}(t)\Big|_{t \longrightarrow -\infty}$ durch Integration der Bewegungsgleichung erhält (mit einer Anfangsbedingung $x(t_0) = x_- + t_0 v_-$, $\dot{x}(t_0) = v_-$ mit t_0 so nahe bei $-\infty$, daß für $t < t_0$ gilt $x_- + tv_- \notin \operatorname{supp} V$). Der „Streuoperator" ist dann die Abbildung

$$\begin{pmatrix} x_- \\ v_- \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} x_+ \\ v_+ \end{pmatrix}.$$

Er ist also für alle $x_-, v_- \in \mathbb{R}^3$ definiert; da alles umkehrbar ist, ist diese Abbildung dann auch surjektiv, d. h. jedes $\binom{x}{v}$ kommt als „Anfangszustand" und als „Endzustand" vor.

Betrachten wir zur Illustration den 1–dimensionalen Fall (vgl. Bild):

Für Energien $< E_0$ wird das Teilchen reflektiert, wobei die Geschwindigkeit zeitweise variiert, aber insgesamt nur ihr Vorzeichen wechselt; der Streuoperator hat also die Form

$$(x_-, v_-) \longmapsto (x_+(x_-, v_-),\ -v_-)\,.$$

Für $E > E_0$ läuft das Teilchen durch, wobei seine Geschwindigkeit zeitweise variiert, am Ende aber wieder gleich v_- ist; gegenüber der freien Bewegung tritt aber i. allg. eine zeitliche Verschiebung ein; der Streuoperator hat also die Form

$$(x_-, v_-) \longmapsto (x_+(x_-, v_-), v_-)\,.$$

Betrachten wir nun noch den Grenzfall, wo „$V(x) = \infty$“ in $G := \operatorname{supp} V$ gilt, d. h. das Teilchen wird am Rand von G gemäß dem üblichen Reflexionsgesetz reflektiert. Zumindest wenn der Rand von G nicht zu kompliziert ist, wird das Teilchen sich nach einiger Zeit von G entfernen (non–trapping boundary).

Wenn das Potential keinen kompakten Träger hat, sondern weit draußen nur hinreichend klein ist, wird die Bewegung auch für sehr große (negative bzw. positive) Zeiten nicht exakt durch $x_{\mp} + tv_{\mp}$ beschrieben. Aber man wird u. U. erwarten, daß die Bewegung asymptotisch frei ist, d. h.

$$\text{es existieren } x_{\mp} \text{ und } v_{\mp} \text{ mit } \quad |x(t) - x_{\mp} - tv_{\mp}| \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \longrightarrow \mp\infty \,. \tag{1}$$

Tatsächlich muß hierfür das Potential im Unendlichen „sehr klein“ sein. Schon für das Coulombpotential gilt die Aussage nicht:

Satz 1.1 *Ein* 1*–dimensionales klassisches Teilchen bewege sich mit positiver Gesamtenergie in einem konservativen Kraftfeld mit dem Potential* $V(x) = C(1+|x|)^{-\alpha}$ *mit* $\alpha > 0$ *und* $C \neq 0$. *Dann gilt zusätzlich* (1) *genau dann, wenn* $\alpha > 1$ *ist.*

Beweis. O. E. sei $m = 2$ (d. h. wir verzichten auf unnötige Konstanten). Es genügt offensichtlich, den Fall $t \longrightarrow +\infty$ zu betrachten. Die Anfangsbedingung sei so gewählt, daß $x(t) \longrightarrow \infty$ für $t \longrightarrow \infty$ gilt (Entsprechendes gilt für den Fall $x(t) \longrightarrow -\infty$ für $t \longrightarrow +\infty$).

Aus $|\dot{x}(t)|^2 = E - V(x(t))$ (E = Gesamtenergie) folgt dann

$$\dot{x}(t) = \Big(E - V(x(t))\Big)^{1/2} \longrightarrow \sqrt{E} \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty \tag{2}$$

(man beachte, daß $\dot{x}(t)$ für große t das Vorzeichen nicht wechseln kann und deshalb $\dot{x}(t) > 0$ gelten muß).

Sei zunächst $\alpha > 1$ (in diesem Fall genügt es sogar, $|V(x)| \le C(1 + |x|)^{-\alpha}$ vorauszusetzen): Wegen (2) gibt es Konstanten $t_0 \in \mathbb{R}$, $x_1 \in \mathbb{R}$ und $v_1 > 0$ mit

$$v_1 \le \dot{x}(t) \quad \text{und} \quad x_1 + v_1 t \le x(t) \qquad \text{für} \quad t \ge t_0\,.$$

Nach dem Mittelwertsatz gilt mit einem η zwischen 0 und y

$$(E - y)^{1/2} \;=\; (E - 0)^{1/2} + y\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\Big\{(E - s)^{1/2}\Big\}\Big|_{s=\eta} \;=\; \sqrt{E} - \frac{y}{2(E - \eta)^{1/2}}\,.$$

Für große t ist z. B. $E - V(x(t)) > \dfrac{E}{2}$ und somit

$$\begin{aligned}
\dot{x}(t) &= \Big(E - V(x(t))\Big)^{1/2} = \sqrt{E} + O\Big((1 + t)^{-\alpha}\Big)\,,\\
x(t) &= x_0 + \sqrt{E}t + \int\limits_{t_0}^{t} O\Big((1 + \tau)^{-\alpha}\Big)\,\mathrm{d}\tau\\
&= x_0 + \sqrt{E}t + \int\limits_{t_0}^{\infty} O\Big((1 + \tau)^{-\alpha}\Big)\,\mathrm{d}\tau - \int\limits_{t}^{\infty} O\Big((1 + \tau)^{-\alpha}\Big)\,\mathrm{d}\tau\\
&= \tilde{x}_0 + \sqrt{E}t - \int\limits_{t}^{\infty} O\Big((1 + \tau)^{-\alpha}\Big)\,\mathrm{d}\tau = \tilde{x}_0 + \sqrt{E}t + O(t^{1-\alpha})\,.
\end{aligned}$$

Das ist die Behauptung in diesem Fall (dabei ist $x_+ = \tilde{x}_0$, $v_+ = \sqrt{E}$).

Sei nun $\alpha \le 1$: Dann gilt wegen (2) für geeignete $c_1, c_2 > 0$ bzw. $c_1, c_2 < 0$ (abhängig davon, ob C größer oder kleiner 0 ist) und große t

$$\dot{x}(t) = (E - V(x(t)))^{1/2} \begin{cases} \le \sqrt{E} - c_1(1 + t)^{-\alpha}\,,\\ \ge \sqrt{E} - c_2(1 + t)^{-\alpha}\,,\end{cases}$$

$$x(t)\begin{cases}\leq \sqrt{E}t + c_3 - \dfrac{c_1}{\alpha}(1+t)^{1-\alpha}\,,\\ \geq \sqrt{E}t + c_4 - \dfrac{c_2}{\alpha}(1+t)^{1-\alpha}\,.\end{cases}$$

(Für $\alpha = 1$ ist hier $\dfrac{1}{\alpha}(1+t)^{1-\alpha}$ durch $\ln(1+t)$ zu ersetzen.) Würde (1) gelten, so wäre für große t mit geeigneten x_+, v_+

$$\sqrt{E}t + c_4 - \frac{c_2}{\alpha}(1+t)^{1-\alpha} - 1 \leq x_+ + v_+ t \leq \sqrt{E}t + c_3 - \frac{c_1}{\alpha}(1+t)^{1-\alpha} + 1\,.$$

Das ist für alle hinreichend großen t nur möglich, wenn gilt:

$$\sqrt{E} \;\leq\; v_+ \;\leq\; \sqrt{E}\,, \qquad \text{also} \quad v_+ \;=\; \sqrt{E}\,,$$

und

$$c_1 \;=\; 0\,.$$

Letzteres ist ein Widerspruch; diesen erhält man entsprechend im Fall $\alpha = 1$. □

Auch in der quantenmechanischen Streuung wird sich zeigen, daß das Coulombpotential ein Grenzfall ist. Die üblichen (Møller–)„Wellenoperatoren“ existieren nur für Potentiale, die schneller fallen.

Tatsächlich haben wir zuviel verlangt. Messen kann man ohne weiteres nur die Geschwindigkeit $v_\mp$ (Richtung und Betrag) vor und nach der Streuung. Diese sollte asymptotisch konstant sein, und das gilt natürlich auch für langsam abfallende Potentiale (vgl.(2)).

Wir beschreiben nun noch am klassischen Modell das Vorgehen in der quantenmechanischen Streutheorie. Ein Zustand des Systems werde beschrieben durch (x_0, v_0), den Ort und die Geschwindigkeit zur Zeit 0. Die asymptotisch freien Zustände in Vergangenheit und Zukunft werden beschrieben durch $(x_\mp,\, v_\mp)$ mit $\|x(t) - x_\mp + v_\mp t\| \longrightarrow 0$ für $t \longrightarrow \mp\infty$. Mit $W_\mp$ bezeichnen wir die Abbildungen

$$W_\mp : (x_\mp, v_\mp) \longmapsto (x, v)\,,$$

wobei (x, v) der Zustand des Systems (mit Potential) ist, der asymptotisch für $t \longrightarrow \mp\infty$ dem freien Zustand $(x_\mp, v_\mp)$ entspricht. Die entsprechenden Abbildungen in der quantenmechanischen Streutheorie heißen „Wellenoperatoren“. Die Abbildung

$$S \;=\; W_+^{-1} W_-$$

ist dann der „Streuoperator“. Er beschreibt den Streuvorgang ohne auf die Details des zeitlichen Ablaufs einzugehen. Eines der wichtigsten und gleichzeitig schwierigsten Probleme der Streutheorie ist das sogenannte ***inverse Problem***, von S auf das System zurückzuschließen, hier also auf das Potential V (oder, beim reflektierenden Körper, auf dessen Gestalt).

Ein weiterer wichtiger Begriff, der hier schon kurz andiskutiert werden soll, ist der des „Streuquerschnitts“. Wir denken uns einen unendlich ausgebreiteten homogenen Teilchenstrom der Dichte 1 mit einheitlichem Impuls $k = |k|\omega$. Der Anteil, der pro Raumwinkeleinheit (Fläche 1 auf der Einheitssphäre) in Richtung ω' gestreut wird, heißt der ***differentielle Streuquerschnitt*** $\sigma(|k|, \omega', \omega)$ zur Einfallsrichtung ω und zur Ausfallsrichtung ω'. Das Integral bezüglich ω' über die Einheitssphäre ist der ***totale*** Streuquerschnitt $\sigma_{\text{tot}}(|k|, \omega)$ zur Einfallsrichtung ω. Ist das Streupotential sphärisch symmetrisch, so hängt $\sigma(|k|, \omega', \omega)$ offensichtlich nur vom Winkel zwischen ω' und ω ab, $\sigma_{\text{tot}}(|k|, \omega)$ ist von ω unabhängig.

Die physikalische Bedeutung des totalen Streuquerschnitts ist: Es werden gerade so viele Teilchen aus ihrer ursprünglichen Richtung abgelenkt, wie beim ungestörten Teilchenstrom durch ein senkrecht zu ω stehendes Flächenstück der Größe $\sigma_{\text{tot}}(|k|, \omega)$ strömen. $\sigma_{\text{tot}}(|k|, \omega)$ ist also ein gewisses Maß für den „effektiven Querschnitt“ des Streuers bei Einfallsrichtung ω.

Bei klassischer Streuung an einem Hindernis ist der totale Streuquerschnitt zur Einfallsrichtung ω gerade der maximale Querschnitt des Hindernisses orthogonal zu ω. Bei klassischer Streuung an einem Potential ist der totale Streuquerschnitt nur dann endlich, wenn das Potential kompakten Träger hat. Für die quantenmechanische Streuung hingegen zeigt sich, daß der totale Streuquerschnitt endlich ist, wenn das Potential schnell genug fällt.

1.2 Ein elementar lösbares Streuproblem

Wir betrachten in diesem Abschnitt ein Paar von Evolutionsgleichungen („***frei***“ und „***gestört***“), das so einfach ist, daß der „Streuoperator“ explizit angegeben werden kann. Dabei sind die erforderlichen Überlegungen fast unabhängig vom zu Grunde liegenden Funktionenraum. Funktionalanalytische Überlegungen sind fast überflüssig. Später werden wir immer wieder versuchen, dieses Problem in den abstrakten Rahmen (im Hilbertraum) einzubetten.

„Freie“ Evolution:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = H_0\psi \quad \text{mit} \quad H_0 = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{auf} \quad \mathbb{R}\,.$$

Nach Wegkürzen der i-s erhält man die lineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,\,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,\,t)\,.$$

Sie hat offenbar die Lösung (die man natürlich auch mit der allgemeinen Theorie leicht erhält)

$$\psi(x,\,t) = \psi(x-t,\,0) = \psi_0(x-t) =: (U_{0,t}\psi_0)(x)\,,$$

wobei ψ_0 die Anfangsfunktion für $t=0$ ist.

Die Differentialgleichung hat natürlich nur Sinn, wenn ψ zumindest in gewissem Sinn differenzierbar ist. Der Lösungsoperator $U_{0,t}$ dagegen ist auf jedem vernünftigen Funktionenraum auf $\mathbb{R}$ wohldefiniert, z. B.

$$C^1,\ C_0^1,\ L_\infty,\ L_p \quad (\text{insbesondere} \quad L_2)\,.$$

Bezüglich jeder translationsinvarianten Norm sind die $U_{0,t}$ offensichtlich isometrisch. Außerdem sind sie surjektiv (und somit bijektiv), unitär im Fall L_2 : $U_{0,t}^* = U_{0,t}^{-1} = U_{0,-t}$.

„*Gestörte*" Evolution:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \qquad \text{mit} \qquad H = \frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + q(x)\,.$$

Explizit ausgeschrieben ist dies die lineare Differentialgleichung erster Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) + \frac{1}{i}q(x)\psi(x,t)\,.$$

Wie man leicht nachrechnet, hat diese die Lösung

$$\psi(x,t) = \exp\Big\{i\int\limits_x^{x-t} q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi_0(x-t) =: (U_t\psi_0)(x)$$

mit der Anfangsfunktion $\psi_0(x) = \psi(x,0)$.

Diese Lösung findet man (zunächst jedenfalls formal) wie folgt: Mit

$$W\varphi(x) \;=\; \exp\Big\{i\int\limits_0^x q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\varphi(x)$$

gilt offenbar

$$H = \exp\Big\{-i\int\limits_0^x q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}H_0\exp\Big\{i\int\limits_0^x q(s)\,\mathrm{d}s\Big\} = W^{-1}H_0W\,,$$

und somit

$$\begin{aligned}(U_t\psi_0)(x) &= \psi(x,t) \;=\; W^{-1}U_{0,t}W\psi_0(x)\\ &= \exp\Big\{-i\int_0^x q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\Big(U_{0,t}\exp\Big\{i\int_0^x q(s)\Big\}\psi_0\Big)(x)\,,\\ &= \exp\Big\{i\int_x^{x-t} q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi_0(x-t)\,.\end{aligned}$$

Tatsächlich gilt damit

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x-t) &= \Big(-iq(x-t)\psi_0(x-t)-\psi_0'(x-t)\Big)\exp\Big\{i\int_x^{x-t} q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\\ &= \frac{1}{i}\Big(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}+q(x)\Big)\psi(x,t) = \frac{1}{i}H\psi(x,t)\,,\end{aligned}$$

oder formal

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}U_t\psi_0 &= \frac{\partial}{\partial t}W^{-1}U_{0,t}W\psi_0 \;=\; W^{-1}\frac{\partial}{\partial t}U_{0,t}W\psi_0 = W^{-1}(-iH_0)U_{0,t}W\psi_0\\ &= -iW^{-1}H_0WW^{-1}U_{0,t}W\psi_0 = -iHW^{-1}U_{0,t}W\psi \;=\; -iHU_t\psi_0\,.\end{aligned}$$

Der „freie“ Zustand $\psi_\pm$ ist also genau dann für $t\longrightarrow\pm\infty$ asymptotisch gleich dem „gestörten“ Zustand ψ, d. h.

$$U_{0,t}\psi_\pm \sim U_t\psi \qquad \text{für}\quad t\longrightarrow\pm\infty\,,$$

wenn gilt

$$\begin{aligned}\psi_\pm(x-t) &\sim \exp\Big\{i\int_x^{x-t} q(s)\Big\}\psi(x-t) \qquad \text{für}\quad t\longrightarrow\pm\infty\,,\\ \psi_\pm(x) &\sim \exp\Big\{i\int_{x+t}^{x} q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi(x) \qquad \text{für}\quad t\longrightarrow\pm\infty\,,\\ \psi_\pm(x) &= \lim_{t\to\pm\infty}\exp\Big\{i\int_{x+t}^{x} q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi(x)\,.\end{aligned}$$

Diese Grenzwerte existieren genau dann, wenn q bei $+\infty$ bzw. $-\infty$ uneigentlich integrierbar ist. Dann gilt

$$\begin{aligned}\psi_+(x) &= \exp\Big\{i\int_\infty^x q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi(x) = \exp\Big\{-i\int_x^\infty q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi(x)\\ &= \exp\Big\{-i\int_x^\infty q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\exp\Big\{-i\int_{-\infty}^x q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi_-(x)\\ &= \exp\Big\{-i\int_{-\infty}^\infty q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi_-(x)\,.\end{aligned}$$

Wenn q über $(-\infty,\infty)$ uneigentlich integrierbar ist, existiert also der ***Streuoperator*** S und ist gegeben durch

$$S\psi_- := \exp\Big\{-i\int_{-\infty}^{\infty} q(s)\,\mathrm{d}s\Big\}\psi_- \,;$$

er ist einfach Multiplikation mit einer komplexen Zahl vom Betrag 1. Auf den „meisten" Funktionenräumen über $\mathbb{R}$ ist dieses S offensichtlich bijektiv und isometrisch (in $L_2(\mathbb{R})$ sogar unitär).

Die Abbildungen

$$\begin{aligned} W_+ : \psi_+ \mapsto \psi, \qquad W_+\psi_+(x) &= \exp\left\{+i\int_x^{\infty} q(s)\,\mathrm{d}s\right\}\psi_+(x)\,, \\ W_- : \psi_- \mapsto \psi, \qquad W_-\psi_-(x) &= \exp\left\{-i\int_{-\infty}^{x} q(s)\,\mathrm{d}s\right\}\psi_-(x) \end{aligned}$$

heißen (jedenfalls im quantenmechanischen Analogon, vgl. 1) ***Wellenoperatoren***, und es gilt offenbar

$$S = W_+^{-1}W_- \,.$$

2 Charakterisierung der spektralen Teilräume

Wir zeigen zunächst: Ist T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralschar $E(\cdot)$ in einem Hilbertraum H, so kann der Raum H dargestellt werden als orthogonale Summe

$$H = H_p \oplus H_{sc} \oplus H_{ac} \qquad (H_c := H_{sc} \oplus H_{ac} = H_p^{\perp}),$$

die aus den Elementen $x \in H$ bestehen, für die die Maße $\varrho_x(\cdot) = \|E(\cdot)x\|^2$ gewisse Eigenschaften relativ zum Lebesgue–Maß besitzen (vgl. Abschnitt 2.1); die Teilräume H_p, H_{sc} und H_c reduzieren den Operator T. Es wird sich zeigen, daß für Schrödingeroperatoren die Elemente dieser Teilräume auch durch dynamische Eigenschaften charakterisiert werden können (vgl. Abschnitt 2.2).

2.1 Abstrakte Definition der spektralen Teilräume

Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralschar E im Hilbertraum H. Der bezüglich T ***(spektral) unstetige Teilraum*** $H_p = H_p(T)$ (englisch: ***pure point subspace*** $H_{pp}(T)$) ist die abgeschlossene Hülle der Eigenelemente von T. Für einen Operator mit reinem Punktspektrum ist dies der ganze Hilbertraum. Das orthogonale Komplement von $H_p(T)$ wird als der bezüglich T ***(spektral) stetige Teilraum*** bezeichnet, $H_c = H_c(T) := H_p(T)^{\perp}$; H_c ist also wieder ein abgeschlossener Teilraum von H. Die Bezeichnung dieser Teilräume bezieht sich auf Eigenschaften der durch ihre Elemente x erzeugten (Spektral–)Maße $\varrho_x(\cdot) = \|E(\cdot)x\|^2$; dies ergibt sich aus folgendem Satz.

Satz 2.1 *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralschar E im Hilbertraum H. Für jedes Element $x \in H$ sei das Maß ϱ_x auf $\mathbb{R}$ erklärt durch $\varrho_x(\cdot) := \|E(\cdot)x\|^2$.*

a) *Es gilt $x \in H_p(T)$ genau dann, wenn das Maß ϱ_x auf abzählbar viele Punkte konzentriert ist, d. h., wenn es eine abzählbare Menge $A \subset \mathbb{R}$ gibt mit $\varrho_x(A) = \varrho_x(\mathbb{R}) = \|x\|^2$ bzw. $\varrho_x(\mathbb{R}\backslash A) = 0$.*

b) *Es gilt $x \in H_c(T)$ genau dann, wenn jeder Punkt von $\mathbb{R}$, und damit jede abzählbare Teilmenge von $\mathbb{R}$, eine ϱ_x–Nullmenge ist.*

Beweis. a) Ist $x \in H_p$, so gibt es eine Folge (λ_n) von paarweise verschiedenen Eigenwerten von T und eine Folge von zugehörigen, paarweise orthogonalen Eigenelementen (v_n) mit $x = \sum_n v_n$, $\|x\|^2 = \sum_n \|v_n\|^2$. Für die abzählbare Menge $A := \{\lambda_n\}$ gilt dann

$$\varrho_x(A) = \sum_n \varrho_x(\{\lambda_n\}) = \sum_n \|E(\{\lambda_n\})x\|^2 = \sum_n \|v_n\|^2 = \|x\|^2 = \varrho_x(\mathbb{R}).$$

Sei nun $A = \{s_n\}$ eine abzählbare Menge mit $\varrho_x(A) = \|x\|^2$. Aus

$$\Big\| \sum_n E(\{s_n\})x \Big\|^2 = \sum_n \|E(\{s_n\})x\|^2 = \sum_n \varrho_x(\{s_n\}) = \varrho_x(A) = \|x\|^2$$

folgt dann

$$\Big\| x - \sum_n E(\{s_n\})x \Big\|^2 = \|x\|^2 - \Big\| \sum_n E(\{s_n\})x \Big\|^2 = 0\,,$$

und somit $x = \sum\limits_n E(\{s_n\})x$. Wegen $E(\{s_n\})x \in N(T - s_n) \subset H_p$ ist damit $x \in H_p$.

b) Sei $x \in H_c = H_p^\perp$. Für jedes $s \in \mathbb{R}$ ist $E(\{s\})x \in H_p = H_c^\perp$, also

$$\varrho_x(\{s\}) = \|E(\{s\})x\|^2 = \langle x, E(\{s\})x\rangle = 0 \quad \text{für alle} \quad s \in \mathbb{R}\,.$$

Da das Maß ϱ_x σ–additiv ist, folgt $\varrho_x(A) = 0$ für jede abzählbare Teilmenge von $\mathbb{R}$.

Sei nun $\varrho_x(\{s\}) = 0$ für jedes $s \in \mathbb{R}$. Es ist zu zeigen, daß x zu jedem Eigenelement von T orthogonal ist. Ist v Eigenelement von T zum Eigenwert λ (o. E. $\|v\| = 1$), so gilt für die orthogonale Projektion P_v auf $L\{v\}$ offenbar $P_v \le E(\{\lambda\})$, also

$$|\langle v, x\rangle|^2 = \|P_v x\|^2 \le \|E(\{\lambda\})x\|^2 = \varrho_x(\{\lambda\}) = 0\,. \qquad \square$$

Der stetige Teilraum H_c wird nun noch weiter zerlegt. Zunächst definieren wir den bezüglich T ***(spektral) singulär stetigen Teilraum*** H_{sc} durch

$$\begin{aligned} H_{sc} = H_{sc}(T) &:= \Big\{x \in H_c(T) :\ \exists \text{ Lebesgue–Nullmenge } N \text{ mit } E(N)x = x\Big\} \\ &= \Big\{x \in H_c(T) :\ \exists \text{ Lebesgue–Nullmenge } N \text{ mit } \varrho_x(N) = \|x\|^2\Big\}. \end{aligned}$$

Sind ϱ und μ Maße auf einer Menge X, so heißt ϱ ***singulär*** bezüglich μ, wenn eine μ–Nullmenge N existiert mit $\varrho(N) = \varrho(X)$ bzw. $\varrho(X \backslash N) = 0$. Wir können also $H_{sc}(T)$ auch beschreiben durch

$$H_{sc}(T) = \{x \in H_c(T) :\ \varrho_x \ \text{ ist singulär bezüglich des Lebesgue–Maßes}\}\,.$$

Satz 2.2 *Sei T ein selbstadjungierter Operator im Hilbertraum H. Dann ist $H_{sc}(T)$ ein abgeschlossener Teilraum von H.*

Beweis. Es ist leicht zu sehen, daß H_{sc} ein Teilraum ist (Beweis!). Sei (x_n) eine Folge aus H_{sc} mit $x_n \longrightarrow x$, N_n seien Lebesgue–Nullmengen mit $E(N_n)x_n = x_n$. Aus $x_n \in H_{sc} \subset H_c$ und der Abgeschlossenheit von H_c folgt zunächst $x \in H_c$. Sei $N := \cup_n N_n$. Dann ist N wieder eine Lebesgue–Nullmenge, und es gilt

$$E(N)x = \lim_{n\to\infty} E(N)x_n = \lim_{n\to\infty} x_n = x,$$

d. h. $x \in H_{sc}$. □

Der bezüglich T ***(spektral) absolut stetige Teilraum*** H_{ac} ist definiert durch

$$H_{ac} = H_{ac}(T) := H_c \ominus H_{sc} = H_{sc}^{\perp} \cap H_c\,.$$

Als orthogonales Komplement von H_{sc} bezüglich des Hilbertraumes H_c ist also H_{ac} abgeschlossen. Schließlich definiert man den bezüglich T ***(spektral) singulären Teilraum*** H_s durch

$$H_s = H_s(T) := H_p(T) \oplus H_{sc}(T)\,.$$

Satz 2.3 *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralschar E im Hilbertraum H. Dann gilt:*

a)
$$\begin{aligned} H_s(T) &= \{x \in H \,:\, \exists \text{ Lebesgue–Nullmenge } N \text{ mit } \varrho_x(N) = \|x\|^2\} \\ &= \{x \in H \,:\, \varrho_x \text{ ist singulär bezüglich des Lebesgue–Maßes}\}\,. \end{aligned}$$

b)
$$\begin{aligned} H_{ac}(T) &= \{x \in H \,:\, \varrho_x(N) = 0 \text{ für jede Lebesgue–Nullmenge } N\} \\ &= \{x \in H \,:\, \varrho_x \text{ ist absolut stetig bezüglich des Lebesgue–Maßes}\}\,. \end{aligned}$$

Beweis. a) Ist $x \in H_s = H_p \oplus H_{sc}$, so gilt $x = x_p + x_{sc}$ mit $x_p \in H_p$, $x_{sc} \in H_{sc}$ und es gibt

eine abzählbare Menge $A \subset \mathbb{R}$ mit $E(A)x_p = x_p$,

eine Lebesgue–Nullmenge $N \subset \mathbb{R}$ mit $E(N)x_{sc} = x_{sc}$,

und somit $E(A \cup N)x = x$. Da $A \cup N$ eine Lebesgue–Nullmenge ist, ist also ϱ_x singulär bezüglich des Lebesgue–Maßes.

Sei $x \in H$ und ϱ_x singulär bezüglich des Lebesgue–Maßes, d. h. es gibt eine Lebesgue–Nullmenge N mit $E(N)x = x$. Da $\varrho_x(\mathbb{R}) < \infty$ ist, gibt es eine höchstens abzählbare Teilmenge $A \subset \mathbb{R}$ mit

$\|E(\{s\})x\|^2 = \varrho_x(\{s\}) > 0$ für $x \in A$ und $\|E(\{s\})x\|^2 = \varrho_x(\{s\}) = 0$ für alle $s \in \mathbb{R}\backslash A$; es gilt also

$$x_p := E(A)x \in H_p .$$

Es bleibt zu zeigen, daß $x_{sc} := x - x_p \in H_{sc}$, denn dann folgt $x = x_p + x_{sc} \in H_p + H_{sc} = H_s$. Ist v ein Eigenelement zu einem Eigenwert λ von T, so gilt

$$\langle x_{sc}, v\rangle = \langle x - x_p, v\rangle = \langle x - E(A)x, E(\{\lambda\})v\rangle = \langle E(\{\lambda\} \cap (\mathbb{R}\backslash A))x, v\rangle = 0 ,$$

denn entweder ist $\lambda \in A$ und somit $\{\lambda\} \cap (\mathbb{R}\backslash A) = \emptyset$, oder es gilt $\lambda \in \mathbb{R}\backslash A$ und somit $E(\{\lambda\} \cap (\mathbb{R}\backslash A))x = E(\{\lambda\})x = 0$ nach Konstruktion von A. Also ist in jedem Fall

$$x_{sc} := x - x_p \in H_p^\perp = H_c .$$

Wegen

$$E(N)x_{sc} = E(N)\,(x - E(A)x) = (I - E(A))E(N)x = (I - E(A))x = x_{sc}$$

ist somit $x_{sc} \in H_c \cap H_s = H_{sc}$.

b) Es gilt $H_{ac} = H_c \ominus H_{sc} = H \ominus (H_p \oplus H_{sc}) = H \ominus H_s = H_s^\perp$. Ist $x \in H_{ac} = H_s^\perp$, so gilt für jede Lebesgue–Nullmenge N

$$\varrho_x(N) = \|E(N)x\|^2 = \langle x, E(N)x\rangle = 0 ,$$

da $E(N)x \in H_s$ ist; d. h. ϱ_x ist absolut stetig bezüglich des Lebesgue–Maßes.

Sei nun ϱ_x absolut stetig bezüglich des Lebesgue–Maßes. Für jedes $y \in H_s$ gibt es eine Lebesgue–Nullmenge N mit $y = E(N)y$ und somit ist, wegen $\varrho_x(N) = 0$,

$$|\langle x, y\rangle| \;=\; |\langle x, E(N)y\rangle| \;=\; |\langle E(N)x, y\rangle| \le \varrho_x(N)^{1/2}\|y\| \;=\; 0 ,$$

d. h. es gilt $x \in H_s^\perp$. □

Für die folgenden Überlegungen benötigen wir eine weitere Begriffsbildung: Sei A ein Operator im Hilbertraum H, M ein abgeschlossener Teilraum von H, P_M die orthogonale Projektion auf M. Man sagt, M ***reduziert*** A, wenn gilt: für jedes $x \in D(A)$ ist

$$P_M x \in D(A) \quad (\text{also auch} \quad P_{M^\perp} x \in D(A)), \quad \text{und}$$
$$AP_M x = P_M Ax\,, \;\; AP_{M^\perp} x = P_{M^\perp} Ax .$$

Für beschränktes A ist dies die Vertauschbarkeit von A und P_M, $AP_M = P_M A$.

Satz 2.4 *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralschar E im Hilbertraum H, M ein abgeschlossener Teilraum von H, P_M die orthogonale Projektion auf M. M reduziert T genau dann, wenn P_M mit der Spektralschar E vertauschbar ist (d. h. wenn $E(t)P_M = P_M E(t)$ für jedes $t \in \mathbb{R}$ gilt). Die Einschränkungen von T auf M bzw. $M^\perp$ mit den Definitionsbereichen $D(T) \cap M$ bzw. $D(T) \cap M^\perp$ sind selbstadjungierte Operatoren in M bzw. $M^\perp$.*

Beweis. Wird T von M reduziert, so gilt dies offenbar auch für die Resolvente von T, d. h. die Resolvente ist mit P_M vertauschbar. Mit der Stone'schen Formel für die Spektralschar folgt die Vertauschbarkeit der Spektralschar mit P_M.

Ist die Spektralschar mit P_M vertauschbar, so sind offenbar die Einschränkungen E_M und $E_{M^\perp}$ von E auf M bzw. $M^\perp$ Spektralscharen in M bzw. $M^\perp$. Für die zugehörigen selbstadjungierten Operatoren T_M und $T_{M^\perp}$ gilt $T = T_M \oplus T_{M^\perp}$, und T wird offensichtlich von M reduziert. □

Im folgenden seien P_p, P_c, P_{sc}, P_s und P_{ac} die orthogonalen Projektionen auf H_p, H_c, H_{sc}, H_s und H_{ac} (nur wenn Verwechslungen möglich sind, schreiben wir $P_p(T), \ldots,$ bzw. $H_p(T), \ldots)$.

Satz 2.5 *Sei T ein selbstadjungierter Operator mit Spektralschar E im Hilbertraum H. Dann ist die Spektralschar E mit den Projektionen P_p, P_c, P_{sc}, P_s und P_{ac} vertauschbar, d. h. die Teilräume H_p, H_c, H_{sc}, H_s und H_{ac} reduzieren T.*

Wir bezeichnen im folgenden als den ***spektral***

– ***unstetigen Teil*** von T die Einschränkung T_p von T auf H_p,

– ***stetigen Teil*** von T die Einschränkung T_c von T auf H_c,

– ***singulär stetigen Teil*** von T die Einschränkung T_{sc} von T auf H_{sc},

– ***singulären Teil*** von T die Einschränkung T_s von T auf H_s,

– ***absolut stetigen Teil*** von T die Einschränkung T_{ac} von T auf H_{ac}.

Das Spektrum von T_c, T_{sc}, T_s bzw. T_{ac} wird als das ***stetige Spektrum*** $\sigma_c(T)$, ***singulär stetige Spektrum*** $\sigma_{sc}(T)$, ***singuläre Spektrum*** $\sigma_s(T)$ bzw. ***absolut stetige Spektrum*** $\sigma_{ac}(T)$ bezeichnet. Man beachte, daß das ***Punktspektrum*** $\sigma_p(T)$ anders definiert ist (es ist gleich der Menge der Eigenwerte); insbesondere ist es i. allg. nicht abgeschlossen. Das Spektrum von T_p wird gelegentlich mit $\sigma_{pp}(T)$ bezeichnet („pure point").

Beweis von Satz 2.5. Nur die erste Aussage ist zu beweisen. Dabei genügt es, P_p und P_s zu betrachten; der Rest folgt aus $P_c = I - P_p$, $P_{ac} = I - P_s$, $P_{sc} = P_c - P_{ac}$.

$\mathbf{P_p}$: Für jedes $x \in H_p$ gibt es eine abzählbare Teilmenge $A \subset \mathbb{R}$ mit $E(A)x = x$. Also gilt für jedes $t \in \mathbb{R}$

$$E(t)x = E(t)E(A)x = E(A)E(t)x \in H_p\,.$$

Daraus folgt $E(t)P_p = P_pE(t)P_p$ für jedes $t \in \mathbb{R}$. Übergang zur Adjungierten liefert

$$P_pE(t) = (E(t)P_p)^* = (P_pE(t)P_p)^* = P_pE(t)P_p = E(t)P_p\,.$$

$\mathbf{P_s}$: Die Aussage für P_s wird völlig entsprechend bewiesen, wobei eine Nullmenge N an die Stelle der abzählbaren Menge A tritt. □

Beispiel 2.6 Seien ϱ_p, ϱ_{sc}, ϱ_{ac} Borel–Maße auf $\mathbb{R}$, ϱ_p auf abzählbar viele Punkte konzentriert, ϱ_{sc} singulär stetig, ϱ_{ac} absolut stetig bezüglich des Lebesgue–Maßes, $\varrho = \varrho_p + \varrho_{sc} + \varrho_{ac}$, T der Operator der Multiplikation mit id in

$$L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho) = L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_p) \oplus L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_{sc}) \oplus L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_{ac})\,.$$

Dann gilt (Beweis!)

$$H_p(T) = L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_p), \quad H_{sc}(T) = L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_{sc}), \quad H_{ac}(T) = L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_{ac})$$

und T_p, T_{sc} bzw. T_{ac} sind die Operatoren der Multiplikation mit id in $L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_p)$, $L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_{sc})$ bzw. $L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_{ac})$. #

2.2 Dynamische (geometrische) Charakterisierung der spektralen Teilräume von Schrödingeroperatoren in $L_2(\mathbb{R}^m)$

Wir beginnen mit einem Begriff, der auch im abstrakten Hilbertraum sinnvoll ist, während die weiter unten eingeführten Begriffe nur in $L_2(\mathbb{R}^m)$ sinnvoll sind.

Sei T ein selbstadjungierter Operator im Hilbertraum H. Ein Element $x \in H$ heißt ***stationär*** (oder ein ***stationärer Zustand***) bezüglich T, wenn für jeden selbstadjungierten Operator $B \in B(H)$ der Erwartungswert

$$B_x(t) := \langle e^{-itT}x,\, Be^{-itT}x\rangle$$

konstant ist. Ist T ein Schrödingeroperator, so bedeutet dies, daß die Erwartungswerte ***aller Meßgrößen*** zeitlich konstant sind; dies rechtfertigt die Bezeichnung „stationär“.

Satz 2.7 *Sei T ein selbstadjungierter Operator im Hilbertraum H, $x \in H\backslash\{0\}$. x ist genau dann stationär bezüglich T, wenn x Eigenelement von T ist.*

Beweis. $\Longleftarrow$: Ist $Tx = \lambda x$, so gilt $e^{-itT}x = e^{-it\lambda}x$, und somit

$$B_x(t) = \langle e^{-itT}x,\, Be^{-itT}x\rangle = \langle e^{-it\lambda}x, Be^{-it\lambda}x\rangle = \langle x,\, Bx\rangle \quad \text{für alle} \quad t \in \mathbb{R},$$

d. h. $B_x(t)$ ist konstant.

$\Longrightarrow$: Diese besonders einfache Form des Beweises verdanke ich Herrn Dirk Buschmann. Sei x stationär bezüglich T, o. E. $\|x\| = 1$, B die orthogonale Projektion auf $L\{x\}^\perp$. Nach Voraussetzung gilt dann für alle $t \in \mathbb{R}$

$$0 \;=\; \langle x, Bx\rangle \;=\; B_x(0) \;=\; B_x(t) \;=\; \langle e^{-itT}x,\, Be^{-itT}x\rangle \;=\; \|Be^{-itT}x\|^2,$$

d. h. es gilt $e^{-itT}x \in L\{x\}$ für alle $t \in \mathbb{R}$. Es gibt also eine stetige Funktion $a : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ mit $e^{-itT}x = a(t)x$, also $|a(t)| = 1$ für alle $t \in \mathbb{R}$. Wegen

$$a(t+t')x = e^{-i(t+t')T}x = e^{-itT}e^{-it'T}x = e^{-itT}a(t')x = a(t)a(t')x$$

gilt auch

$$a(t+t') = a(t)a(t') \qquad \text{für alle} \quad t, t' \in \mathbb{R},$$

und somit

$$a(t) = e^{-it\lambda} \qquad \text{für alle} \quad t \in \mathbb{R}, \quad \text{mit einem} \quad \lambda \in \mathbb{R}.$$

Folglich existiert der Grenzwert

$$\lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(e^{-itT} - I)x \;=\; \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(e^{-it\lambda} - 1)x \;=\; -i\lambda x\,.$$

Somit ist $x \in D(T)$, und es gilt $Tx = \lambda x$, d. h. x ist ein Eigenelement von T zum Eigenwert λ.

Interessant ist auch eine zweite Variante des Beweises dieser Richtung: Wählt man für B die orthogonale Projektion auf $L\{x\}$ (statt der auf $L\{x\}^\perp$), d. h. $By = \langle x, y\rangle x$, so ist (mit $\varrho_x(\cdot) = \|E(\cdot)x\|^2$)

$$1 \;=\; \langle e^{-itT}x, Be^{-itT}x\rangle \;=\; \left|\int e^{-it\lambda}\,\mathrm{d}\varrho_x(\lambda)\right|^2$$

für alle $t \in \mathbb{R}$. Daraus läßt sich folgern, daß das Maß $\varrho_x(\cdot)$ in einem $\lambda \in \mathbb{R}$ konzentriert ist, d. h. x ist Eigenelement zu diesem Eigenwert λ. □

$H_p = H_p(T)$ ist die abgeschlossene lineare Hülle der bezüglich T stationären Zustände. Nach obigem Satz sind also die Elemente von H_p (bei mehr als einem Eigenwert) i. allg. keine stationären Zustände mehr.

Wir kommen nun zur ***dynamischen*** (oder auch ***geometrischen***) ***Charakterisierung*** der Zustände in $L_2(\mathbb{R}^m)$ (dabei kann im folgenden meistens $\mathbb{R}^m$ durch eine offene Teilmenge von $\mathbb{R}^m$ ersetzt werden). Sei T ein selbstadjungierter Operator in $L_2(\mathbb{R}^m)$. Ein $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$ heißt ein ***gebundener Zustand*** bezüglich T, wenn zu jedem $\varepsilon > 0$ eine kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ existiert mit

$$\left\| \chi_{\mathbb{R}^m \setminus K} e^{-itT} f \right\| \leq \varepsilon \qquad \text{für alle} \quad t \in \mathbb{R}.$$

Im Sinne der statistischen Interpretation der Quantenmechanik bedeutet dies, daß das Teilchen die kompakte Teilmenge K für alle Zeiten nur mit geringer Wahrscheinlichkeit verläßt.

Ein $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$ heißt ein ***Streuzustand*** bezüglich T, wenn für jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ gilt

$$\left\| \chi_K e^{-itT} f \right\| \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty .$$

In der statistischen Interpretation bedeutet das: Das Teilchen verläßt jedes Kompaktum mit Wahrscheinlichkeit 1.

Es erweist sich weiter unten als nützlich, den Begriff des Streuzustandes zu verallgemeinern. Ein $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$ heißt ein ***Streuzustand im zeitlichen Mittel***, wenn für jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ gilt

$$\frac{1}{A} \int_{-A}^{A} \left\| \chi_K e^{-itT} f \right\|^2 \mathrm{d}t \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad A \longrightarrow \infty .$$

Ein Teilchen, das sich in einem solchen Zustand befindet, hält sich also „den größten Teil der Zeit“ in großer Entfernung vom Ursprung auf.

Mit $\mathcal{H}_b = \mathcal{H}_b(T)$, $\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_s(T)$ bzw. $\tilde{\mathcal{H}}_s = \tilde{\mathcal{H}}_s(T)$ bezeichnen wir die Menge der gebundenen Zustände, der Streuzustände bzw. der Streuzustände im zeitlichen Mittel.

Satz 2.8 *Sei* T *ein selbstadjungierter Operator in* $L_2(\mathbb{R}^m)$.

a) *Es gilt* $\mathcal{H}_s \subset \tilde{\mathcal{H}}_s$ *und* $\tilde{\mathcal{H}}_s \perp \mathcal{H}_b$ *(und somit* $\mathcal{H}_s \perp \mathcal{H}_b$*).*

b) $\mathcal{H}_b$, $\mathcal{H}_s$ *und* $\tilde{\mathcal{H}}_s$ *sind abgeschlossene Teilräume von* $L_2(\mathbb{R}^m)$.

Beweis. a) $\mathcal{H}_s \subset \tilde{\mathcal{H}}_s$ ist offensichtlich. Sei $g \in \mathcal{H}_b$, $f \in \tilde{\mathcal{H}}_s$. Zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es eine kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ mit

$$\left\|\chi_{\mathbb{R}^m \setminus K} e^{-itT} g\right\| \leq \varepsilon \qquad \text{für alle} \quad t \in \mathbb{R} .$$

Andererseits gilt

$$\frac{1}{A} \int\limits_{-A}^{A} \left\|\chi_K e^{-itT} f\right\|^2 \mathrm{d}t \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad A \longrightarrow \infty ;$$

es gibt also eine Folge (t_n) mit $t_n \longrightarrow \infty$ und $\left\|\chi_K e^{-it_nT} f\right\| \longrightarrow 0$ für $n \longrightarrow \infty$, also

$$\left\|\chi_K e^{-it_nT} f\right\| < \varepsilon \qquad \text{für hinreichend große} \quad n .$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} |\langle f, g\rangle| &= |\langle e^{-it_nT} f, e^{-it_nT} g\rangle| \\ &\leq \left|\langle \chi_K e^{-it_nT} f, \chi_K e^{-it_nT} g\rangle\right| + \left|\langle \chi_{\mathbb{R}^m \setminus K} e^{-it_nT} f, \chi_{\mathbb{R}^m \setminus K} e^{-it_nT} g\rangle\right| \\ &\leq \varepsilon\|g\| + \|f\|\varepsilon = \varepsilon(\|f\| + \|g\|) \qquad \text{für hinreichend große} \quad n . \end{aligned}$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig war, folgt $\langle f, g\rangle = 0$.

b) Es ist offensichtlich (Beweis!), daß $\mathcal{H}_b, \mathcal{H}_s$, und $\tilde{\mathcal{H}}_s$ Teilräume von $L_2(\mathbb{R}^m)$ sind. Somit bleibt die Abgeschlossenheit zu beweisen.

$\boldsymbol{\mathcal{H}_\mathbf{b}}$: Sei (f_n) aus $\mathcal{H}_b$, $f_n \longrightarrow f$ und $\varepsilon > 0$. Dann gibt es ein $N \in \mathbb{N}$ mit $\|f - f_N\| \leq \varepsilon/2$ und eine kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ mit

$$\left\|\chi_{\mathbb{R}^m \setminus K} e^{-itT} f_N\right\| \leq \frac{\varepsilon}{2} \qquad \text{für alle} \quad t \in \mathbb{R} ,$$

also

$$\begin{aligned}\left\|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}e^{-itT}f\right\| &\le \left\|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}e^{-itT}(f-f_N)\right\| + \left\|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}e^{-itT}f_N\right\| \\ &\le \frac{\varepsilon}{2}+\frac{\varepsilon}{2}=\varepsilon \qquad \text{für alle} \quad t\in\mathbb{R}\,.\end{aligned}$$

Da dies für alle $\varepsilon > 0$ gilt, ist $f \in \mathcal{H}_b$.

$\tilde{\mathbf{H}}_{\mathbf{s}}$: Sei (f_n) aus $\tilde{\mathcal{H}}_s$, $f_n \longrightarrow f$, K eine kompakte Teilmenge von $\mathbb{R}^m$ und $\varepsilon > 0$. Dann gibt es ein $N \in \mathbb{N}$ mit $\|f - f_N\|^2 \le \varepsilon/8$, und es gilt

$$\frac{1}{A}\int_{-A}^{A}\left\|\chi_K e^{-itT}f_N\right\|^2 \mathrm{d}t \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad A\longrightarrow\infty\,,$$

also

$$\begin{aligned}\frac{1}{A}\int_{-A}^{A}\left\|\chi_K e^{-itT}f\right\|^2 \mathrm{d}t &\le \frac{1}{A}\int_{-A}^{A}\left\{\left\|\chi_K e^{-itT}(f-f_N)\right\| + \left\|\chi_K e^{-itT}f_N\right\|\right\}^2 \mathrm{d}t \\ &\le \frac{2}{A}\int_{-A}^{A}\left\{\left\|\chi_K e^{-itT}(f-f_N)\right\|^2 + \left\|\chi_K e^{-itT}f_N\right\|^2\right\} \mathrm{d}t \\ &\le \frac{\varepsilon}{2}+\frac{\varepsilon}{2}=\varepsilon \qquad \text{für hinreichend große} \quad A\,.\end{aligned}$$

$\mathbf{H}_{\mathbf{s}}$: Dies wird analog zu $\tilde{\mathcal{H}}_s$ bewiesen, wobei die Integralmittel entfallen. □

Satz 2.9 *Sei T ein selbstadjungierter Operator in $L_2(\mathbb{R}^m)$. Dann gilt $H_p(T) \subset \mathcal{H}_b(T)$, d. h. jedes $f \in H_p(T)$ ist ein gebundener Zustand bezüglich T.*

Beweis. Da $\mathcal{H}_b(T)$ ein abgeschlossener Teilraum ist, genügt es zu zeigen, daß jedes Eigenelement ein gebundener Zustand ist. Sei f Eigenelement zum Eigenwert λ.

Sei $\varepsilon > 0$. Wählen wir die kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ so groß, daß

$$\|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}f\| \le \varepsilon$$

gilt, so folgt für alle $t \in \mathbb{R}$

$$\|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}e^{-itT}f\| = \|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}e^{-it\lambda}f\| = \|\chi_{\mathbb{R}^m\setminus K}f\| \le \varepsilon\,.$$ □

Die Umkehrung von Satz 2.9 kann ohne eine zusätzliche Voraussetzung (vgl. Satz 2.10) nicht gelten: Ist z. B. T ein Multiplikationsoperator in $L_2(\mathbb{R}^m)$, so ist $\mathcal{H}_b = L_2(\mathbb{R}^m)$, aber i. allg. natürlich nicht $H_p = L_2(\mathbb{R}^m)$.

Für die weiteren Überlegungen spielt die Bedingung „$\chi_K E(J)$ ist kompakt für jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ und jedes beschränkte Intervall $J \subset \mathbb{R}$" eine wesentliche Rolle, wobei E die Spektralschar von T ist; gelegentlich sagt man dazu auch „χ_K ist T–lokal kompakt". Wir werden im folgenden Abschnitt sehen, daß diese Bedingung für Schrödingeroperatoren fast immer erfüllt ist. Diese Feststellung ist eine wichtige Grundlage der Streutheorie.

Es sei daran erinnert, daß ein Operator ***kompakt*** genannt wird, wenn er jede beschränkte Menge in eine relativ kompakte Menge abbildet und daß dies im Hilbertraum dazu äquivalent ist, daß B jede schwache Nullfolge auf eine Norm–Nullfolge abbildet.

Satz 2.10 *Sei T ein selbstadjungierter Operator in $L_2(\mathbb{R}^m)$ mit Spektralschar E. Für jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ und jedes beschränkte Intervall J sei $\chi_K E(J)$ kompakt. Dann gilt:*

a) $H_{ac}(T) \subset \mathcal{H}_s(T)$.

b) $H_c(T) = \tilde{\mathcal{H}}_s$ *und* $H_p(T) = \mathcal{H}_b(T)$.

(Teil b) ist bekannt als ***RAGE–Theorem****, benannt nach den Autoren D. Ruelle, W. Amrein, V. Georgescu und V. Enss, die zu seiner heutigen Formulierung beigetragen haben.)*

Beweis. a) Wir zeigen etwas allgemeiner: Ist T selbstadjungiert in einem beliebigen Hilbertraum H, $B \in B(H)$ und $BE(J)$ kompakt für jedes beschränkte Intervall J, so gilt für jedes $f \in H_{ac}(T)$

$$Be^{-itT} f \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty .$$

Für jedes Element g aus H gilt

$$\langle g, e^{-itT} f\rangle = \int e^{-it\lambda} d_\lambda \langle g, E(\lambda) f\rangle .$$

Wegen $P_{ac} g, f \in H_{ac}$ ist $\langle g, E(\cdot)f\rangle = \langle g, E(\cdot)P_{ac} f\rangle = \langle P_{ac} g, E(\cdot)f\rangle$ absolut stetig (Polarisierungsidentität auf $\langle E(\cdot)P_{ac} g, E(\cdot)f\rangle$ angewandt), d. h. es gilt $\langle g, E(\lambda)f\rangle = \int_{(-\infty,\lambda]} h(s)\,\mathrm{d}s$ mit einem $h \in L_1(\mathbb{R})$. Nach dem Lemma von Riemann–Lebesgue gilt also

$$\langle g, e^{-itT} f\rangle = \int e^{-it\lambda} h(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty ,$$

und da g beliebig war,

$$e^{-itT} f \xrightarrow{w} 0 \qquad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty \,.$$

Mit der Kompaktheit von $BE(J)$ folgt

$$Be^{-itT} E(J) f = (BE(J)) e^{-itT} f \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty$$

für jedes beschränkte Intervall J, z. B. $J = (-n, n)$. Wegen $E((-n,n))f \longrightarrow f$ für $n \longrightarrow \infty$ ergibt sich hieraus die Behauptung, da der Raum der Elemente $f \in H$, für die $Be^{-itT} f \longrightarrow 0$ ($|t| \longrightarrow \infty$) gilt, offenbar abgeschlossen ist (vgl. Beweis der Abgeschlossenheit von $\mathcal{H}_s$; wesentlich ist dabei die Beschränktheit von B.

b) Es genügt $H_c \subset \tilde{\mathcal{H}}_s$ zu beweisen. Zusammen mit $\tilde{\mathcal{H}}_s \perp \mathcal{H}_b$ (Satz 2.8 a) und $H_p \subset \mathcal{H}_b$ (Satz 2.9) folgt dann die Behauptung, denn es gilt $H_c = H_p^{\perp} \supset \mathcal{H}_b^{\perp} \supset \tilde{\mathcal{H}}_s$, und somit Gleichheit in dieser Gleichungskette.

Zum Beweis von $\mathcal{H}_c \subset \tilde{\mathcal{H}}_s$ benötigen wir den folgenden □/2

Satz 2.11 (N. Wiener) *Sei* $F : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ *von beschränkter Variation,*

$$\varphi(t) \,:=\, \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int e^{-it\lambda} \, \mathrm{d}F(\lambda) \,.$$

Dann gilt

$$\lim_{A\to\infty} \frac{1}{A} \int_{-A}^{A} |\varphi(t)|^2 \, \mathrm{d}t = \frac{1}{\pi} \sum_{\lambda \in \mathbb{R}} \Big| F(\lambda+) - F(\lambda-) \Big|^2 \,.$$

(Dies bedeutet insbesondere, daß der Limes auf der linken Seite existiert. Da F *von beschränkter Variation ist, hat es höchstens abzählbar viele Sprungstellen; die Summe auf der rechten Seite enthält also nur abzählbar viele Terme.)* F *ist also genau dann stetig, wenn gilt*

$$\lim_{A\to\infty} \frac{1}{A} \int_{-A}^{A} |\varphi(t)|^2 \, \mathrm{d}t = 0 \,.$$

Beweis. Für jedes $A > 0$ gilt nach Definition von φ

$$\begin{aligned}\frac{1}{A}\int\limits_{-A}^{A}|\varphi(t)|^2\,\mathrm{d}t &= \frac{1}{2\pi A}\int\limits_{-A}^{A}\Big\{\int e^{-it\lambda}\,\mathrm{d}F(\lambda)\int e^{it\mu}\,\mathrm{d}\overline{F(\mu)}\Big\}\,\mathrm{d}t\\ &= \frac{1}{\pi}\int\int\frac{1}{2A}\int\limits_{-A}^{A}e^{it(\mu-\lambda)}\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}F(\lambda)\,\mathrm{d}\overline{F(\mu)}\,.\end{aligned}$$

Wegen

$$\frac{1}{2A}\int\limits_{-A}^{A}e^{it(\mu-\lambda)}\,\mathrm{d}t = \begin{cases}\dfrac{e^{iA(\mu-\lambda)}-e^{-iA(\mu-\lambda)}}{2iA(\mu-\lambda)} = \dfrac{\sin A(\mu-\lambda)}{A(\mu-\lambda)} & \text{für } \mu\neq\lambda\,,\\ 1 & \text{für } \mu=\lambda\,,\end{cases}$$

$$\Big|\frac{1}{2A}\int\limits_{-A}^{A}e^{it(\mu-\lambda)}\,\mathrm{d}t\Big| \leq 1 \qquad \text{für alle} \quad \lambda,\mu$$

folgt also mit dem Satz von Lebesgue für $A \longrightarrow \infty$

$$\begin{aligned}\frac{1}{A}\int\limits_{-A}^{A}|\varphi(t)|^2\,\mathrm{d}t &\longrightarrow \frac{1}{\pi}\int\int\chi_{\{(\lambda,\mu)\in\mathbb{R}^2:\,\lambda=\mu\}}(\lambda,\mu)\,\mathrm{d}F(\lambda)\,\mathrm{d}\overline{F(\mu)}\\ &= \frac{1}{\pi}\int(F(\mu+)-F(\mu-))\,\mathrm{d}\overline{F(\mu)}\\ &= \frac{1}{\pi}\sum_{\mu\in\mathbb{R}}|F(\mu+)-F(\mu-)|^2\,.\end{aligned}$$

□

Fortsetzung des Beweises von Satz 2.10 b. Sei zunächst $f \in R(E(J)P_c)$ für ein beschränktes Intervall J. Da $\chi_K E(J)$ kompakt ist, gibt es Orthonormalfolgen (e_j), (f_j) und eine Nullfolge λ_j mit (vgl. Mathematische Methoden der Quantenmechanik, Satz 4.16)

$$\chi_K E(J)f = \sum\lambda_j\langle f_j,f\rangle e_j\,,$$

also

$$\|\chi_K e^{-itT}f\|^2 = \|\chi_K E(J)e^{-itT}f\|^2 = \sum_j|\lambda_j|^2|\langle f_j,e^{-itT}f\rangle|^2\,.$$

Da

$$\lambda\mapsto\langle f_j,E(\lambda)f\rangle = \langle P_c f_j,E(\lambda)f\rangle$$

stetig und von beschränkter Variation ist (Polarisierungsidentität für $\langle E(\cdot)P_c f_j,\, E(\cdot)f\rangle$), gilt für jedes j nach Satz 2.11

$$\frac{1}{A}\int_{-A}^{A} |\langle f_j, e^{-itT}f\rangle|^2\,\mathrm{d}t = \frac{1}{A}\int_{-A}^{A}\Big|\int e^{-it\lambda}\,\mathrm{d}_\lambda\langle f_j, E(\lambda)f\rangle\Big|^2\,\mathrm{d}t \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |A|\longrightarrow\infty\,.$$

Sei nun $\varepsilon > 0$. Dann existiert ein j_0 mit $|\lambda_j|^2 \le \varepsilon$ für $j \ge j_0$ und somit

$$\sum_{j\ge j_0} |\lambda_j|^2 |\langle f_j, e^{-itT}f\rangle|^2 \;\le\; \varepsilon\|e^{-itT}f\|^2 = \varepsilon\|f\|^2\,,$$

also

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{A}\int_{-A}^{A} \|\chi_K e^{-itT}f\|^2\,\mathrm{d}t \\
&\quad = \underbrace{\frac{1}{A}\int_{-A}^{A}\sum_{j<j_0}|\lambda_j|^2|\langle f_j, e^{-itT}f\rangle|^2\,\mathrm{d}t}_{\to\, 0 \quad \text{für} \quad A\to\infty} + \frac{1}{A}\int_{-A}^{A}\underbrace{\sum_{j\ge j_0}|\lambda_j|^2|\langle f_j, e^{-itT}f\rangle|^2\,\mathrm{d}t}_{\le\varepsilon\|f\|^2 \quad \text{für alle} \quad A} \\
&\quad \le \varepsilon + \varepsilon\|f\|^2 \qquad \text{für hinreichend großes} \quad A\,.
\end{aligned}$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig war, folgt die Behauptung in diesem Fall.

Ist $f \in R(P_c) = H_c$ beliebig, so gilt $(E(n) - E(-n))f \longrightarrow f$ und nach dem eben Bewiesenen $(E(n) - E(-n))f \in \tilde{\mathcal{H}}_s$. Damit folgt die Behauptung aus der Abgeschlossenheit von $\tilde{\mathcal{H}}_s$. □

Ist $H_{ac} = H_c$ (d. h. $H_{sc} = \{0\}$), so erhält man unter der Voraussetzung von Satz 2.10 die ***vollständige Charakterisierung***

$$\mathcal{H}_b = H_p \qquad \text{und} \qquad \mathcal{H}_s = \tilde{\mathcal{H}}_s = H_{ac} = H_c\,.$$

Es ist deshalb eine interessante Frage, ob für konkrete Operatoren $H_{sc} = \{0\}$ gilt. Für viele einfache Operatoren gilt dies. Man erwartet eine positive Antwort für alle physikalisch relevanten Schrödingeroperatoren.

2.3 Zur Voraussetzung des RAGE–Theorems

Es ist das Ziel dieses Abschnitts zu zeigen, daß „praktisch“ alle physikalisch interessanten Schrödingeroperatoren die Voraussetzung des RAGE–Theorems (Satz 2.10) erfüllen. Es zeigt sich, daß dies insbesondere dann gilt, wenn ein Schrödingeroperator (mit elektrischem und magnetischem Feld) auf $D(-\Delta)$ selbstadjungiert ist. — Zunächst aber ein abstraktes Resultat.

Satz 2.12 *Sei T selbstadjungiert im Hilbertraum H mit Spektralschar E und $z \in \varrho(T)$.*

a) *Ist B ein Operator mit $D(B) \supset D(T^n)$ und $B(T-z)^{-n}$ kompakt für ein $n \in \mathbb{N}_0$, so ist $BE(J)$ kompakt für jedes beschränkte Intervall J.*

b) *Ist B außerdem T–beschränkt mit T–Schranke 0, so ist $B(T-z)^{-1}$ kompakt. (Da der Operator B im folgenden sogar beschränkt sein wird, bedeutet es keine Abschwächung der Resultate, nur $n = 1$ zu betrachten.)*

Beweis. a) Für jedes beschränkte Intervall J gilt offenbar $R(E(J)) \subset D(T^n) \subset D(B)$ und

$$BE(J) = \Big(B(T-z)^{-n}\Big)\Big((T-z)^n E(J)\Big).$$

Hier ist der erste Faktor nach Voraussetzung kompakt und der zweite beschränkt,

$$\Big\|(T-z)^n E(J)\Big\| = \sup\Big\{|t-z|^n : t \in J\Big\}.$$

b) Nur für $n > 1$ ist etwas zu zeigen. Man schreibt

$$B(T-z)^{-1} = B(T-z)^{-n}(T-z)^{n-1}E(J) + B(T-z)^{-1}E(\mathbb{R} \setminus J).$$

Hier ist der erste Term auf der rechten Seite kompakt für jedes beschränkte Intervall J, während der zweite beliebig kleine Norm hat, wenn J hinreichend groß ist. Also ist $B(T-z)^{-1}$ Limes kompakter Operatoren und somit selbst kompakt. □

Satz 2.13 *Für jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^m$ ist $\chi_K(-\Delta - z)^{-1}$ kompakt für jedes $z \in \mathbb{C}\backslash[0,\infty)$.*

Beweis. Für jedes $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$ gilt

$$\begin{aligned}
\big(\chi_K(-\Delta - z)^{-1} f\big)(x) &= \left(\chi_K \lim_{N\to\infty} F^{-1}\chi_{\{|\cdot|\le N\}}(\cdot)\frac{1}{|\cdot|^2 - z} F f\right)(x) \\
&= \chi_K(x)\,(2\pi)^{-m/2} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \int\limits_{|y|\le N} e^{ixy}\frac{1}{|y|^2 - z} F f(y)\,\mathrm{d}y \\
&= \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \int g_{K,N}(x,y) F f(y)\,\mathrm{d}y
\end{aligned}$$

mit

$$g_{K,N}(x,y) = \begin{cases} \dfrac{1}{(2\pi)^{m/2}}\,\dfrac{e^{ixy}}{|y|^2 - z} & \text{für } |y| \le N, x \in K\,, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Da $g_{K,N} \in L_2(\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m)$ gilt, ist der durch den Kern $g_{K,N}$ erzeugte Integraloperator $G_{K,N}$ ein Hilbert–Schmidt–Operator[1] und somit kompakt. (Letzteres sieht man am leichtesten folgendermaßen ein: Sei $k(x) := \{\int |g_{K,N}(x,y)|^2\,\mathrm{d}y\}^{1/2}$; offenbar ist $k \in L_2(\mathbb{R}^m)$. Sei nun (f_n) eine schwache Nullfolge. Dann gilt für f. a. $x \in \mathbb{R}^m$ (nämlich für die x, für die $k(x)$ definiert ist)

$$\Big|(G_{K,N} f_n)(x)\Big| \le k(x)\|f_n\| \le Ck(x), \quad (G_{K,N} f_n)(x) \longrightarrow 0\,.$$

Nach dem Satz von Lebesgue gilt also $G_{K,N} f_n \longrightarrow 0$).

Außerdem gilt offensichtlich

$$\begin{aligned}
&\Big\|\chi_K(-\Delta - z)^{-1} - G_{K,N} F\Big\| = \Big\|\chi_K F^{-1}\chi_{\{|\cdot|>N\}}(\cdot)\frac{1}{|\cdot|^2 - z} F\Big\| \\
&\le \Big\|\chi_{\{|\cdot|>N\}}(\cdot)\,\frac{1}{|\cdot|^2 - z}\Big\|_\infty \le \Big|\frac{1}{N^2 - z}\Big| \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad N \longrightarrow \infty\,.
\end{aligned}$$

Also ist auch $\chi_K(-\Delta - z)^{-1}$ kompakt (denn der Norm–Limes einer Folge von kompakten Operatoren ist kompakt, vgl. z. B. „Mathematische Methoden der Quantenmechanik“, Satz 2.3). □

Anmerkung: Aus dem Beweis liest man sofort ab, daß auch folgendes gilt: für jedes $p > 0$ ist $\chi_K(-\Delta - z)^{-p}$ kompakt; für $p > \dfrac{m}{4}$ ist $\chi_K(-\Delta - z)^{-p}$ ein Hilbert–Schmidt–Operator.

Satz 2.14 a) *Sind T und A abgeschlossene Operatoren mit $D(T) \subset D(A)$, so ist A bezüglich T relativ beschränkt; für jedes $z \in \varrho(T)$ ist also $A(T - z)^{-1}$ beschränkt.*

[1] Dies ist ein Spezialfall des Resultats, daß $M_g F M_h$ ein Hilbert–Schmidt–Operator ist, falls $g, h \in L_2(\mathbb{R}^m)$ sind.

b) *Sei* T *selbstadjungiert in* $L_2(\mathbb{R}^m)$ *mit Spektralschar* E *und* $D(T) \subset D(-\Delta)$ *. Dann ist* $\chi_K E(J)$ *kompakt für jede kompakte Teilmenge* $K \subset \mathbb{R}^m$ *und jedes beschränkte Intervall* J *.*

Beweis. a) Nach dem Satz vom abgeschlossenen Graphen genügt es zu zeigen, daß A als Operator von $(D(T), \|\cdot\|_T)$ nach H abschließbar (also abgeschlossen) ist. Sei (x_n) aus $D(T)$ mit $\|x_n\|_T \longrightarrow 0$ (also insbesondere $\|x_n\| \longrightarrow 0$) und $Ax_n \longrightarrow y$. Da A als Operator in H abgeschlossen ist, gilt dann $y = 0$.

b) Nach Teil a) ist $\Delta(T-z)^{-1}$ beschränkt für jedes $z \in \varrho(T)$. Die behauptete Kompaktheit folgt nun aus Satz 2.12, Satz 2.13 und

$$\chi_K (T-z)^{-1} = \Big(\chi_K(-\Delta - z)^{-1}\Big)\Big((-\Delta - z)\,(T-z)^{-1}\Big)$$

(denn das Produkt aus einem kompakten und einem beschränkten Operator ist stets kompakt). □

Es bleibt zu untersuchen, unter welchen Voraussetzungen ein Differentialausdruck (formaler Schrödingeroperator)

$$\sum_{j=1}^{m}\Big(\frac{1}{i}\,\frac{\partial}{\partial x_j} - A_j(x)\Big)^2 + V(x) =: -\Delta + W$$

einen selbstadjungierten Operator T mit $D(T) \subset D(-\Delta)$ oder sogar $D(T) = D(-\Delta)$ erzeugt. Kriterien dafür haben wir bereits in „Mathematische Methoden der Quantenmechanik“ bewiesen (insbesondere in Satz 10.14); damit erhalten wir beispielhaft die folgende hinreichende Voraussetzung für die Anwendbarkeit des RAGE–Theorems, die für die meisten konkreten Fälle völlig ausreicht. Dabei sei für eine meßbare Funktion $v : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{C}$ und einen Teilraum M von $\mathbb{R}^m$

$$N_{v,M}(x) := \int\limits_{\substack{y \in M \\ |x-y| \le 1}} |v(y)|^2\,\mathrm{d}y \quad (\le \infty) \qquad \text{für alle} \quad x \in \mathbb{R}^m .$$

Satz 2.15 *Sind* $V : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$ *meßbar und* $A : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$ *meßbar und beschränkt, und ist*

$N_{V,M}(\cdot)$ *beschränkt für einen Teilraum* M *von* $\mathbb{R}^m$ *mit* $\dim M \le 3$,

$N_{\operatorname{div} A,M'}(\cdot)$ *beschränkt für einen Teilraum* M' *von* $\mathbb{R}^m$ *mit* $\dim M' \le 3$,

so hat W *die* $-\Delta$*–Schranke* 0 *,* $T = -\Delta + W$ *ist selbstadjungiert auf* $D(T) = D(-\Delta)$*, und für die Spektralschar* E *von* $T = -\Delta + W$ *gilt: Für jede kompakte Teilmenge* K *von* $\mathbb{R}^m$ *und jedes beschränkte Intervall* J *ist* $\chi_K E(J)$ *kompakt.*

3 Der Formalismus der Streutheorie

3.1 Die Wellenoperatoren

Wir folgen hier im wesentlichen der Darstellung in J. Weidmann: Lineare Operatoren in Hilberträumen, 11.1.

Seien T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum H mit Spektralscharen E_1 bzw. E_2. Wir stellen uns dabei vor, daß T_1 der Schrödingeroperator des „freien" Systems ist, T_2 der des „gestörten" Systems. Entsprechend den Überlegungen in 1 erwarten wir, daß zu jedem $f \in H$ ein $g \in H$ existiert mit

$$e^{-itT_1} f \sim e^{-itT_2} g \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty\,;$$

damit ist genauer gemeint:

$$\left\| e^{-itT_1} f - e^{-itT_2} g \right\| \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty\,.$$

Dies ist gleichbedeutend mit

$$\left\| e^{itT_2} e^{-itT_1} f - g \right\| \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty\,, \qquad \text{d.h.} \quad g = \lim_{t\to\infty} e^{itT_2} e^{-itT_1} f\,.$$

Die Existenz des oben geforderten g ist also gleichbedeutend mit der Existenz dieses Grenzwerts. — Die gleichen Überlegungen gelten natürlich für $t \longrightarrow -\infty$.

Man definiert deshalb die ***Møller–Wellenoperatoren*** (C. Møller: Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Nat. Fys. Nedd. **22/23**, 1945/1946) $\Omega_\pm(T_2, T_1)$ durch

$$\begin{aligned} D(\Omega_\pm(T_2,T_1)) \quad &:= \quad \left\{ f \in H : \lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} e^{-itT_1} f \quad \text{existiert} \right\}, \\ \Omega_\pm(T_2,T_1) f \quad &:= \quad \lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} e^{-itT_1} f \qquad \text{für} \quad f \in D(\Omega_\pm(T_2,T_1))\,. \end{aligned}$$

Offensichtlich sind die $\Omega_\pm(T_2,T_1)$ isometrische Abbildungen von $D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ in H.

Satz 3.1 a) $D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ *sind abgeschlossene Teilräume von* H*, die* T_1 *reduzieren.*

b) $R(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ *sind abgeschlossene Teilräume von* H*, die* T_2 *reduzieren.*

c) *Es gilt*

$$R(\Omega_\pm(T_2,T_1)) = D(\Omega_\pm(T_1,T_2)), \quad \Omega_\pm(T_2,T_1) = \Omega_\pm(T_1,T_2)^{-1}\,.$$

d. h. für $f \in D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ *und* $g \in D(\Omega_\pm(T_1,T_2))$ *gilt*

$$\Big\langle g, \Omega_\pm(T_2,T_1) f \Big\rangle = \Big\langle \Omega_\pm(T_1,T_2) g, f \Big\rangle\,.$$

d) *Für alle* $s \in \mathbb{R}$ *und jede beschränkte stetige Funktion* $u : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ *gilt:*

$$\begin{aligned}
\Omega_\pm(T_2, T_1)e^{isT_1} &= e^{isT_2}\Omega_\pm(T_2, T_1)\,, \\
\Omega_\pm(T_2, T_1)E_1(s) &= E_2(s)\Omega_\pm(T_2, T_1)\,, \\
\Omega_\pm(T_2, T_1)u(T_1) &= u(T_2)\Omega_\pm(T_2, T_1)\,;
\end{aligned}$$

*man nennt dies die „**intertwining**“ (verbindende) Eigenschaft.*

Beweis. Die Eigenschaften a) ... d) werden nicht getrennt voneinander bewiesen.

Es ist offensichtlich, daß $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ und $R(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ Teilräume sind. Da die $\Omega_\pm(T_2, T_1)$ auf $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ isometrisch sind, folgt die Abgeschlossenheit von $R(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ aus der von $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$.

Abgeschlossenheit von $\mathbf{D(\Omega_\pm(T_2, T_1))}$: Sei $f \in \overline{D(\Omega_\pm(T_2, T_1))}$. Dann existiert zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $g_\pm \in D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ mit $\|f - g_\pm\| < \varepsilon/3$ und ein $t_\pm > 0$ mit

$$\left\|\left(e^{itT_2}e^{-itT_1} - e^{isT_2}e^{-isT_1}\right) g_\pm\right\| < \frac{\varepsilon}{3} \qquad \text{für} \quad t, s > t_+ \quad \text{bzw.} \quad t, s < -t_-\,.$$

Also gilt

$$\begin{aligned}
\left\|\left(e^{itT_2}e^{-itT_1} - e^{isT_2}e^{-isT_1}\right) f\right\| &\le \left\|e^{itT_2}e^{-itT_1}(f - g_\pm)\right\| \\
&\quad + \left\|\left(e^{itT_2}e^{-itT_1} - e^{isT_2}e^{-isT_1}\right) g_\pm\right\| + \left\|e^{isT_2}e^{-isT_1}(g_\pm - f)\right\| \\
&< \frac{\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} = \varepsilon \qquad \text{für} \quad t, s > t_+ \quad \text{bzw.} \quad t, s < -t_-\,.
\end{aligned}$$

Dies impliziert die Existenz des Grenzwertes von $e^{itT_2}e^{-itT_1}f$ für $t \longrightarrow \pm\infty$, d.h. es ist $f \in D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$.

$\mathbf{\Omega_\pm(T_2, T_1)e^{isT_1} = e^{isT_2}\Omega_\pm(T_2, T_1)}$: An der Gleichung

$$e^{itT_2}e^{-itT_1}e^{isT_1}f = e^{isT_2}e^{i(t-s)T_2}e^{-i(t-s)T_1}f$$

erkennt man, daß der Limes auf beiden Seiten für $t \longrightarrow \pm\infty$ genau dann existiert, wenn $f \in D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ ist, d.h. es gilt

$$e^{isT_1}D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) = D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) \qquad \text{für alle} \quad s \in \mathbb{R}\,,$$

und die gewünschte Gleichung ergibt sich durch Grenzübergang.

$\mathbf{D(\Omega_\pm(T_2, T_1))}$ ***reduziert*** $\mathbf{e^{isT_1}}$ ***:*** Aus $e^{isT_1}D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) = D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ und der Unitarität von e^{isT_1} folgt auch $e^{isT_1}D(\Omega_\pm(T_2, T_1))^\perp = D(\Omega_\pm(T_2, T_1))^\perp$.

Hieraus folgt, daß $D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ auch T_1 reduziert, da iT_1 der infinitesimale Generator von e^{isT_1} ist.

$\mathbf{R(\Omega_\pm(T_2,T_1)) = D(\Omega_\pm(T_1,T_2))}$ ***und*** $\mathbf{\Omega_\pm(T_1,T_2) = \Omega_\pm(T_2,T_1)^{-1}}$ (hieraus folgt übrigens nochmals die Abgeschlossenheit von $R(\Omega_\pm(T_2,T_1))$: Ist $g = \Omega_\pm(T_2,T_1)f \in R(\Omega_\pm(T_2,T_1))$, so gilt

$$\left\|e^{itT_1}e^{-itT_2}g - f\right\| = \left\|g - e^{itT_2}e^{-itT_1}f\right\| \to 0 \qquad \text{für} \quad t\to\pm\infty\,,$$

also ist $g \in D(\Omega_\pm(T_1,T_2))$ und $\Omega_\pm(T_1,T_2)g = f = \Omega_\pm(T_2,T_1)^{-1}g$. Ist umgekehrt $g \in D(\Omega_\pm(T_1,T_2))$ und $f = \Omega_\pm(T_1,T_2)g$, so gilt entsprechend $f \in D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ und $g = \Omega_\pm(T_2,T_1)f \in R(\Omega_\pm(T_2,T_1))$.

Damit ist auch klar, daß $R(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ die Operatoren e^{isT_2}, und somit auch T_2, reduziert.

Um die letzten zwei Gleichungen zu beweisen, benötigen wir, daß für $j=1,2$, alle $f,g\in H$ und $\operatorname{Im} z > 0$ gilt

$$\begin{aligned}
i\int_0^\infty e^{izt}\langle f, e^{-itT_j}g\rangle\,\mathrm{d}t &= i\int_0^\infty e^{izt}\left\{\int e^{-its}\,\mathrm{d}_s\langle f, E_j(s)g\rangle\right\}\mathrm{d}t\\
&= i\int\left\{\int_0^\infty e^{it(z-s)}\,\mathrm{d}t\right\}\mathrm{d}_s\langle f, E_j(s)g\rangle\\
&= -\int (z-s)^{-1}\,\mathrm{d}_s\langle f, E_j(s)g\rangle\\
&= \langle f, (T_j-z)^{-1}g\rangle\,,
\end{aligned}$$

und entsprechend gilt für $\operatorname{Im} z < 0$

$$-i\int_{-\infty}^0 e^{izt}\langle f, e^{-itT_j}g\rangle\,\mathrm{d}t = \langle f, (T_j-z)^{-1}g\rangle\,.$$

Zusammen mit der Intertwining–Eigenschaft für e^{itT_j} ergibt sich damit für alle $f\in D(\Omega_\pm(T_1,T_2))$, $g\in D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ und $\operatorname{Im} z>0$

$$\begin{aligned}
&\left\langle f, (T_2-z)^{-1}\Omega_\pm(T_2,T_1)g\right\rangle = i\int_0^\infty e^{izt}\left\langle f, e^{-itT_2}\Omega_\pm(T_2,T_1)g\right\rangle\mathrm{d}t\\
&= i\int_0^\infty e^{izt}\left\langle \Omega_\pm(T_1,T_2)f, e^{-itT_1}g\right\rangle\mathrm{d}t = \left\langle \Omega_\pm(T_1,T_2)f, (T_1-z)^{-1}g\right\rangle\\
&= \left\langle f, \Omega_\pm(T_2,T_1)\,(T_1-z)^{-1}g\right\rangle,
\end{aligned}$$

und somit

$$(T_2 - z)^{-1}\Omega_\pm(T_2, T_1) \;=\; \Omega_\pm(T_2, T_1)(T_1 - z)^{-1}\,.$$

Das gleiche gilt für $\operatorname{Im} z < 0$. Mit der Stoneschen Formel (Mathematische Methoden der Quantenmechanik, Satz 9.3) folgt hieraus die Intertwining–Eigenschaft für die Spektralscharen $E_j(\cdot)$, und der Funktionalkalkül liefert sie für die Operatoren $u(T_j)$. □

Satz 3.2 a) *Ist f ein Eigenelement von T_1 (zu einem Eigenwert λ), so gilt $f \in D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ genau dann, wenn f auch Eigenelement von T_2 zum gleichen Eigenwert ist, d.h. es gilt*

$$D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) \cap N(T_1 - \lambda) = N(T_2 - \lambda) \cap N(T_1 - \lambda)\,.$$

Ist $N(T_1 - \lambda) \cap N(T_2 - \lambda) = \{0\}$, so gilt

$$N(T_1 - \lambda) \subset D(\Omega_\pm(T_2, T_1))^\perp\,.$$

b) *Es gilt für jedes $\lambda \in \mathbb{R}$*

$$N(T_1 - \lambda) \ominus \Big(N(T_1 - \lambda) \cap N(T_2 - \lambda)\Big) \subset D(\Omega_\pm(T_2, T_1))^\perp\,.$$

Beweis. a) $\Longleftarrow$: Ist f auch Eigenelement von T_2 zum Eigenwert λ, so gilt offensichtlich für alle $t \in \mathbb{R}$

$$e^{itT_2}e^{-itT_1}f = e^{itT_2}e^{-it\lambda}f = e^{-it\lambda}e^{itT_2}f = e^{-it\lambda}e^{it\lambda}f = f\,,$$

d.h. f liegt in $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$.

$\Longrightarrow$: Ist $f \in D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$, so gilt für alle $s \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \left\| e^{is(T_2-\lambda)}f - f \right\| &= \left\| e^{i(t+s)T_2}e^{-i(t+s)\lambda}f - e^{itT_2}e^{-it\lambda}f \right\| \\ &= \left\| e^{i(t+s)T_2}e^{-i(t+s)T_1}f - e^{itT_2}e^{-itT_1}f \right\| \\ &\longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad t \to \pm\infty\,, \end{aligned}$$

also

$$e^{is(T_2-\lambda)}f = f \qquad \text{für alle} \quad s \in \mathbb{R}\,.$$

Daraus ergibt sich, da $i(T_2 - \lambda)$ der infinitesimale Generator von $e^{is(T_2-\lambda)}$ ist,

$$f \in D(T_2 - \lambda) = D(T_2)\,,$$
$$(T_2 - \lambda)f = \lim_{s\to 0} \frac{-i}{s}\left(e^{is(T_2-\lambda)}f - f\right) = 0\,,$$

und somit $T_2 f = \lambda f$.

Der letzte Teil der Behauptung folgt aus der Vertauschbarkeit der Projektionen auf $N(T_1 - \lambda)$ und $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ und der Tatsache, daß in diesem Fall $N(T_1 - \lambda) \cap D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) = \{0\}$ gilt.

b) Seien

$$P_1 := E_1(\{\lambda\}) \text{ die orthogonale Projektion auf } N(T_1 - \lambda)\,,$$
$$P_\pm := \text{die orthogonale Projektion auf } D(\Omega_\pm(T_2, T_1))\,.$$

Da P_1 und $P_\pm$ nach Satz 3.1 vertauschbar sind, ist

$$R_\pm := P_1 P_\pm = P_\pm P_1 \text{ die orthogonale Projektion auf } D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) \cap N(T_1 - \lambda)\,.$$

Mit $S_\pm := P_1 - R_\pm$ und $Q_\pm = P_\pm - R_\pm$ sind also $S_\pm$ und $Q_\pm$ vertauschbar, und es gilt $R(S_\pm) \cap R(Q_\pm) = \{0\}$. Somit gilt

$$Q_\pm S_\pm = S_\pm Q_\pm = 0\,, \quad \text{d. h.} \quad R(S_\pm) \perp R(Q_\pm)\,.$$

Wegen (vgl. Teil a)

$$N(T_1 - \lambda) \ominus \left\{N(T_1 - \lambda) \cap N(T_2 - \lambda)\right\}$$
$$= N(T_1 - \lambda) \ominus \left\{N(T_1 - \lambda) \cap D(\Omega_\pm(T_2, T_1))\right\} = R(S_\pm)$$

und

$$D(\Omega_\pm(T_2, T_1)) = R(P_\pm) = R(R_\pm + Q_\pm) = R(R_\pm) \oplus R(Q_\pm)$$

folgt hiermit die Behauptung. □

Ist $M \subset H$ ein T_1 reduzierender Teilraum (d.h. M ist abgeschlossen und $E_1(\lambda)$ kommutiert für jedes λ mit der orthogonalen Projektion P_M auf M), so existiert der (verallgmeinerte) ***Wellenoperator***

$$W_\pm(T_2, T_1, P_M) := \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} e^{-itT_1} P_M$$

genau dann, wenn $M \subset D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ gilt. Speziell existiert $W_\pm(T_2,T_1) := W_\pm(T_2,T_1,I)$ genau dann, wenn $D(\Omega_\pm(T_2,T_1)) = H$ ist. Auf Grund des vorhergehenden Satzes wird man in der Regel $M \subset H_c(T_1)$ wählen. $W_\pm(T_2,T_1,P_M)$ ist eine partielle Isometrie mit Anfangsmenge M und Endmenge $R(W_\pm(T_2,T_1,P_M)) = \Omega_\pm(T_2,T_1)M$; deshalb gilt

$$\begin{aligned} W_\pm(T_2,T_1,P_M)^*\, W_\pm(T_2,T_1,P_M) &= P_M\,, \\ W_\pm(T_2,T_1,P_M)\, W_\pm(T_2,T_1,P_M)^* &= P_{R(W_\pm(T_2,T_1,P_M))}\,. \end{aligned}$$

Die Bezeichnung „verallgemeinerter“ Wellenoperator wurde zunächst eingeführt, als man von $P_M = I$ zum allgmeineren Fall $P_M \neq I$ überging; sie ist heute nicht mehr üblich, insbesondere sollte sie nicht mit dem Begriff „modifizierter“ Wellenoperator verwechselt werden, der in der „long range“ Streuung benutzt wird.

Satz 3.3 *Seien T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren in H ,*

$$M_1 \subset D(\Omega_\pm(T_2,T_1)) \text{ ein } T_1 \text{ reduzierender Teilraum, } P_1 := P_{M_1}\,,$$

$$M_2 := R(W_\pm(T_2,T_1,P_1)) = \Omega_\pm(T_2,T_1)M_1\,, \quad P_2 := P_{M_2}\,.$$

Dann gilt:

$$M_2 \subset D(\Omega_+(T_1,T_2)) \text{ ist ein } T_2 \text{ reduzierender Teilraum,}$$

$$e^{isT_2}W_+(T_2,T_1,P_1) = W_+(T_2,T_1,P_1)e^{isT_1}\,,$$

$$T_2W_+(T_2,T_1,P_1) = W_+(T_2,T_1,P_1)T_1P_1 \supset W_+(T_2,T_1,P_1)T_1\,,$$

$$T_1W_+(T_2,T_1,P_1)^* = W_+(T_2,T_1,P_1)^*\,T_2P_2 \supset W_+(T_2,T_1,P_1)^*\,T_2\,,$$

$$T_1\Big|_{M_1} \text{ ist unitär äquivalent zu } T_2\Big|_{M_2}\,,$$

$$\text{aus } M_1 \subset H_c(T_1) \text{ bzw. } H_{ac}(T_1) \text{ folgt } M_2 \subset H_c(T_2) \text{ bzw. } H_{ac}(T_2)\,.$$

Entsprechendes gilt für $W_-(T_2,T_1,P_1)$.

Beweis. Mit M_1 ist auch $M_2 = \Omega_+(T_2,T_1)M_1$ abgeschlossen. Da e^{isT_1} von M_1 reduziert wird, gilt mit $W_+ := W_+(T_2,T_1,P_1)$ für alle s

$$\begin{aligned} e^{isT_2}W_+ &= e^{isT_2}\Omega_+(T_2,T_1)P_1 = \Omega_+(T_2,T_1)e^{isT_1}P_1 \\ &= \Omega_+(T_2,T_1)P_1e^{isT_1} = W_+e^{isT_1}\,. \end{aligned}$$

Insbesondere folgt $e^{isT_2}M_2 \subset M_2$ für alle s, also $e^{isT_2}M_2 = M_2$ und $e^{isT_2}M_2^{\perp} = M_2^{\perp}$. Hieraus folgt (vgl. Beweis von Satz 3.1), daß M_2 den Operator T_2 reduziert. Aus

$$e^{isT_2}P_2 = e^{isT_2}W_+W_+^* = W_+e^{isT_1}W_+^* = W_+(e^{isT_1}P_1)W_+^*$$

folgt, daß die Einschränkungen von e^{isT_1} bzw. e^{isT_2} auf M_1 bzw. M_2 unitär äquivalent sind. Dies gilt dann auch für die infinitesimalen Generatoren, also

$$\begin{aligned} T_2P_2 &= W_+T_1P_1W_+^*\,, \\ T_2W_+ &= T_2P_2W_+ \;=\; W_+T_1P_1W_+^*W_+ \;=\; W_+T_1P_1 \supset W_+T_1\,, \end{aligned}$$

und mit $(AB)^* \supset B^*A^*$ bzw. $(BA)^* = A^*B^*$ für beschränktes B folgt

$$\begin{aligned} W_+^*T_2 &\subset W_2^*T_2P_2 = W_+^*(T_2P_2)^* \subset (T_2P_2W_+)^* = (T_2W_+)^* \\ &\subset (W_+T_1)^* = T_1^*W_+^* = T_1W_+^*\,. \end{aligned}$$

Alle weiteren Aussagen sind hierin enthalten. Insbesondere folgt die letzte Aussage aus

$$\varrho_{2,W_+x}(\lambda) = \|E_2(\lambda)W_+x\|^2 = \|W_+E_1(\lambda)x\|^2 = \|E_1(\lambda)x\|^2 = \varrho_{1,x}(\lambda)\,. \qquad \square$$

Die folgenden einfachen Beziehungen werden häufig benötigt:

Satz 3.4 *Seien T_1 und T_2 selbstadjungiert im Hilbertraum H, $M_1 \subset D(\Omega_+(T_2,T_1))$ ein T_1 reduzierender Teilraum, $P_1 := P_{M_1}$, $M_2 := R(W_+(T_2,T_1,P_1))$, $P_2 := P_{M_2}$. Mit $W_+ = W_+(T_2,T_1,P_1)$ gilt dann für $t \longrightarrow \infty$:*

(1) $e^{-itT_2}W_+ - e^{-itT_1}P_1 \stackrel{s}{\longrightarrow} 0$,

(2) $e^{itT_1}e^{-itT_2}W_+ \stackrel{s}{\longrightarrow} P_1$,

(3) $e^{itT_1}e^{-itT_2}P_2 \stackrel{s}{\longrightarrow} W_+^*$,

(4) $(W_+ - I)e^{-itT_1}P_1 \stackrel{s}{\longrightarrow} 0$,

(5) $(W_+^* - I)e^{-itT_1}P_1 \stackrel{s}{\longrightarrow} 0$,

(6) $e^{itT_1}W_+e^{-itT_1}P_1 \stackrel{s}{\longrightarrow} P_1$,

(7) $e^{itT_1}W_+^*e^{-itT_1}P_1 \stackrel{s}{\longrightarrow} P_1$,

(8) $(I - P_2)e^{-itT_1}P_1 \stackrel{s}{\longrightarrow} 0$,

(9) $W_+(T_1,T_2,P_2) = W_+(T_2,T_1,P_1)^*$.

Entsprechendes gilt für $W_- = W_-(T_2, T_1, P_1)$ *und* $t \longrightarrow -\infty$.

Beweis. (1) folgt aus der Definition von W_+ durch Multiplikation mit e^{-itT_2}.
(2) folgt aus (1) durch Multiplikation mit e^{itT_1}.
(3) folgt aus (2) durch Multiplikation mit W_+^* von rechts.
(4) folgt aus (1) mit

$$e^{-itT_2} W_+ = W_+ e^{-itT_1} = W_+ P_1 e^{-itT_1} = W_+ e^{-itT_1} P_1 \,.$$

(5) folgt aus (4) durch Multiplikation mit W_+^* und mit

$$W_+^* W_+ e^{-itT_1} P_1 = P_1 e^{-itT_1} P_1 = e^{-itT_1} P_1 \,.$$

(6) folgt aus (4) durch Multiplikation mit e^{itT_1}.
(7) folgt aus (5) durch Multiplikation mit e^{itT_1}.
(8) erhält man aus

$$\begin{aligned} \left\|(I-P_2)e^{-itT_1}P_1 f\right\| &= \left\|e^{itT_2}(I-P_2)e^{-itT_1}P_1 f\right\| \\ &= \left\|(I-P_2)e^{itT_2}e^{-itT_1}P_1 f\right\| \to \|(I-P_2)W_+ f\| = 0 \,. \end{aligned}$$

(9) ergibt sich unmittelbar aus (3). □

Satz 3.5 (Kettenregel) *Seien* T_1, T_2, T_3 *selbstadjungiert,*

$$\begin{aligned} &M_1 \subset D(\Omega_+(T_2, T_1)) \qquad \textit{reduziere} \quad T_1\,, \quad P_1 := P_{M_1}\,, \\ &M_2 \subset D(\Omega_+(T_3, T_2)) \qquad \textit{reduziere} \quad T_2\,, \quad P_2 := P_{M_2}\,, \end{aligned}$$

und es gelte

$$R(W_+(T_2, T_1, P_1)) = \Omega_\pm(T_2, T_1) M_1 \subset M_2 \,.$$

Dann gilt $M_1 \subset D(\Omega_+(T_3, T_1))$ *und*

$$W_+(T_3, T_1, P_1) = W_+(T_3, T_2, P_2)\, W_+(T_2, T_1, P_1) \,.$$

Entsprechendes gilt für W_- .

Beweis. Für $f \in M_1$ gilt

$$\begin{aligned} e^{itT_3} e^{-itT_1} f &= \left(e^{itT_3} e^{-itT_2}\right) \left(e^{itT_2} e^{-itT_1}\right) f \\ &= e^{itT_3} e^{-itT_2} \underbrace{\Omega_+(T_2,T_1) f}_{\in D(\Omega_+(T_3,T_2))} + e^{itT_3} e^{-itT_2} \underbrace{(e^{itT_2} e^{-itT_1} - \Omega_+(T_2,T_1)) f}_{\to 0 \;\; \text{für} \;\; t \to \infty} \\ &\to \Omega_+(T_3,T_2)\, \Omega_+(T_2,T_1) f \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty\,. \end{aligned}$$

Also ist $M_1 \subset D(\Omega_+(T_3,T_1))$, und es gilt

$$\Omega_+(T_3,T_1) f = \Omega_+(T_3,T_2)\, \Omega_+(T_2,T_1) f \qquad \text{für} \quad f \in M_1\,.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} W_+(T_3,T_1,P_1) &= \Omega_+(T_3,T_1) P_1 = \Omega_+(T_3,T_2)\, \Omega_+(T_2,T_1) P_1 \\ &= \Omega_+(T_3,T_2) P_2\, \Omega_+(T_2,T_1) P_1 \\ &= W_+(T_3,T_2,P_2)\, W_+(T_2,T_1,P_1)\,. \end{aligned}$$

□

Satz 3.6 *Seien* T_1 *und* T_2 *selbstadjungiert,*

$$M_1 \subset D(\Omega_+(T_2,T_1)) \;\; \textit{reduziere}\; T_1\,, \quad M_2 \subset D(\Omega_+(T_1,T_2)) \;\; \textit{reduziere}\; T_2\,,$$

und es gelte

$$R(W_+(T_2,T_1,P_1)) \subset M_2 \quad \textbf{oder} \quad R(W_+(T_1,T_2,P_2)) \subset M_1\,.$$

Dann folgt

$$R(W_+(T_2,T_1,P_1)) = M_2 \quad \textbf{und} \quad R(W_+(T_1,T_2,P_2)) = M_1\,,$$

$$W_+(T_1,T_2,P_2) = W_+(T_2,T_1,P_1)^*\,.$$

Entsprechendes gilt für W_- *.*

Beweis. Offensichtlich gilt

$$W_+(T_j,T_j,P_j) = P_j \qquad \text{für} \quad j = 1,2\,.$$

Mit der Kettenregel folgt hieraus

$$W_+(T_2, T_1, P_1)\, W_+(T_1, T_2, P_2) = P_2\,, \quad \text{also} \quad R(W_+(T_2, T_1, P_1)) \supset M_2$$

bzw.

$$W_+(T_1, T_2, P_2)\, W_+(T_2, T_1, P_1) = P_1\,, \quad \text{also} \quad R(W_+(T_1, T_2, P_2)) \supset M_1\,.$$

Damit folgt in beiden Fällen die Gleichheit in der ersten Behauptung. Die letzte Behauptung ergibt sich nun aus Eigenschaft (9) von Satz 3.4 . □

Im folgenden wählen wir speziell $M_j = H_{ac}(T_j)$; die abstrakten Resultate gelten ebenso für $M_j = H_c(T_j)$, haben aber für konkrete Anwendungen keine Bedeutung.

Satz 3.7 *Seien* T_1 *und* T_2 *selbstadjungiert,*

$$H_{ac}(T_1) \subset D(\Omega_+(T_2, T_1))\,, \quad \textit{und} \quad H_{ac}(T_2) \subset D(\Omega_+(T_1, T_2))\,.$$

Dann gilt mit $P_{j,ac} = P_{H_{ac}(T_j)}$

$$R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})) = H_{ac}(T_2)\ , \qquad R(W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})) = H_{ac}(T_1)\ ,$$

$$W_+(T_1, T_2, P_{2,ac}) = W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})^*\,.$$

Die absolut stetigen Teile von T_1 *und* T_2 *sind also unitär äquivalent, wobei die unitäre Äquivalenz durch* $W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})$ *vermittelt wird. Entsprechendes gilt für* W_- *. Außerdem könnte ohne weiteres* H_{ac} *durch* H_c *ersetzt werden.*

Der ***Beweis*** ergibt sich durch Spezialisierung von Satz 3.6 , da nach Satz 3.3 jedenfalls $R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})) \subset H_{ac}(T_2)$ und $R(W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})) \subset H_{ac}(T_1)$ gilt.

Satz 3.8 *Es existiere* $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$ *. Dann gilt* $R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})) = H_{ac}(T_2)$ *genau dann, wenn auch* $W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})$ *existiert. In diesem Fall gilt auch* $R(W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})) = H_{1,ac}$ *. Entsprechendes gilt für* W_- *.*

Beweis. $\Longrightarrow$: Nach Satz 3.3 ist $H_{ac}(T_2) \subset D(\Omega_+(T_1, T_2))$, d.h. $W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})$ existiert.

$\Longleftarrow$: Es gilt $H_{ac}(T_1) \subset D(\Omega_+(T_2, T_1))$ und $H_{ac}(T_2) = R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})) \subset D(\Omega_+(T_1, T_2))$. Mit Satz 3.7 folgt diese Richtung und damit gleichzeitig die letzte Behauptung. □

Seien T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren und es existiere $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$. Man sagt, $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$ ist ***vollständig***, wenn $R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})) = H_{2,ac}$ gilt. Entsprechendes definiert man für W_- .

Satz 3.9 *Seien* T_1 *und* T_2 *selbstadjungierte Operatoren,* $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$ *existiere. Dann ist* $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$ *genau dann vollständig, wenn* $W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})$ *existiert. In diesem Fall ist auch* $W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})$ *vollständig. Entsprechendes gilt für* W_- *.*

Dies ist lediglich eine neue Formulierung von Satz 3.9 in der Sprache der eben gegebenen Definition.

3.2 Streuoperator und Streumatrix

Existieren $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$, so definiert man den ***Streuoperator*** S durch

$$S := W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})^* \, W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}) \; .$$

Falls $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ vollständig sind, ist $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})^* = W_+(T_1, T_2, P_{2,ac})$ und somit

$$S = W_+(T_1, T_2, P_{2,ac}) \, W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}) \, .$$

Offenbar wirkt dieser Streuoperator im absolutstetigen Teil des freien Operators genau so, wie wir dies von Anfang an von ihm erwartet haben, er transformiert einen freien Zustand aus $H_{ac}(T_1)$ in der fernen Vergangenheit in den zugehörigen freien Zustand aus $H_{ac}(T_1)$ in der fernen Zukunft (natürlich könnte hier wieder $P_{j,ac}$ z. B. durch $P_{j,c}$ ersetzt werden): Gilt für einen Zustand $\psi(t) = e^{-itT_2}\psi$ des gestörten Systems T_2

$$\|\psi(t) - e^{-itT_1}\psi_-\| \to 0 \quad \text{für} \quad t \to -\infty \, , \qquad \|\psi(t) - e^{-itT_1}\psi_+\| \to 0 \quad \text{für} \quad t \to +\infty \, ,$$

mit Zuständen $\psi_\pm \in H_{ac}(T_1)$, so ist

$$S\psi_- \; = \; \psi_+ \, .$$

Satz 3.10 *a) Gilt* $R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})) = R(W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}))$ *, so ist* S *unitär in* $H_{1,ac}$ *.*

b) Sind $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ *vollständig, so ist* S *unitär in* $H_{1,ac}$ *.*

Da also offenbar die Gleichheit der Wertebereiche von $W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$ und $W_-(T_2, T_1, P_{1,ac})$ ausreicht, um die Unitarität von S in $H_{1,ac}$ zu garantieren, bezeichnet man gelegentlich diese Eigenschaft als ***schwache asymptotische Vollständigkeit*** der Wellenoperatoren. (Die *asymptotische Vollständigkeit* bedeutet zusätzlich, daß es außer den Streuzuständen in $R(W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac}))$ nur noch gebundene Zustände gibt, $H = H_p(T_2) \oplus R(W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac}))$.)

Satz 3.11 *Existieren die Wellenoperatoren* $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ *, so ist* S *mit* T_1 *vertauschbar,* $ST_1 = T_1 S$ *bzw.* $SE_1(\lambda) = E_1(\lambda)S$ *für alle* $\lambda \in \mathbb{R}$ *.*

Beweis. Nach Satz 3.4 (9) gilt mit $M_2 := R(W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})$ und $P_2 := P_{M_2}$ für jedes $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} SE_1(\lambda) &= W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})^* \, W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}) E_1(\lambda) \\ &= W_+(T_1, T_2, P_2) E_2(\lambda) \, W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}) \\ &= E_1(\lambda) \, W_+(T_1, T_2, P_2) \, W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}) \\ &= E_1(\lambda) W_+(T_2, T_1, P_{1,ac})^* W_-(T_2, T_1, P_{1,ac}) = E_1(\lambda) S \,. \end{aligned}$$

Hieraus folgt die Behauptung. □

Im Rest des Abschnitts betrachten wir speziell $T_1 = -\Delta$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$. Es gilt dann

$$\widehat{T}_1 := F T_1 F^{-1} = M_{|\cdot|^2} \,.$$

Definiert man entsprechend

$$\widehat{S} := F S F^{-1} \,,$$

so sind natürlich $\widehat{S}$ und $\widehat{T}_1$ vertauschbar:

$$\widehat{S}\widehat{T}_1 = FSF^{-1}FT_1F^{-1} = FST_1F^{-1} = FT_1SF^{-1} = \widehat{T}_1\widehat{S} \,.$$

Stellt man den $L_2(\mathbb{R}^m)$ dar in der Form

$$L_2(\mathbb{R}^m) = L_2\Big(0, \infty,\, k^{m-1}\, \mathrm{d}k;\, L_2(S^{m-1})\Big) \quad \Big(= L_2(0, \infty,\, k^{m-1}\, \mathrm{d}k) \widehat{\otimes} L_2(S^{m-1})\Big),$$

so ist $\widehat{T}_1$ gleich dem Multiplikationsoperator mit k^2 . Wir werden sehen, daß der mit $\widehat{T}_1$ vertauschbare Operator $\widehat{S}$ „diese spezielle Struktur respektiert“. Dazu holen wir etwas weiter aus.

Es sei (X, μ) ein σ–endlicher Maßraum, d.h. X läßt sich darstellen als abzählbare Vereinigung von Mengen mit endlichem Maß,

$$X = \bigcup_{j=1}^{\infty} X_j \quad \text{mit} \quad X_j \subset X_{j+1} \quad \text{und} \quad \mu(X_j) < \infty \,.$$

Natürlich sind diese Mengen X_j nicht eindeutig bestimmt. Sie können ggf. jeweils so gewählt werden, daß die folgenden Sätze anwendbar werden. Mit $\mathcal{E}$ bezeichnen wir den Raum der ***einfachen Funktionen***, das sind Funktionen der Form

$$t : X \longrightarrow \mathbb{C} \ , \qquad t(x) = \sum t_k \chi_{M_k}(x) \, ,$$

wobei die Summe endlich ist, $t_k \in \mathbb{C}$, M_k μ–meßbar in X, und ein $j = j(t)$ existiert mit $M_k \subset X_j$ für alle k. $\mathcal{T}$ sei die Menge der durch Funktionen aus $\mathcal{E}$ erzeugten Multiplikationsoperatoren in $L_2(X, \mathrm{d}\mu)$ (und weiter unten auch in $L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$).

Satz 3.12 *Ein Operator $A \in B(L_2(X, \mathrm{d}\mu))$ ist genau dann ein Multiplikationsoperator, wenn er mit jedem Operator aus $\mathcal{T}$ vertauschbar ist. (Man beachte, daß es natürlich genügt, die Vertauschbarkeit mit allen Multiplikationen mit χ_M, $M \subset X_{j(M)}$, vorauszusetzen. Ist (X, μ) gleich $(0, \infty)$ mit dem Lebesgue–Maß, so genügt die Vertauschbarkeit von A mit dem Multiplikationsoperator mit x bzw. dessen Spektralschar.)*

Beweis. Offensichtlich ist jeder beschränkte Multiplikationsoperator mit jedem Operator aus $\mathcal{T}$ vertauschbar. Es bleibt die Umkehrung zu beweisen.

Sei $A \in B(L_2(X, \mathrm{d}\mu))$ mit jedem Operator aus $\mathcal{T}$ vertauschbar. Mit den X_j von oben sei $Y_j := X_{j+1} \backslash X_j$. Damit definieren wir eine strikt positive Funktion

$$h = \sum h_j \chi_{Y_j} \in L_2(X, \mathrm{d}\mu) \qquad (\text{ z.B. mit } \ h_j := \frac{1}{j} \ \mu(Y_j)^{-1/2}) \ .$$

Wir werden zeigen, daß A der Operator der Multiplikation mit der Funktion

$$a(x) \ := \ \frac{1}{h(x)} \ (Ah)(x)$$

ist, wobei $(Ah)(\cdot)$ ein beliebiger, aber im folgenden fest gewählter Repräsentant von $Ah \in L_2(X, \mathrm{d}\mu)$ ist. (Ist $\mu(X) < \infty$, so kann einfach $h(x) = e(x) \equiv 1$ gewählt werden; hieran erkennt man am leichtesten die sehr einfache Idee des Beweises: wenn A ein Multiplikationsoperator ist, so muß Ae die Funktion sein, mit der multipliziert wird.)

Zum Beweis genügt es offenbar zu zeigen:

$$(At)(x) = a(x)t(x) \qquad \text{für alle} \quad t \in \mathcal{E} \quad \text{und} \quad \mu\text{–f.a.} \quad x \in X \, ;$$

durch Grenzübergang folgt die Aussage für alle $t \in L_2(X, \mathrm{d}\mu)$ (und damit natürlich auch $|a(x)| \leq \|A\|$ für μ–f.a. $x \in X$). Sei also $t \in \mathcal{E}$. Dann ist auch $t/h \in \mathcal{E}$ und somit, da A mit dem Multiplikationsoperator $M_{t/h}$ vertauschbar ist,

$$\begin{aligned} (At)(x) &= A\left(\frac{t}{h}h\right)(x) = \frac{t(x)}{h(x)}(Ah)(x) = \frac{1}{h(x)}(Ah)(x)t(x) \\ &= a(x)t(x) \qquad \text{für } \mu\text{–f.a. } x \in X. \end{aligned}$$ □

Für einen Hilbertraum H sei im folgenden $L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$ der Raum der (Äquivalenzklassen von) H–wertigen μ–meßbaren Funktionen f auf X mit $\|f(\cdot)\| \in L_2(X, \mathrm{d}\mu)$. Ein Operator A in $L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$ heißt ***zerlegbar***, wenn es für jedes $x \in X$ einen beschränkten Operator $A(x)$ in H gibt mit

$$(Af)(x) = A(x)f(x) \qquad \text{für alle } f \in D(A) \quad \text{und } \mu\text{–f.a. } x \in X.$$

Man sagt auch, A ist das ***direkte Integral*** der Schar $\{A(\cdot)\} = \{A(x) : x \in X\}$; diese Begriffsbildung werden wir aber im folgenden nicht verwenden. Im Falle von $H = \mathbb{C}$ sind die zerlegbaren Operatoren genau die Multiplikationsoperatoren. Der folgende Satz ist also eine Verallgemeinerung des vorhergehenden.

Satz 3.13 *Sei H ein separabler Hilbertraum. Ein Operator $A \in B(L_2(X, \mathrm{d}\mu; H))$ ist genau dann zerlegbar, wenn er mit jedem Operator aus $\mathcal{T}$ vertauschbar ist. (Die Anmerkung bei Satz 3.12 gilt entsprechend.)*

Beweis. Wieder ist die Richtung „$\Longrightarrow$“ trivial. — Sei also $A \in B(L_2(X, \mathrm{d}\mu; H))$ mit jedem Operator aus $\mathcal{T}$ vertauschbar, $\{e_j : j \in \mathbb{N}\}$ eine Orthonormalbasis von H und h wie im Beweis von Satz 3.12. Mit $h_j(x) := h(x)e_j$ sei

$$a_j(x) := \frac{1}{h(x)}(Ah_j)(x),$$

dabei sei $(Ah_j)(\cdot)$ ein beliebiger, im folgenden fest gewählter Repräsentant von $Ah_j \in L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$. Für jedes $x \in X$ definieren wir die lineare Abbildung

$$A_x : L\{e_j : j \in \mathbb{N}\} \to H, \qquad A_x \sum c_j e_j = \sum c_j a_j(x).$$

Ist $\widetilde{\mathcal{E}}$ die Menge der Funktionen

$$t(\cdot) = \sum_{j=1}^{n} \tau_j(\cdot)e_j \qquad \text{mit} \quad \tau_j \in \mathcal{E},$$

so gilt nach Definition von A_x für alle $t \in \widetilde{\mathcal{E}}$ (wegen $\tau_j/h \in \mathcal{E}$)

$$\begin{aligned}(At)(x) &= \left(A\sum_{j=1}^{n}\tau_j(\cdot)e_j\right)(x) = \sum_{j=1}^{n}\left(A\frac{\tau_j(\cdot)}{h(\cdot)}h_j(\cdot)\right)(x) \\ &= \sum_{j=1}^{n}\frac{\tau_j(x)}{h(x)}(Ah_j)(x) = \sum_{j=1}^{n}\tau_j(x)a_j(x) \\ &= A_x\sum_{j=1}^{n}\tau_j(x)e_j = A_x t(x) \qquad \mu\text{–f. ü..}\end{aligned}$$

Wir zeigen jetzt, daß eine μ–Nullmenge $N \subset X$ existiert mit

$$\|A_x\| \leq \|A\| \qquad \text{für} \quad x \in X\backslash N$$

(daraus folgt dann, daß sich A_x eindeutig zu einem beschränkten Operator $A(x)$ in H mit $\|A(x)\| \leq \|A\|$ fortsetzen läßt). Zunächst zeigen wir, daß für jedes $y = \sum y_j e_j \in L\{e_j\}$ eine μ–Nullmenge $M_y \subset X$ existiert mit

$$\|A_x y\| \leq \|A\|\,\|y\| \qquad \text{für} \quad x \in X\backslash M_y\,.$$

Wäre dies nicht der Fall, so gäbe es (da $x \mapsto \|A_x y\|$ auf Grund der Konstruktion von A_x offenbar meßbar ist) eine μ–meßbare Menge $M'_y \subset X$ mit

$$\|A_x y\| > \|A\|\,\|y\| \qquad \text{für} \quad x \in M'_y\,, \quad 0 < \mu(M'_y)\,.$$

Damit wäre $0 < \mu(M_y) < \infty$ für $M_y = M'_y \cap X_j$ und hinreichend großes j, und für $h_y(\cdot) = \chi_{M_y}(\cdot)\,y \in \widetilde{\mathcal{E}}$ würde gelten

$$\begin{aligned}\|Ah_y\| &= \left\{\int \|(Ah_y)(x)\|^2\,\mathrm{d}\mu(x)\right\}^{1/2} = \left\{\int \|\chi_{M_y}(x)A_x y\|^2\,\mathrm{d}\mu(x)\right\}^{1/2} \\ &= \left\{\int \|h_y(x)\|^2\frac{\|A_x y\|^2}{\|y\|^2}\,\mathrm{d}\mu(x)\right\}^{1/2} > \left\{\int \|h_y(x)\|^2\,\|A\|^2\,\mathrm{d}\mu(x)\right\}^{1/2} \\ &= \|A\|\,\|h_y\|\,,\end{aligned}$$

das ist ein Widerspruch zur Definition der Norm von A.

Also gibt es eine μ–Nullmenge $N \subset X$ so, daß für alle Linearkombinationen $y \in L\{e_j\}$ mit rationalen Koeffizienten (dies ist eine abzählbare Menge, die in H dicht ist) gilt

$$\|A_x y\| \leq \|A\|\,\|y\| \qquad \text{für alle} \quad x \in X\backslash N\,.$$

Durch Grenzübergang in den Koeffizienten folgt dies dann für alle $y \in L\{e_j\}$, d.h. es gilt

$$\|A_x\| \le \|A\| \qquad \text{für alle} \quad x \in X \setminus N\,.$$

Ist $A(x)$, wie schon oben angekündigt, die eindeutig bestimmte Fortsetzung von A_x auf ganz H, so gilt also für alle $t \in \widetilde{\mathcal{E}}$

$$(At)(x) = A_x t(x) = A(x)t(x) \qquad \text{für } \mu\text{–f.a. } x \in X\,.$$

Der Raum $\widetilde{\mathcal{E}}$ ist dicht in $L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$; zu einem beliebigen $f \in L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$ gibt es also eine Folge (t_n) aus $\widetilde{\mathcal{E}}$ mit $t_n \to f$ in $L_2(X, \mathrm{d}\mu; H)$ und (o.E.) $t_n(x) \to f(x)$ und $(At_n)(x) \to (Af)(x)$ μ–f.ü. Damit folgt die Behauptung durch Grenzübergang, da A und alle $A(x)$ für $x \in X \setminus N$ stetig sind. $\square$

Zusammen mit dem Resultat von Satz 3.11 und der Tatsache, daß $\widehat{S}_1$ mit $\widehat{T}_1 = M_{|\cdot|^2}$ vertauschbar ist, folgt, daß $\widehat{S}$ in $L_2(0,\infty, k^{m-1}\,\mathrm{d}k;\, L_2(S^{m-1}))$ zerlegbar ist mit einer Schar unitärer Operatoren $\{\widehat{S}(\cdot)\} = \{\widehat{S}(k) : k \in (0,\infty)\}$; $\widehat{S}(k)$ wird als ***Streumatrix*** bezeichnet. Man schreibt üblicherweise

$$\widehat{S}(k) \;=\; I + R(k)\,.$$

Der folgende Satz erlaubt keinen strengen Beweis im Rahmen der Hilbertraumtheorie, da auch schon die Definition des (differentiellen) Streuquerschnitts (vgl. 1) nicht in diesem Rahmen möglich war.

Satz 3.14 *Ist $R(k)$ ein Integraloperator mit Kern $r(\omega,\omega_0;k)$, so ist*

$$\sigma(k,\omega_0,\omega) = (2\pi)^m |r(\omega,\omega_0;k)|^2$$

der diffferentielle Streuquerschnitt zur Einfallsrichtung ω_0 und Ausfallsrichtung ω. Der totale Streuquerschnitt zur Einfallsrichtung ω_0 ist

$$\sigma_{tot}(k,\omega_0) = (2\pi)^m \int\limits_{S^{m-1}} |r(\omega,\omega_0;k)|^2\,\mathrm{d}\omega\,.$$

Beweis. Ein „homogener Teilchenstrom“ in Richtung ω_0 (d.h. mit Einfallsrichtung ω_0) und Impuls k (d.h. Geschwindigkeit $2k$) wird nicht durch ein Hilbertraumelement beschrieben; die

Zustandsfunktion kann nicht in $L_2(\mathbb{R}^m)$ liegen, da ihr Betrag im ganzen $\mathbb{R}^m$ konstant und $\neq 0$ sein muß. In der Physik beschreibt man einen solchen „Zustand“ durch eine ebene Welle

$$e^{i(x-2tk\omega_0)k\omega_0}, \qquad \text{bzw. für } t=0 \qquad e^{ixk\omega_0}\,.$$

Diese Funktion läßt sich auffassen als inverse Fouriertransformierte der ***Distribution***

$$(2\pi)^{m/2}e^{-2itk^2}\delta_{k\omega_0} = (2\pi)^{m/2}e^{-2it|k\omega_0|^2}\delta_{k\omega_0}, \qquad \text{bzw. für } t=0 \qquad (2\pi)^{m/2}\delta_{k\omega_0}\,.$$

Hierauf ist natürlich der bisher entwickelte Apparat nicht anwendbar (und im Prinzip ist das auch nicht nötig, da ein homogener Teilchenstrom nur als Idealisierung zu verstehen ist), aber man kann versuchen, diese Elemente als „Grenzwerte“ von L_2–Elementen zu betrachten und hoffen, daß die Operatoren $R(k)$ sich in geeigneter Weise fortsetzen lassen zu „$\widetilde{R}(k)$“. So ist ziemlich klar, daß man für einen hinreichend regulären Kern $r(\omega,\omega_0;k)$ von $R(k)$ erhält

$$\widetilde{R}(k)(2\pi)^{m/2}\delta_{k\omega_0}(\omega) = (2\pi)^{m/2}r(\omega,\omega_0;k)\,.$$

Der Anteil des Teilchenstroms, der nach der Streuung einen Impuls in Richtung von $\Omega\subset S^{m-1}$ hat, ist also gegeben durch

$$(2\pi)^m\int\limits_\Omega |r(\omega,\omega_0;k)|^2\,\mathrm{d}\omega\,.$$

Unter Beachtung des folgenden Satzes ist das die Behauptung, sowohl für den differentiellen wie auch für den totalen Streuquerschnitt. □

Der folgende Satz zeigt relativ präzise, wie die Ausbreitung einer Welle $e^{-it(-\Delta)}f(\cdot)$ in Abhängigkeit vom Träger von Ff vor sich geht. Die Beweise beruhen darauf, $e^{-it(-\Delta)}f(x)$ (bzw. $x^\beta D^\alpha e^{-it(-\Delta)}f(x)$) in der Form $\int e^{i\omega(x,t,y)}f(y)\,\mathrm{d}y$ zu schreiben. Für Punkte x, für die $\omega(x,t,y)$ bei großen $|t|$ als Funktion von y schnell variiert (d. h. die Phase von $e^{i\omega(x,t,y)}$ wesentlich ***nicht–stationär*** ist), löschen sich für große $|t|$ die Beiträge im Integral im wesentlichen aus. Das Integral ist also für große $|t|$ im Punkt x nur dann wesentlich von 0 verschieden, wenn $\omega(x,t,y)$ als Funktion von y wenig variiert, d. h. die Phase von $e^{i\omega(x,t,y)}$ im wesentlichen ***stationär*** ist. Diese Beweismethode wird deshalb als ***Methode der stationären Phase*** bezeichnet.

Satz 3.15 a) *Zu* $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$, $\delta>0$, $n\in\mathbb{N}$ *und* $\alpha,\beta\in\mathbb{N}_0^m$ *existiert ein* $C=C(f,\delta,n,\alpha,\beta)$ *so, daß gilt*

$$|x^\beta D^\alpha e^{-it(-\Delta)}f(x)| \;\leq\; C(1+|t|)^{-n}$$

für alle

$$x \in Q_t := \mathbb{R}^m \backslash \left\{ x \in \mathbb{R}^m : \left| \frac{x_j}{t} - 2y_j \right| \le \delta \quad \forall y \in \operatorname{supp} Ff,\, \forall_j \right\}.$$

b) *Ist* $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m),\ Ff \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m),\ G \subset \mathbb{R}^m$ *offen mit* $\operatorname{supp} Ff \subset G$, *so gibt es zu jedem* $n \in \mathbb{N}$ *und* $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^m$ *ein* $C = C(f, n, \alpha, \beta)$ *mit*

$$|x^\beta D^\alpha e^{-it(-\Delta)} f(x)| \ \le\ C(1 + |t|)^{-n} \quad \textit{für} \quad x \in Q_t := \mathbb{R}^m \backslash 2tG\,.$$

c) *Ist* $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m),\ Ff \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ *und* $Ff(y) = 0$ *für* $|y| < a$, *so gibt es zu jedem* $\delta > 0,\ n \in \mathbb{N}$ *und* $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^m$ *ein* $C = C(f, \delta, n, \alpha, \beta)$ *mit*

$$|x^\beta D^\alpha e^{-it(-\Delta)} f(x)| \ \le\ C(1 + |t|)^{-n} \quad \textit{für} \quad x \in Q_t := \{x \in \mathbb{R}^m : |x| < 2t(a - \delta)\}\,.$$

d) *In allen drei Fällen existiert für beliebige* $\sigma, \tau \in \mathbb{N}_0^m$ *und* $p > 0$ *ein* $D = D(f, \delta, p, \sigma, \tau)$ *bzw.* $D(f, p, \sigma, \tau)$ *mit*

$$\int_{Q_t} \left| x^\sigma D^\tau e^{-it(-\Delta)} f(x) \right|^2 \mathrm{d}x \ \le\ D(1 + |t|)^{-p}\,,$$

wobei Q_t *die in der jeweiligen Aussage a), b) bzw. c) definierte Menge ist.*

Beweis. a) Man rechnet zunächst für $\beta = 0$ leicht nach:

$$\begin{aligned}
D^\alpha e^{-it(-\Delta)} f(x) \ &=\ (2\pi)^{-m/2} \int e^{ixy - ity^2} y^\alpha Ff(y)\,\mathrm{d}y \\
&=\ (2\pi)^{-m/2} \int i(x_j - 2ty_j) e^{ixy - ity^2} \frac{y^\alpha Ff(y)}{i(x_j - 2ty_j)}\,\mathrm{d}y \\
&\qquad \text{(partielle Integration bezüglich } y_j\text{)} \\
&=\ i(2\pi)^{-m/2} \int e^{ixy - ity^2} \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\frac{y^\alpha Ff(y)}{x_j - 2ty_j} \right) \mathrm{d}y \\
&\ \ \vdots \\
&=\ (i)^n (2\pi)^{-m/2} \int e^{ixy - ity^2} \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\frac{1}{x_j - 2ty_j} \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\cdots \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\frac{y^\alpha Ff(y)}{x_j - 2ty_j} \right) \cdots \right) \right) \mathrm{d}y \\
&=\ \int e^{ixy - ity^2} \sum_{k=0}^{n} \frac{t^k}{(x_j - 2ty_j)^{n+k}} \varphi_k(y)\,\mathrm{d}y
\end{aligned}$$

mit $\varphi_k \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$, die nur von der Wahl des j abhängen, jedoch nicht unmittelbar von x.
Für $x \in Q_t$ gibt es ein $j \in \{1, \ldots, m\}$ mit

$$|x_j - 2ty_j| = |t| \left| \frac{x_j}{t} - 2y_j \right| > \delta |t|\,;$$

damit folgt die Behauptung für $|t| > 1$. Für $|t| < 1$ folgt sie offenbar bereits aus der ersten Zeile der obigen Rechnung.

Für den Fall $\beta \neq 0$ erhält man

$$\begin{aligned} x^\beta D^\alpha e^{it(-\Delta)} f(x) &= (-1)^{|\beta|}(2\pi)^{-m/2} \int e^{ixy} D^\beta \{e^{-ity^2} y^\alpha Ff(y)\}\, \mathrm{d}y \\ &= \sum_{\ell=0}^{|\beta|} t^\ell \int e^{ixy-ity^2} \varphi_\ell(y)\, \mathrm{d}y \end{aligned}$$

mit $\varphi_\ell \in \mathcal{S}(\mathrm{I\!R}^m)$ und $\operatorname{supp} \varphi_\ell \subset \operatorname{supp} Ff$. Anwendung des obigen Verfahrens auf jedes dieser Integrale (mit $n+\ell$ statt n) liefert die Behauptung im allgemeinen Fall.

b) Sei

$$\delta := \frac{1}{m} d(\operatorname{supp} Ff, \mathrm{I\!R}^m \backslash G)\,,$$

$\{\psi_k : k = 1, \ldots, N\} \subset C_0^\infty(\mathrm{I\!R}^m)$ eine Zerlegung der Eins auf $\operatorname{supp} Ff$ so, daß die Durchmesser der $\operatorname{supp} \psi_k$ höchstens $\delta/2$ sind, $\varphi_k := \psi_k Ff$.

Sei nun $z \in \mathrm{I\!R}^m \backslash G$. Wegen

$$d(z, \operatorname{supp} \varphi_k) \geq m\delta \qquad \text{für} \quad k \in \{1, \ldots, N\}$$

gibt es für jedes k ein $y^{(k)} \in \operatorname{supp} \varphi_k$ (dies kann sogar beliebig gewählt werden) und ein $j = j(k, z) \in \{1, \ldots, m\}$ mit

$$|z_j - y_j^{(k)}| \geq \delta\,.$$

Wegen

$$\text{Durchmesser } (\operatorname{supp} \varphi_k) \leq \frac{\delta}{2}$$

gilt dann sogar

$$|z_j - y_j| \geq \frac{\delta}{2} \quad \text{für alle} \quad y \in \operatorname{supp} \varphi_k\,.$$

Damit folgt die Behauptung für $f_k := F^{-1}(\psi_k Ff)$ (statt f) und $\frac{x}{t} \in \mathrm{I\!R}^m \backslash 2G$ mit Hilfe von Teil a), denn es ist dann $z := \frac{1}{2}\frac{x}{t} \in \mathrm{I\!R}^m \backslash G$ und somit mit $j = j(k, z)$

$$\left|\frac{x_j}{t} - 2y_j\right| = |2z_j - 2y_j| = 2|z_j - y_j| > \delta \quad \text{für} \quad y \in \operatorname{supp} \varphi_k\,.$$

c) Wähle $G = \{x \in \mathbb{R}^m : |x| > a - \delta\}$. Für $|x| < 2t(a-\delta)$ gilt dann offensichtlich $x \notin 2tG$. Somit folgt die Behauptung aus Teil b).

d) Ergibt sich durch Integration von $|x^\sigma D^\tau e^{-it(-\Delta)} f|^2$ über das jeweilige Gebiet, wobei α, β und n geeignet zu wählen sind. $\square$

Dieser Satz hat eine wichtige physikalische Interpretation: Die im Zustand f vertretenen Impulse sind gerade die $y \in \operatorname{supp} Ff$; da unsere Normierung mit $m = \frac{1}{2}$ übereinstimmt, bedeutet dies Geschwindigkeiten $v \in 2\operatorname{supp} Ff$. Wenn man davon ausgeht, daß das Teilchen sich zur Zeit $t = 0$ „in der Nähe des Nullpunktes“ aufhält, was für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ in gewissem Sinne gilt, so besagt der Satz, daß sich das Teilchen für große $|t|$ nur mit sehr geringer Wahrscheinlichkeit in den „klassisch verbotenen“ (oder „klassisch unerreichbaren“) Regionen aufhält.

4 Existenz der Wellenoperatoren

4.1 Das Cooksche Lemma

Das Cooksche Lemma (J. M. Cook: Convergence to the Møller wave–matrix, J. Math. Phys. **36**, 82–87 (1957)) beruht auf der folgenden einfachen Beobachtung.

Hilfssatz 4.1 *Sei* H *ein Hilbert– (oder Banach–) Raum,* $\varphi : \mathbb{R} \to H$ *stetig differenzierbar in* (t_+, ∞) *bzw.* $(-\infty, t_-)$ *für geeignete* t_+ *und* t_- *,*

$$\|\varphi'(\cdot)\| \in L_1(t_+, \infty) \quad \textit{bzw.} \quad L_1(-\infty, t_-)\,.$$

Dann existiert

$$\lim_{t\to\infty} \varphi(t) \quad \textit{bzw.} \quad \lim_{t\to-\infty} \varphi(t)\,.$$

Beweis. (Es ist nützlich, sich den Satz zunächst für $H = \mathbb{C}$ klarzumachen.) Da H vollständig ist, genügt es zu zeigen, daß zu jedem $\varepsilon > 0$ ein t_0 existiert mit

$$\|\varphi(s) - \varphi(t)\| < \varepsilon \quad \text{für} \quad s, t \in \mathbb{R} \quad \text{mit} \quad s, t > t_0 \quad \text{bzw.} \quad s, t < t_0\,.$$

Aus der Voraussetzung folgt (dabei sei o. E. $t_+ \le t \le s$ bzw. $t \le s \le t_-$)

$$\|\varphi(s) - \varphi(t)\| \le \int_t^s \|\varphi'(\tau)\| \,\mathrm{d}\tau\,.$$

Dies erhält man z.B. mit folgender Überlegung: Für jedes $x \in H$ (im Falle eines Banachraumes für jedes $x \in H'$) ist die komplexwertige Funktion

$$\varphi_x : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \quad t \mapsto \langle x, \varphi(t)\rangle \ \text{ stetig differenzierbar in } (t_+, \infty) \text{ bzw. } (-\infty, t_-)\,,$$

und somit

$$\begin{aligned} |\langle x, \varphi(s) - \varphi(t)\rangle| &= |\varphi_x(s) - \varphi_x(t)| \le \left| \int_t^s \varphi_x'(\tau) \,\mathrm{d}\tau \right| \\ &= \left| \int_t^s \langle x, \varphi'(\tau)\rangle \,\mathrm{d}\tau \right| \le \int_t^s \|x\|\, \|\varphi'(\tau)\| \,\mathrm{d}\tau \\ &= \|x\| \int_t^s \|\varphi'(\tau)\| \,\mathrm{d}\tau\,. \end{aligned}$$

Wegen $\|\varphi'(\cdot)\| \in L_1(t_+,\infty)$ bzw. $L_1(-\infty,t_-)$ folgt hieraus für geeignetes $t_0 \geq t_+$ bzw. $t_0 \leq t_-$

$$\|\varphi(s)-\varphi(t)\| < \varepsilon \quad \text{für} \quad s,t > t_0 \quad \text{bzw.} \quad s,t < t_0 \ . \qquad \square$$

Satz 4.2 (Cooksches Lemma) *Seien T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum H.*

a) *Ist*

$$\left.\begin{aligned} &e^{-itT_1}x \in D(T_1)\cap D(T_2) \\ &t \mapsto (T_2-T_1)e^{-itT_1}x \quad \textit{stetig} \end{aligned}\right\} \textit{für } t > t_+ \ \textit{bzw.} \ t < t_- \ ,$$

$$t \mapsto \|(T_2-T_1)e^{-itT_1}x\| \ \textit{in} \ L_1(t_+,\infty) \ \textit{bzw.} \ L_1(-\infty,t_-) \ ,$$

so gilt $x \in D(\Omega_+(T_2,T_1))$ bzw. $x \in D(\Omega_-(T_2,T_1))$. [2]

b) *Sei M ein abgeschlossener Teilraum von H (der T_1 reduziert), P die orthogonale Projektion auf M und D total in M (d.h. die lineare Hülle von D ist dicht in M) so, daß für jedes $x \in D$ die Voraussetzungen von Teil a) gelten. Dann existiert der Wellenoperator $W_+(T_2,T_1,P)$ bzw. $W_-(T_2,T_1,P)$.*

Beweis. a) Nach Lemma 4.1 genügt es zu zeigen, daß

$$\varphi : \mathbb{R} \to H \ , \quad t \mapsto e^{itT_2}e^{-itT_1}x$$

für $t > t_+$ bzw. $t < t_-$ stetig differenzierbar ist und $\|\varphi'(\cdot)\|$ in $L_1(t_+,\infty)$ bzw. $L_1(-\infty,t_-)$ liegt.

Wegen $e^{itT_1}x \in D(T_1)\cap D(T_2)$ ist φ tatsächlich differenzierbar, denn es gilt für $t > t_+$ bzw. $t < t_-$ und $h \to 0$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{h}\left(e^{i(t+h)T_2}e^{-i(t+h)T_1}x - e^{itT_2}e^{-itT_1}x\right) \\ &\quad = e^{i(t+h)T_2}\,\frac{1}{h}\left(e^{-i(t+h)T_1}-e^{-itT_1}\right)x + \frac{1}{h}\left(e^{i(t+h)T_2}-e^{itT_2}\right)e^{-itT_1}x \\ &\quad \to e^{itT_2}(-iT_1)e^{-itT_1}x - e^{itT_2}(iT_2)e^{-itT_1}x \\ &\quad = ie^{itT_2}(T_2-T_1)e^{-itT_1}x \ . \end{aligned}$$

Da nach Voraussetzung $t \mapsto (T_2-T_1)e^{-itT_1}x$ stetig ist, ist dann auch φ' stetig. Wegen $\|\varphi'(t)\| = \|(T_2-T_1)e^{-itT_1}x\|$ liegt $\|\varphi'(\cdot)\|$ in $L_1(t_+,\infty)$ bzw. in $L_1(-\infty,t_-)$.

b) Dies folgt unmittelbar aus Teil a), da die Definitionsbereiche $D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ abgeschlossene Teilräume sind.

$\square$

[2] Ist T_2 relativ beschränkt bezüglich T_1 (d.h. $D(T_2) \supset D(T_1)$), so ist $t \mapsto (T_2-T_1)e^{-itT_1}x = e^{-itT_1}(T_2-T_1)x$ offenbar stetig für alle $x \in D(T_1)$.

4.2 Existenz von $\mathbf{W_\pm(T_2, T_1)}$ für Differentialoperatoren $\mathbf{T_1}$

Für den Fall, daß T_1 ein Differentialoperator in $L_2(\mathbb{R}^m)$ mit konstanten Koeffizienten (tatsächlich sogar aus einer wesentlich größeren Klasse von Operatoren) ist, beweisen wir in diesem Abschnitt ein sehr allgemeines Resultat über die Existenz der Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1) = W_\pm(T_2, T_1, I)$. Die Vollständigkeit der Wellenoperatoren ist unter so allgemeinen Voraussetzungen nicht zu erwarten, vgl. hierzu Abschnitt 4.3. Es mag zunächst überraschen, daß hier $P = I$ gewählt werden kann; das erklärt sich (zumindest teilweise) dadurch, daß die betrachteten Operatoren T_1 rein absolut stetiges Spektrum haben, d.h. es gilt $H_{ac}(T_1) = L_2(\mathbb{R}^m)$, vgl. hierzu Satz 4.9.

Satz 4.3 *Sei T_1 in $L_2(\mathbb{R}^m)$ erklärt durch*

$$T_1 = F^{-1} M_h F \qquad \textit{mit reellwertigem } h \in C^\infty(\mathbb{R}^m)\,,$$

und es existiere ein $e \in \mathbb{R}^m$ mit $\|e\| = 1$ und eine abgeschlossene Nullmenge $A \subset \mathbb{R}^m$ mit

$$\Big(\operatorname{grad} h(x), e\Big) \neq 0 \qquad \textit{für alle} \quad x \in \mathbb{R}^m \setminus A\,.$$

Der Operator V sei auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ definiert und symmetrisch, und es existieren $C > 0$, $p \in \mathbb{N}_0$, und $\varepsilon > 0$ so, daß für jedes $r \geq 0$ gilt

$$\|Vf\| \leq C(1+r)^{-1-\varepsilon} \sum_{|\alpha| \leq p} \|D^\alpha f\| \qquad \textit{für alle } f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m) \textit{ mit } f(x) = 0 \textit{ in } \{x \in \mathbb{R}^m : |(x,e)| < r\}\,.$$

T_2 sei eine selbstadjungierte Fortsetzung von $T_1 + V$. Dann existieren $W_\pm(T_2, T_1)$.

Korollar 4.4 *Sei $T_1 = -\Delta$ (im Sinne von Satz 4.3 ist also $h(x) = |x|^2$) und V ein symmetrischer Differentialoperator $\sum c_\alpha(x) D^\alpha$ beliebiger Ordnung mit*

$$|c_\alpha(x)| \leq C\Big(1 + |(x,e)|\Big)^{-1-\varepsilon} \qquad \textit{für alle} \quad x \in \mathbb{R}^m$$

mit einem beliebigen $e \in \mathbb{R}^m$, $\|e\| = 1$. Ist T_2 eine beliebige selbstadjungierte Fortsetzung von $T_1 + V$, so existieren $W_\pm(T_2, T_1)$. (Man vergleiche hierzu auch Korollar 4.6. Mit wenig Mehraufwand sieht man, daß es genügt, wenn die $c_\alpha(\cdot)$ diese Bedingung nur im Sinne geeigneter L_2–Mittel erfüllen; vgl. hierzu die Bedingungen an V in Satz 4.8.)

Beweis. Offensichtlich sind die Voraussetzungen von Satz 4.3 mit diesem e erfüllt. □

Vorbemerkung zum Beweis von Satz 4.3 O. E. können wir natürlich annehmen, daß $e = e_1 = (1, 0, \dots, 0)$ ist. Dies macht die Formulierung und den Beweis des Satzes wesentlich einfacher. — Hinter dem Beweis steckt die physikalische Vorstellung, daß das Teilchen mit einer Mindestgeschwindigkeit in einer Richtung, die nicht orthogonal zu e ist, ins Unendliche läuft. Dort wo sich das Teilchen zur Zeit t aufhält, ist also V „kleiner als" $|t|^{-1-\varepsilon}$; es sollte also das Cooksche Lemma anwendbar sein. Tatsächlich ist die Sache nicht ganz so einfach, da das Teilchen sich nicht an diese „klassisch mechanische" Vorstellung hält.

Hilfssatz 4.5 *Sei* h *wie in Satz 4.3 mit* $e = e_1$, $Fg \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m \setminus A)$. *Dann existieren für jedes* $k \in \mathbb{N}_0$ *Funktionen* $g_1, \dots, g_k \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m \setminus A)$ *mit*

$$\left(e^{-itT_1} g\right)(x) = (it)^{-k} \sum_{j=0}^{k} x_1^j F^{-1}\left(e^{-ith(\cdot)} g_j\right)(x) \qquad \text{für} \quad t \neq 0\,.$$

Beweis. Für $y \in \operatorname{supp} Fg$ ist nach Voraussetzung

$$h'(y) := \frac{\partial}{\partial y_1} h(y) \neq 0\,.$$

Deshalb ist die folgende Umformung zulässig (vgl. Beweis von Satz 3.15):

$$\begin{aligned}
\left(e^{-itT_1} g\right)(x) &= (2\pi)^{-m/2} \int e^{ixy} e^{-ith(y)} Fg(y)\,\mathrm{d}y \\
&= (2\pi)^{-m/2} \int \underbrace{e^{-ith(y)} h'(y)}_{= -\frac{1}{it}\frac{\partial}{\partial y_1} e^{-ith(y)}} \frac{e^{ixy} Fg(y)}{h'(y)}\,\mathrm{d}y \\
&\qquad \text{(mit partieller Integration bezüglich } y_1\text{)} \\
&= (2\pi)^{-m/2} (it)^{-1} \int e^{-ith(y)} \frac{\partial}{\partial y_1} \left[\frac{e^{ixy} Fg(y)}{h'(y)}\right] \mathrm{d}y \\
&\qquad \text{(und mit } (k-1)\text{–facher Wiederholung dieses Schrittes)} \\
&= (2\pi)^{-m/2} (it)^{-k} \int e^{-ith(y)} \frac{\partial}{\partial y_1} \left[\frac{1}{h'(y)} \frac{\partial}{\partial y_1} \left[\cdots \frac{\partial}{\partial y_1} \left[\frac{e^{ixy} Fg(y)}{h'(y)}\right] \cdots\right]\right] \mathrm{d}y\,.
\end{aligned}$$

Hieraus folgt die Behauptung durch Ausdifferenzieren und Zusammenfassen der Terme mit gleichen x_1–Potenzen. □

Beweis von Satz 4.3 Da $C_0^\infty(\mathbb{R}^m\setminus A)\subset\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$ dicht ist und da $D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ abgeschlossen sind, genügt es,

$$F^{-1}C_0^\infty(\mathbb{R}^m\setminus A)\subset D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$$

zu beweisen, d. h. für $f\in L_2(\mathbb{R}^m)$ mit $Ff\in C_0^\infty(\mathbb{R}^m\setminus A)$ sind die Voraussetzungen von Satz 4.2 a zu beweisen.

Wegen $Ff\in C_0^\infty(\mathbb{R}^m\setminus A)\subset C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ ist für jedes $t\in\mathbb{R}$ auch

$$e^{-itT_1}f=F^{-1}e^{-ith(\cdot)}Ff\in F^{-1}C_0^\infty(\mathbb{R}^m\setminus A)\subset D(T_1)\cap D(T_2)\,,$$

da $e^{-ith(\cdot)}Ff\in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)\subset D(M_h)=FD(T_1)$ und $e^{-itT_1}f\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)\subset D(V)$ gilt.

Aus der Voraussetzung an V für $r=0$ folgt

$$\begin{aligned}
\left\|V\Big(e^{-isT_1}-e^{-itT_1}\Big)f\right\| &\le C\sum_{|\alpha|\le p}\left\|D^\alpha\Big(e^{-isT_1}-e^{-itT_1}\Big)f\right\|\\
&\qquad\text{(da } D^\alpha \text{ mit } T_1,\text{ also auch mit } e^{-itT_1}\text{, vertauscht)}\\
&= C\sum_{|\alpha|\le p}\left\|\Big(e^{-isT_1}-e^{-itT_1}\Big)D^\alpha f\right\|\\
&= C\sum_{|\alpha|\le p}\left\{\int\left|e^{-ish(x)}-e^{-ith(x)}\right|^2|x^\alpha Ff(x)|^2\,\mathrm{d}x\right\}^{1/2}\\
&\to 0 \qquad\text{für}\quad s\to t\qquad\text{(Satz von Lebesgue)}\,.
\end{aligned}$$

Also ist $t\mapsto Ve^{-itT_1}f$ stetig auf ganz $\mathbb{R}$.

Zum Beweis der dritten Voraussetzung wählen wir ein

$$\varphi\in C^\infty(\mathbb{R})\qquad\text{mit}\quad 0\le\varphi(s)\le 1\quad\text{und}\quad \varphi(s)=\begin{cases}1 & \text{für } s\le 0\,,\\ 0 & \text{für } s\ge 1\,.\end{cases}$$

Mit $\mu>0$ (das wir erst später genauer festlegen) sei

$$\varphi_t(x):=\varphi(|x_1|-|t|^\mu)\qquad\text{für}\quad x\in\mathbb{R}^m\,,$$

also

$$\varphi_t(x)=\begin{cases}0 & \text{für } |x_1|\ge|t|^\mu+1\,,\\ 1 & \text{für } |x_1|\le|t|^\mu\,.\end{cases}$$

Damit folgt, zunächst wieder mit der Voraussetzung an V für $r = 0$,

$$
\begin{aligned}
\|V\varphi_t e^{-itT_1} f\| &\leq C \sum_{|\alpha|\leq p} \left\{ \int\limits_{|x_1|\leq|t|^\mu+1} \left|D^\alpha \varphi_t(x) e^{-itT_1} f(x)\right|^2 \,\mathrm{d}x \right\}^{1/2} \\
&\leq C_1 \max_{|\alpha|\leq p} \left\{ \int\limits_{|x_1|\leq|t|^\mu+1} \left|D^\alpha e^{-itT_1} f(x)\right|^2 \,\mathrm{d}x \right\}^{1/2} \\
&= C_1 \max_{|\alpha|\leq p} \left\{ \int\limits_{|x_1|\leq|t|^\mu+1} \left|e^{-itT_1} D^\alpha f(x)\right|^2 \,\mathrm{d}x \right\}^{1/2} \\
&= C_1 \max_{|\alpha|\leq p} \left\{ \int\limits_{|x_1|\leq|t|^\mu+1} \left|(2\pi)^{-m/2} \int e^{ixy} e^{-ith(y)} \underbrace{y^\alpha Ff(y)}_{=:g_\alpha(y)} \,\mathrm{d}y\right|^2 \,\mathrm{d}x \right\}^{1/2} .
\end{aligned}
$$

Wegen $g_\alpha \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m \setminus A)$ gilt für den Term zwischen den Betragsstrichen nach Hilfssatz 4.5 für jedes $k \in \mathbb{N}_0$

$$
\ldots = \left(e^{-itT_1} F^{-1} g_\alpha\right)(x) = (it)^{-k} \sum_{j=0}^{k} x_1^j F^{-1}\left(e^{-ith(\cdot)} g_{\alpha,j}\right)(x) .
$$

Somit läßt sich jeder Term des Maximums abschätzen durch

$$
\begin{aligned}
&\left\|(it)^{-k} \sum_{j=0}^{k} x_1^j F^{-1}\left(e^{-ith(\cdot)} g_{\alpha,j}\right)\right\|_{L_2(|x_1|\leq|t|^\mu+1)} \\
&\quad\leq |t|^{-k}(1+|t|^\mu)^k C_{2,\alpha} \qquad \text{mit} \quad C_{2,\alpha} = \sum_{j=0}^{k} \|g_{\alpha,j}\| \\
&\quad\leq C_3 |t|^{k(\mu-1)} \qquad \text{für} \quad |t| \geq 1 .
\end{aligned}
$$

Es gilt also für den gesamten Ausdruck

$$
\|V\varphi_t e^{-itT_1} f\| \leq C_4 |t|^{k(\mu-1)} \qquad \text{für} \quad |t| \geq 1 .
$$

Um den verbleibenden Term abzuschätzen, benutzen wir die Voraussetzung an V mit $r = |t|^\mu$ und erhalten analog für $|t| \geq 1$

$$
\left\|V(1-\varphi_t)e^{-itT_1} f\right\| \quad\leq\quad C(1+|t|^\mu)^{-1-\varepsilon} \sum_{|\alpha|\leq p} \left\|D^\alpha (1-\varphi_t) e^{-itT_1} f\right\|
$$

$$\begin{aligned} &\le C_5(1+|t|^{\mu})^{-1-\varepsilon} \max_{|\alpha|\le p} \left\| e^{-itT_1} D^\alpha f \right\| \\ &\le C_6 |t|^{-\mu(1+\varepsilon)} \max_{|\alpha|\le p} \|D^\alpha f\| \\ &= C_7 |t|^{-\mu(1+\varepsilon)}\,. \end{aligned}$$

Wählt man $\mu \in \left(\frac{1}{1+\varepsilon}, 1\right)$, so ist jedenfalls $\mu(1+\varepsilon) > 1$. Wählt man weiter $k \in \mathbb{N}_0$ so, daß $k(\mu-1) < -1$ ist, so ist also

$$t \mapsto \|Ve^{-itT_1}f\| \le \|V\varphi_t e^{-itT_1} f\| + \|V(1-\varphi_t)e^{-itT_1}f\|$$

über ganz $\mathbb{R}$ integrierbar. Damit ist der Satz bewiesen. □

Korollar 4.6 *Ist* $V = \sum_{j=1}^k V_j$ *und gelten die Voraussetzungen von Satz 4.3 für jedes* V_j *mit einem geeigneten* e_j *, so existieren* $W_\pm(T_2,T_1)$ *. (Dieses Resultat ist z.B. anwendbar auf die Streuung von* N*-Teilchen–Systemen: Dabei ist* $T_1 = -\Delta$ *in* $\mathbb{R}^{3N}$ *und* V *die Summe der Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Teilchen und zwischen den Teilchen und dem äußeren Feld, wobei vorauszusetzen ist, daß die einzelnen Potentiale hinreichend schnell fallen, d. h. schneller als das Coulombpotential.)*

Zum ***Beweis*** behandelt man jedes V_j nach dem Muster des obigen Beweises.

Beispiel 4.7 Wie wichtig die Richtungsabhängigkeit des Abfalls von V sein kann, zeigt das folgende Beispiel in $L^2(\mathbb{R}^2)$: Im Sinne von Satz 4.3 sei $h(x) = h_0(x_2)$ mit $h_0'(s) \neq 0$ für f.a. $s \in \mathbb{R}$; dann erfüllt h die Voraussetzung von Satz 4.3 für alle $e \neq e_1$. Sei nun V der Operator der Multiplikation mit $v(x_1)$, wobei z.B. $v \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ sein soll; in Richtung e_1 fällt also V beliebig schnell. Für $f(x) = f_1(x_1)f_2(x_2)$ mit $f_1 v \not\equiv 0$ gilt dann, da T_1 und V offenbar vertauschbar sind

$$\begin{aligned} e^{itT_2}e^{-itT_1}f(x) &= e^{it(T_1+V)}e^{-itT_1}f(x) = e^{itV}e^{itT_1}e^{-itT_1}f(x) \\ &= e^{itv(x_1)}f_1(x_1)f_2(x_2)\,. \end{aligned}$$

Konvergenz für $t \to \pm\infty$ ist also wegen $f_1 v \not\equiv 0$ unmöglich. #

Der folgende Satz ist eine Variante von Satz 4.3 und eine Verallgemeinerung von Korollar 4.4.

Satz 4.8 a) *Sei* $T_1 = F^{-1}M_hF$ *mit reellwertigem* $h \in C^\infty(\mathbb{R}^m)$ *und*

$$\operatorname{grad} h(x) \neq 0 \qquad \textit{für f.a.} \quad x \in \mathbb{R}^m\,.$$

V sei auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ definiert und symmetrisch, und es existieren $p \in \mathbb{N}_0$, $C \geq 0$, $\varepsilon > 0$ so, daß für jedes $r \geq 0$ gilt

$$\|Vf\| \leq C(1+r)^{-1-\varepsilon} \sum_{|\alpha| \leq p} \|D^\alpha f\| \qquad \text{für alle } f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$$

$$\text{mit } f(x) = 0 \text{ für } |x| < r\,.$$

T_2 sei eine selbstadjungierte Fortsetzung von $T_1 + V$. Dann existieren $W_\pm(T_2, T_1)$.

b) *Ist $T_1 = F^{-1} M_P F$ mit einem nicht–konstanten Polynom P und erfüllen V und T_2 die Voraussetzungen von Teil a), so existieren $W_\pm(T_2, T_1)$.*

Beweis. a) Die Mengen

$$G_j := \{x \in \mathbb{R}^m : (\operatorname{grad} h(x), e_j) \neq 0\} \qquad (j = 1, \ldots, m)$$

bilden eine endliche offene Überdeckung von

$$G := \mathbb{R}^m \setminus \{x \in \mathbb{R}^m : \operatorname{grad} h(x) = 0\} = \{x \in \mathbb{R}^m : \operatorname{grad} h(x) \neq 0\}\,.$$

Da $F^{-1} C_0^\infty(G)$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$ dicht ist, genügt es zu zeigen, daß jedes $f \in F^{-1} C_0^\infty(G)$ in $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$ liegt. Mit Hilfe einer Zerlegung der Eins auf $\operatorname{supp} Ff$ bezüglich der Überdeckung $\{G_j\}$ läßt sich Ff zerlegen in

$$Ff = \widehat{f}_1 + \cdots + \widehat{f}_m \qquad \text{mit} \qquad \widehat{f}_j \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m) \qquad \text{und} \qquad \operatorname{supp} \widehat{f}_j \subset G_j\,.$$

Für jedes $\widehat{f}_j$ läßt sich nun der Beweis von Satz 4.3 mit $e = e_j$ und $\widehat{f}_j$ statt Ff analog durchführen. (Man beachte, daß V die Voraussetzung von Satz 4.3 mit jedem e erfüllt). Also liegen alle $F^{-1}\widehat{f}_j$, und somit auch f, in $D(\Omega_\pm(T_2, T_1))$.

b) Die Nullstellenmenge von

$$\operatorname{grad} P(\cdot) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} P(\cdot), \ldots, \frac{\partial}{\partial x_m} P(\cdot)\right)$$

ist eine abgeschlossene Nullmenge; sie ist der Durchschnitt der Nullstellenmengen der Polynome $\dfrac{\partial}{\partial x_j} P$, wovon mindestens eines $\neq 0$ ist. □

Abschließend wollen wir noch zeigen, daß T_1 in allen in diesem Abschnitt betrachteten Fällen ein rein absolut stetiges Spektrum hat, d. h. $H_{ac}(T_1) = L_2(\mathbb{R}^m)$.

Satz 4.9 *Ist* $h \in C^\infty(\mathbb{R}^m)$ *reellwertig mit* $\operatorname{grad} h(x) \neq 0$ *für f.a.* $x \in \mathbb{R}^m$*, so hat* M_h *(und damit auch* $F^{-1} M_h F$*) rein absolut stetiges Spektrum. Insbesondere hat also jeder nicht–triviale Differentialoperator mit konstanten Koeffizienten rein absolut stetiges Spektrum (*h *ist dann ein nicht–konstantes Polynom).*

Beweis. Da $H_{ac}(M_h)$ ein abgeschlossener Teilraum ist, genügt es zu zeigen, daß jedes

$$f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m) \quad \text{mit} \quad \operatorname{supp} f \subset G_j = \left\{ x \in \mathbb{R}^m : \frac{\partial}{\partial x_j} h(x) \neq 0 \right\}$$

in $H_{ac}(M_h)$ liegt $(j = 1, \ldots, m)$. O. E. genügt es, den Fall $j = m$ zu betrachten. Wegen $\dfrac{\partial}{\partial x_m} h(x) \neq 0$ in $\operatorname{supp} f$ kann für jedes $x \in \operatorname{supp} f$ auf eine Umgebung von x der Satz über implizite Funktionen angewandt werden, d. h. x_m läßt sich als glatte Funktion ψ_m von $x_1, \ldots, x_{m-1}$, h darstellen; man kann also die Variablen $x_1, \ldots, x_{m-1}, x_m$ durch $x_1, \ldots, x_{m-1}, h$ ersetzen mit glatter nichtverschwindender Funktionaldeterminante

$$\varphi(x_1, \ldots, x_{m-1}, h) = \frac{\partial\Big(x_1, \ldots, x_{m-1}, \psi_m(x_1, \ldots, x_{m-1}, h)\Big)}{\partial\Big(x_1, \ldots, x_{m-1}, h\Big)}.$$

O. E. können wir annehmen, daß f seinen Träger in einer solchen Menge hat. Es gilt also für die Spektralschar E von M_h

$$\begin{aligned}
\|E(t)f\|^2 &= \int\limits_{\{x \in \mathbb{R}^m : h(x) \leq t\}} |f(x)|^2 \, \mathrm{d}x \\
&\qquad \text{mit } \widetilde{f}(x_1, \ldots, x_{m-1}, h) = f\left(x_1, \ldots, x_{m-1}, \psi_m(x_1, \ldots, x_{m-1}, h)\right) \\
&= \int\limits_{h \in (-\infty, t]} \int\limits_{\mathbb{R}^{m-1}} |\widetilde{f}(x_1, \ldots, x_{m-1}, h)|^2 \, |\varphi(x_1, \ldots, x_{m-1}, h)| \, \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_{m-1} \, \mathrm{d}h \\
&= \int\limits_{-\infty}^{t} \left\{ \int\limits_{\mathbb{R}^{m-1}} |\widetilde{f}(x_1, \ldots, x_{m-1}, h)|^2 |\varphi(x_1, \ldots, x_{m-1}, h)| \, \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_{m-1} \right\} \mathrm{d}h.
\end{aligned}$$

Das ist die Absolutstetigkeit von $\|E(t)f\|^2$, da der Integrand $\{\ldots\}$ in $C_0(\mathbb{R})$ liegt. □

4.3 Ein Gegenbeispiel zur Vollständigkeit der Wellenoperatoren

Die Existenz eines der Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1) = W_\pm(T_2, T_1, I)$ bedeutet, daß T_1 zur Einschränkung von T_2 auf $R(W_\pm(T_2, T_1))$ unitär äquivalent ist, wobei die unitäre Äquivalenz durch

$W_\pm(T_2, T_1)$ vermittelt wird (da $W_+(T_2, T_1)$ i. allg. ungleich $W_-(T_2, T_1)$ ist, hat man gleich zwei solche unitären Äquivalenzen, falls beide existieren).

Hat T_1 ein rein absolut stetiges Spektrum, wie es im Abschnitt 4.2 stets der Fall war, so bedeutet die Vollständigkeit der Wellenoperatoren

$$R(W_\pm(T_2, T_1)) = R(W_\pm(T_2, T_1, I)) = H_{ac}(T_2)\,,$$

d. h. der ganze Operator T_1 ist unitär äquivalent zum absolut stetigen Teil $T_{2,ac}$ von T_2. Das ist natürlich nur möglich, wenn $\sigma_{ac}(T_2) = \sigma_{ac}(T_1) = \sigma(T_1)$ ist (aber natürlich ist die Gleichheit nicht hinreichend für die Vollständigkeit). Mit dieser Erkenntnis ist es nun nicht schwer, ein Beispiel anzugeben, das zeigt, daß die Bedingungen aus Abschnitt 4.2 nicht ausreichen, um die Vollständigkeit der Wellenoperatoren zu garantieren.

Beispiel 4.10 In $L_2(\mathbb{R}^2)$ sei

$$\begin{aligned} T_1 &= -\Delta \qquad \text{mit dem üblichen Definitionsbereich}\,, \\ T_2 &= T_1 + V \qquad \text{mit} \quad V(x) = v(x_1)\,, \end{aligned}$$

dabei sei (im wesentlichen der Einfachheit halber) $v : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ stetig, ≤ 0 mit kompaktem Träger, aber $v \not\equiv 0$, z. B. ein Potentialtopf. Dann besitzt $A = -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} + v$ in $L_2(\mathbb{R})$ mindestens einen negativen Eigenwert:

(i) Da die Störung v relativ kompakt bezüglich $-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}$ ist, hat A das Spektrum $[0, \infty) = \sigma\left(-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}\right)$ und ansonsten höchstens noch isolierte Eigenwerte endlicher Vielfachheit, die sich nur bei 0 häufen können (auch nicht bei $-\infty$, da A nach unten halbbeschränkt ist).

(ii) Ist $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ mit $\varphi(0) = 1$, so gilt für $\varphi_n(s) := \varphi\Big(\dfrac{s}{n}\Big)$

$$(\alpha) \qquad \langle \varphi_n, v\varphi_n \rangle \longrightarrow \int v(s)\,\mathrm{d}(s) < 0 \qquad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,,$$

$$\begin{aligned} (\beta) \qquad \langle \varphi_n, -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}\,\varphi_n \rangle &= -\int \overline{\varphi_n(s)}\varphi_n''(s)\,\mathrm{d}s = -\int \overline{\varphi\left(\frac{s}{n}\right)} n^{-2} \varphi''\left(\frac{s}{n}\right)\mathrm{d}s \\ &\qquad (\text{Substitution } \ y = \frac{s}{n}) \\ &= -n^{-1} \int \overline{\varphi(y)}\varphi''(y)\,\mathrm{d}y \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,. \end{aligned}$$

Für hinreichend große n ist also

$$\langle \varphi_n, A\varphi_n \rangle < 0 \,,$$

d. h. A muß mindestens einen negativen Spektralpunkt haben, und dieser kann nach (i) nur ein Eigenwert sein; andernfalls wäre nämlich $\langle \varphi, A\varphi \rangle \geq 0$ für alle $\varphi \in D(A)$.

Sei also λ_0 ein negativer Eigenwert von A, f_0 eine zugehörige Eigenfunktion. Dann ist offensichtlich die Einschränkung T_0 von T_2 auf $\left\{ f_0(x_1)g(x_2) : g \in D\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}\right)\right\}$ unitär äquivalent zu

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} + \lambda_0 \,.$$

Diese Einschränkung hat also absolut stetiges Spektrum $\sigma_{ac}(T_0) = [\lambda_0, \infty) \underset{\neq}{\subset} [0, \infty) = \sigma_{ac}(T_1)$.

Andererseits ist natürlich klar (Satz 4.3), daß die Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1)$ existieren. Diese können aber nicht vollständig sein. #

5 Spurklassenmethoden

5.1 $\mathrm{B_p}$–Klassen kompakter Operatoren, Spurklasse

Es sei zunächst an einige grundlegende Eigenschaften kompakter Operatoren erinnert. Für die hier nicht aufgeführten Beweise wird auf die Abschnitte 4.2–3 der „Mathematischen Methoden der Quantenmechanik“ verwiesen.

Satz 5.1 *Ein selbstadjungierter (bzw. normaler) Operator K im Hilbertraum H ist genau dann kompakt, wenn eine orthonormale Folge (e_n) aus H und eine Nullfolge (λ_n) aus $\mathbb{R}$ (bzw. $\mathbb{C}$) existieren mit*

$$Kx = \sum_n \lambda_n \langle e_n, x\rangle e_n \,.$$

(Natürlich können diese Folgen auch endlich sein.)

Ein selbstadjungierter Operator A heißt ***nicht–negativ***, wenn für alle $x \in D(A)$ gilt $\langle x, Ax\rangle \geq 0$. Er heißt ***positiv***, wenn für alle $x \in D(A)\setminus\{0\}$ gilt $\langle x, Ax\rangle > 0$. Wie aus dem Spektralsatz folgt, ist A genau dann nicht–negativ (bzw. positiv), wenn $E_A(0-) = 0$ (bzw. $E_A(0) = 0$) gilt. Ein kompakter selbstadjungierter Operator ist auf Grund von Satz 5.1 genau dann nicht–negativ (bzw. positiv), wenn alle seine Eigenwerte nicht–negativ (bzw. positiv) sind.

Satz 5.2 *Zu jedem nicht–negativen selbstadjungierten (kompakten) Operator K gibt es genau eine nicht–negative (kompakte) Quadratwurzel. (Entsprechendes gilt für beliebige n–te Wurzeln, $n \in \mathbb{N}$.)*

Beweis. Ist E die Spektralschar von K, so ist wegen $E(t) = 0$ für $t < 0$

$$Q = \int t^{1/2}\, \mathrm{d}E(t)$$

offensichtlich eine nicht–negative Quadratwurzel von K.

Ist R eine beliebige nicht–negative Quadratwurzel mit Spektralschar F, so gilt

$$\int\limits_{[0,\infty)} s\, \mathrm{d}E(s) \;=\; K \;=\; R^2 \;=\; \int\limits_{[0,\infty)} t^2\, \mathrm{d}F(t) \;=\; \int\limits_{[0,\infty)} s\, \mathrm{d}F(s^{1/2})\,.$$

Aus der Eindeutigkeit der Spektralschar folgt also (da auch $F(s) = 0$ für $s < 0$ gilt)

$$F(s) \;=\; \begin{cases} 0 & \text{für } s < 0, \\ E(s^2) & \text{für } s \geq 0, \end{cases}$$

d. h. F, und damit Q, ist eindeutig bestimmt.

Es bleibt, für einen nicht–negativen kompakten Operator

$$K = \sum_n \lambda_n \langle e_n, \cdot \rangle e_n$$

eine nicht–negative kompakte Quadratwurzel anzugeben. Eine solche ist offensichtlich

$$Q = \sum_n \lambda_n^{1/2} \langle e_n, \cdot \rangle e_n \, . \qquad \square$$

Für jeden Operator $K \in B(H)$ ist K^*K ein nicht–negativer selbstadjungierter Operator (dies gilt übrigens auch für unbeschränkte Operatoren, vgl. z. B. J. Weidmann: Lineare Operatoren in Hilberträumen, Satz 5.3 a). Also ist $|K| := (K^*K)^{1/2}$ wohldefiniert. $|K|$ ist genau dann kompakt, wenn K kompakt ist. Ist K kompakt, so werden die Eigenwerte (s_n) von $|K|$ (mit Vielfachheit gezählt) als die ***singulären Werte*** $s_n(K)$ von K bezeichnet. Man sagt, K liegt in $B_p = B_p(H)$ für $1 \leq p < \infty$, wenn die Folge $(s_n(K))$ in ℓ_p liegt. Die Menge der kompakten Operatoren ist $B_\infty = B_\infty(H)$; in diesem Fall ist $((s_n(K))$ eine Nullfolge aus ℓ_∞. Die Menge $B_1 = B_1(H)$ wird auch als ***Spurklasse*** bezeichnet; die Bezeichnung beruht darauf, daß für diese Operatoren eine „Spur“ (ähnlich wie für Matrizen) sinnvoll definiert werden kann, was wir jedoch hier nicht benötigen. Jeder endlich–dimensionale Operator liegt offenbar in jedem B_p.

Satz 5.3 *Sei $K \in B_\infty(H)$, $s_n = s_n(K)$. Dann existieren orthonormale Folgen (e_n) und (f_n) in H mit*

$$\begin{aligned} Kx &= \sum s_n \langle e_n, x \rangle f_n, & K^*x &= \sum s_n \langle f_n, x \rangle e_n \, , \\ |K|x &= \sum s_n \langle e_n, x \rangle e_n, & |K^*|x &= \sum s_n \langle f_n, x \rangle f_n \, . \end{aligned}$$

Die Elemente e_n bzw. f_n sind Eigenelemente von $|K|$ bzw. $|K^*|$. Insbesondere haben K, $|K|$, K^* und $|K^*|$ die gleichen singulären Werte und somit sind die folgenden Aussagen äquivalent:

$$K \in B_p, \quad |K| \in B_p, \quad K^* \in B_p, \quad |K^*| \in B_p \, .$$

Satz 5.4 a) *Ist K ein kompakter Operator und sind (s_n) die nicht–wachsend geordneten singulären Werte, so gilt für alle $n \in \mathbb{N}_0$*

$$s_{n+1} = \inf_{y_1,\ldots,y_n \in H} \sup \Big\{ \|Kx\| : \; x \in H, \; \|x\| = 1, \; x \perp y_1, \ldots, y_n \Big\} \, ;$$

speziell gilt $s_1 = \|K\|$. Ist K selbstadjungiert, so gilt die entsprechende Aussage für $|\lambda_n|$, wenn λ_n die dem Betrag nach fallend geordneten Eigenwerte von K sind.

b) *Sind* K, L *kompakt und* B *beschränkt, so gilt*

$$\begin{aligned}
&s_{j+k+1}(K+L) \le s_{j+1}(K) + s_{k+1}(L) && \textit{für} \quad j,k \in \mathbb{N}_0\,,\\
&s_j(BK) \le \|B\|\, s_j(K), \quad s_j(KB) \le \|B\|\, s_j(K) && \textit{für} \quad j \in \mathbb{N}\,,\\
&s_{j+k+1}(KL) \le s_{j+1}(K) s_{k+1}(L) && \textit{für} \quad j,k \in \mathbb{N}_0\,.
\end{aligned}$$

Beweis. Nur Teil b) ist in Abschnitt 4 von „Mathematische Methoden der Quantenmechanik“ noch nicht bewiesen worden: Nach Teil a) gilt

$$\begin{aligned}
&s_{j+k+1}(K+L)\\
&\le \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \sup\Big\{\|(K+L)x\| :\ x \in H,\ \|x\| = 1,\ x \perp y_1,\dots,y_{j+k}\Big\}\\
&\le \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \sup\Big\{\|Kx\| + \|Lx\| :\ x \in H,\ \|x\| = 1,\ x \perp y_1,\dots,y_{j+k}\Big\}\\
&\le \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \Big\{\sup\big\{\|Kx\| :\ x \in H,\ \|x\| = 1,\ x \perp y_1,\dots,y_j\big\}\\
&\qquad\qquad + \sup\big\{\|Lx\| :\ x \in H,\ \|x\| = 1,\ x \perp y_{j+1},\dots,y_{j+k}\big\}\Big\}\\
&= \inf_{y_1,\dots,y_j} \sup\big\{\|Kx\| : \dots\big\} + \inf_{y_{j+1},\dots,y_{j+k}} \sup\big\{\|Lx\| : \dots\big\}\\
&= s_{j+1}(K) + s_{k+1}(L)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
s_{j+1}(BK) &= \inf_{y_1,\dots,y_j} \sup\Big\{\|BKx\| :\ x \in H,\ \|x\| = 1,\ x \perp y_1,\dots,y_j\Big\}\\
&\le \|B\| \inf_{y_1,\dots,y_j} \sup\Big\{\|Kx\| :\ x \in H,\ \|x\| = 1,\ x \perp y_1,\dots,y_j\Big\}\\
&= \|B\|\, s_{j+1}(K)\,.
\end{aligned}$$

Für $s_j(KB)$ folgt die Aussage aus $s_j(KB) = s_j((KB)^*) = s_j(B^*K^*)$, $\|B^*\| = \|B\|$ und $s_j(K^*) = s_j(K)$.

Analog zur Summe $K+L$ wird das Produkt KL untersucht:

$$\begin{aligned}
s_{j+k+1}(KL) &= \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \sup\Big\{\|KLx\|:\ x\in H,\ \|x\|=1,\, x\perp y_1,\dots,y_{j+k}\Big\}\\
&\le \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \sup\Big\{\|KLx\|:\ \ x\in H\,,\ \|x\|=1\,,\\
&\qquad\qquad x\perp y_1,\dots,y_k,\ L^*y_{k+1},\dots,L^*y_{k+j}\Big\}\\
&\qquad \text{(und, mit } \|KLx\|\ \|Lx\|^{-1}=0 \text{ für } \|Lx\|=0)\\
&= \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \sup\Big\{\frac{\|KLx\|}{\|Lx\|}\|Lx\|:\ \ x\in H,\ \|x\|=1\,,\\
&\qquad\qquad x\perp y_1,\dots,y_k,\ Lx\perp y_{k+1},\dots,y_{k+j}\Big\}\\
&= \inf_{y_1,\dots,y_{j+k}} \Big\{\sup\big\{\|Kz\|:\ z\in H,\ \|z\|=1,\ z\perp y_{k+1},\dots,y_{k+j}\big\}\\
&\qquad \times \sup\big\{\|Lx\|: x\in H,\ \|x\|=1,\, x\perp y_1,\dots,y_k\big\}\Big\}\,,\\
&= s_{j+1}(K)s_{k+1}(L)\,.
\end{aligned}$$

□

Satz 5.5 a) *K ist genau dann ein Hilbert–Schmidt–Operator, wenn $K\in B_2$ ist; für $K\in B_2$ ist $|||K|||^2=\sum s_j(K)^2$.*

b) *Es gilt $K\in B_1$ genau dann, wenn $K=K_1K_2$ gilt mit Hilbert–Schmidt–Operatoren K_1,K_2; es ist dann $\sum s_j(K)\le |||K_1|||\ |||K_2|||$.*

c) *Die Mengen B_p sind Vektorräume. (Tatsächlich sind die B_p mit $\|K\|_p:=\big\{\sum s_n(K)^p\big\}^{1/p}$ Banachräume. Wir werden dies [d. h. insbesondere die Dreiecksungleichung für $\|\cdot\|_p$] hier nur für den Fall $p=1$ beweisen; vgl. Satz 5.6.)*

Beweis. a) K ist genau dann ein Hilbert–Schmidt–Operator, wenn für eine/jede Orthonormalbasis $\{\varphi_j\}$ gilt $\sum\|K\varphi_j\|^2<\infty$. Deshalb folgt die Behauptung aus der Tatsache, daß für einen kompakten Operator mit singulären Werten s_j und den zugehörigen Eigenelementen e_j von $|K|$ gilt $\|Ke_j\|=s_j$.

b) Sei $K=\sum s_j\langle e_j,\cdot\rangle f_j$ die Darstellung gemäß Satz 5.3.
$\Longrightarrow$: Die Operatoren

$$K_2:=\sum s_j^{1/2}\langle e_j,\cdot\rangle e_j\,,\quad K_1:=\sum s_j^{1/2}\langle e_j,\cdot\rangle f_j$$

sind Hilbert–Schmidt–Operatoren, und es gilt $K=K_1K_2$.

$\Longleftarrow$: Da K_1 und K_2 Hilbert–Schmidt–Operatoren sind, gilt

$$\begin{aligned}\sum s_j &= \sum \langle Ke_j, f_j\rangle = \sum \langle K_2 e_j, K_1^* f_j\rangle \\ &\le \Big\{\sum \|K_2 e_j\|^2 \sum \|K_1^* f_j\|^2\Big\}^{1/2} = |||K_1|||\;|||K_2|||\,,\end{aligned}$$

d. h. K ist ein Spurklassenoperator.

c) Für $K_1, K_2 \in B_p$ gilt

$$\begin{aligned} s_{2n+1}(K_1+K_2) &\le s_{n+1}(K_1) + s_{n+1}(K_2)\,, \\ s_{2n}(K_1+K_2) &\le s_n(K_1) + s_{n+1}(K_2)\,,\end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned}\sum s_j(K_1+K_2)^p &\le \sum \Big\{\Big(s_{j+1}(K_1)+s_{j+1}(K_2)\Big)^p + \Big(s_j(K_1)+s_{j+1}(K_2)\Big)^p\Big\} \\ &\le \sum \Big\{2^p s_{j+1}(K_1)^p + 2^p s_{j+1}(K_2)^p + 2^p s_j(K_1)^p + 2^p s_{j+1}(K_2)^p\Big\} \\ &\le 2^{p+1} \sum \Big\{s_j(K_1)^p + s_j(K_2)^p\Big\} < \infty\,,\end{aligned}$$

d. h. $K_1 + K_2$ ist aus B_p. □

Satz 5.6 *$B_1(H)$ mit $\|\cdot\|_1 := \sum_n s_n(\cdot)$ ist ein Banach–Raum.*

Beweis. Es ist zunächst zu zeigen, daß $\|\cdot\|_1$ eine Norm ist. Wegen Satz 5.5 c genügt es dafür, die Dreiecksungleichung zu beweisen. Seien $K_1, K_2 \in B_1(H)$, $K = K_1 + K_2$ und

$$K_1 = \sum s_n' \langle e_n', \cdot\rangle f_n'\,, \quad K_2 = \sum s_n'' \langle e_n'', \cdot\rangle f_n''\,, \quad K = \sum s_n \langle e_n, \cdot\rangle f_n$$

die Darstellungen im Sinne von Satz 5.5 . Dann folgt (dabei gilt das vierte Gleichheitszeichen deshalb, weil $\{f_n'\}$ bzw. $\{f_n''\}$ Orthonormal**basen** von $R(K_1)$ bzw. $R(K_2)$ sind, so daß es genügt, nach diesen [i. allg. nicht vollständigen Orthonormalsystemen] zu entwickeln)

$$\begin{aligned}\|K\|_1 &= \sum s_n = \sum \Big\langle (K_1+K_2)e_n, f_n\Big\rangle \\ &= \sum \langle K_1 e_n, f_n\rangle + \sum \langle K_2 e_n, f_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle K_1 e_n, f_m'\rangle\,\langle f_m', f_n\rangle + \sum_{n,m} \langle K_2 e_n, f_m''\rangle\,\langle f_m'', f_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle e_n, K_1^* f_m'\rangle\,\langle f_m', f_n\rangle + \sum_{n,m} \langle e_n, K_2^* f_m''\rangle\,\langle f_m'', f_n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle e_n, s_m' e_m'\rangle\,\langle f_m', f_n\rangle + \sum_{n,m} \langle e_n, s_m'' e_m''\rangle\,\langle f_m'', f_n\rangle\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\le \quad \sum_m s'_m \Big\{ \sum_n |\langle e_n, e'_m\rangle|^2 \sum_n |\langle f'_m, f_n\rangle|^2 \Big\}^{1/2} \\
&\qquad + \sum_m s''_m \Big\{ \sum_m |\langle e_n, e''_m\rangle|^2 \sum_n |\langle f''_m, f_n\rangle|^2 \Big\}^{1/2} \\
&\le \quad \sum_m (s'_m + s''_m) = \|K_1\|_1 + \|K_2\|_1 \,.
\end{aligned}
$$

Sei nun (K_ℓ) eine $\|\cdot\|_1$–Cauchyfolge. Dann ist $(\|K_\ell\|_1)$ konvergent, und wegen $\|\cdot\| \le \|\cdot\|_1$ ist (K_ℓ) auch eine $\|\cdot\|$–Cauchyfolge. Folglich existiert ein $K \in B_\infty(H)$ mit $\|K_\ell - K\| \longrightarrow 0$. Es bleibt zu zeigen, daß $K \in B_1(H)$ ist und $\|K_\ell - K\|_1 \longrightarrow 0$ gilt.

Aus

$$
\begin{aligned}
s_n(K) &= s_n(K_\ell + (K - K_\ell)) \\
&\le s_n(K_\ell) + s_1(K - K_\ell) \;=\; s_n(K_\ell) + \|K - K_\ell\| \,, \\
s_n(K_\ell) &\le s_n(K) + \|K - K_\ell\|
\end{aligned}
$$

folgt

$$
s_n(K) - \|K - K_\ell\| \;\le\; s_n(K_\ell) \;\le\; s_n(K) + \|K - K_\ell\| \,,
$$

und somit

$$
s_n(K_\ell) \longrightarrow s_n(K) \quad \text{für} \quad \ell \longrightarrow \infty \quad \text{und alle} \quad n \,.
$$

Damit folgt $K \in B_1(H)$ und $\|K\|_1 \le \lim\limits_{\ell\to\infty} \|K_\ell\|_1$, denn es gilt für jedes $N \in \mathbb{N}$

$$
\sum_{n=1}^N s_n(K) = \lim_{\ell\to\infty} \sum_{n=1}^N s_n(K_\ell) \le \lim_{\ell\to\infty} \sum_{n=1}^\infty s_n(K_\ell) = \lim_{\ell\to\infty} \|K_\ell\|_1 \,.
$$

Angewandt auf $K - K_\ell$ statt K liefert dies für jedes $\varepsilon > 0$

$$
\|K - K_\ell\|_1 \;\le\; \lim_{q\to\infty} \|K_q - K_\ell\|_1 \;\le\; \varepsilon \qquad \text{für} \qquad \ell \ge \ell(\varepsilon) \,,
$$

also $\|K - K_\ell\|_1 \longrightarrow 0$. $\square$

5.2 Der Satz von Pearson

Ein bekannter Satz von H. Weyl und J. von Neumann bzw. dessen Verschärfung durch S. T. Kuroda (vgl. z. B. T. Kato: Perturbation theory for linear operators, Theorem X.2.1 und Theorem X.2.3) besagt: Ist T selbstadjungiert, $\varepsilon > 0$ und $p > 1$, so existiert ein $A \in B_p$ mit $\|A\|_p = \{\sum s_j(A)^p\}^{1/p} < \varepsilon$ so, daß $T + A$ reines Punktspektrum hat. Dies gilt insbesondere auch dann, wenn T rein absolut stetiges Spektrum hat. Für $A \in B_p$ mit $p > 1$ kann man also die Existenz von $W_\pm(T+A, T, P_{T,ac})$ nicht erwarten, da hieraus die unitäre Äquivalenz der absolut stetigen Teile von T und $T + A$ folgen würde.

Umso bemerkenswerter sind die folgenden Resultate (einschließlich derer aus Abschnitt 5.3).

Satz 5.7 (D. B. Pearson, 1978) *Seien T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum H, $J \in B(H)$, $C \in B_1(H)$ und es gelte*

$$\langle y, Cx\rangle = \langle T_2 y, Jx\rangle - \langle y, JT_1 x\rangle \qquad \textit{für alle} \quad x \in D(T_1)\,,\ y \in D(T_2)\,.$$

Dann existiert

$$\operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} P_{1,ac}\,.$$

Anmerkung zu Satz 5.7 . Der Satz gilt entsprechend für selbstadjungierte Operatoren T_1 und T_2 in $(H_1, \langle\cdot,\cdot\rangle_1)$ bzw. $(H_2, \langle\cdot,\cdot\rangle_2)$, $J \in B(H_1, H_2)$ und $C \in B_1(H_1, H_2)$ mit

$$\langle y,\, Cx\rangle_2 = \langle T_2 y,\, Jx\rangle_2 - \langle y,\, JT_1 x\rangle_2 \quad \text{für alle} \quad x \in D(T_1),\, y \in D(T_2)\,.$$

Korollar 5.8 (Satz von T. Kato – M. Rosenblum, 1957) *Sind T_1 und T_2 selbstadjungiert so, daß $C := \overline{T_2 - T_1}$ ein Spurklassenoperator ist, so existieren $W_\pm(T_2, T_1,\, P_{1,ac})$ und $W_\pm(T_1, T_2,\, P_{2,ac})$; insbesondere sind die Wellenoperatoren vollständig.*

Der ***Beweis*** des Satzes von Kato–Rosenblum ergibt sich aus Satz 5.7 mit $J = I$ und $C := \overline{T_2 - T_1}$. Dieser Satz wurde von Rosenblum 1957 für den Fall bewiesen, daß T_1 und T_2 rein absolut stetiges Spektrum haben, von Kato noch im gleichen Jahr für den allgemeinen Fall.

Bemerkung zu Satz 5.7 Für $x \in D(T_1)$ gilt offenbar

$$\langle T_2 y, Jx\rangle = \langle y, Cx\rangle + \langle y, JT_1 x\rangle \qquad \text{für alle} \quad y \in D(T_2)\,.$$

Also ist $Jx \in D(T_2^*) = D(T_2)$ und $T_2 Jx = Cx + JT_1 x$; d. h. es gilt

$$Cx = (T_2 J - JT_1)x \qquad \text{für alle} \quad x \in D(T_1)\,,$$

und somit ist

$$\overline{T_2 J - J T_1} \,=\, C \,\in\, B_1(H)\,.$$

Entsprechend ist $J^* y \in D(T_1)$ für $y \in D(T_2)$ und

$$C^* y \,=\, (J^* T_2 - T_1 J^*) y \qquad \text{für alle} \quad y \in D(T_2)\,.$$

Beweis von Satz 5.7. Sei $x \in H_{ac}(T_1)$ und

$$H_x := \overline{L\{E_1(\lambda)x :\, \lambda \in \mathbb{R}\}} \subset H_{ac}(T_1)\,.$$

Da die Menge der y, für die $\lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} y$ existiert, offenbar abgeschlossen ist, und da x in H_x enthalten ist, genügt es offenbar zu zeigen, daß eine dichte Teilmenge M von H_x existiert, für die gilt:

$$\lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} y \qquad \text{existiert für alle} \quad y \in M\,.$$

(Es sieht aus, als ob dies eine stärkere Aussage wäre als die Existenz von $\lim e^{itT_2} J e^{-itT_1} x$, was eigentlich zu zeigen ist; man beachte aber, daß x nicht notwendig in M liegt — und so wird es unten tatsächlich sein.)

Wir zeigen zunächst, daß wir o. E. annehmen können, daß der Teilraum H_x gleich $L_2(S)$ ist mit einer meßbaren Teilmenge $S \subset \mathbb{R}$ und $T_1|_{H_x} = M_{\mathrm{id}}$. Dazu zeigen wir, daß stets ein solches S existiert so, daß $T_1|_{H_x}$ unitär äquivalent zu M_{id} in $L_2(S)$ ist (das ist nichts anderes, als eine geeignete **Spektraldarstellung** von $T_1|_{H_x}$): Wir definieren

$$\begin{aligned}
&U_0 : L\{E_1(\lambda)x :\, \lambda \in \mathbb{R}\} \longrightarrow L_2(\mathbb{R};\, \mathrm{d}\varrho_x) \qquad \text{mit} \quad \varrho_x(s) := \|E_1(s)x\|^2\,,\\
&U_0 \sum c_j E_1(\lambda_j) x = \sum c_j \chi_{(-\infty,\lambda_j]}\,.
\end{aligned}$$

Man rechnet leicht nach, daß diese Abbildung isometrisch ist. Ihr Wertebereich enthält alle linksstetigen Treppenfunktionen, ist also dicht in $L_2(\mathbb{R};\, \mathrm{d}\varrho_x)$. Also ist $U := \overline{U_0}$ unitär von H_x auf $L_2(\mathbb{R};\, \mathrm{d}\varrho_x)$. Wegen

$$U E_1(\lambda) U^{-1} \,=\, \chi_{(-\infty,\lambda]}$$

geht T_1 bei dieser unitären Äquivalenz über in M_{id}. Da $\varrho_x(\cdot)$ absolut stetig ist, existiert ein nicht–negatives $h_x \in L_1(\mathbb{R})$ mit $\varrho_x(\lambda) = \int\limits_{(-\infty,\lambda]} h_x(\sigma)\,\mathrm{d}\sigma$. Mit

$$S := \Big\{\lambda \in \mathbb{R} : \; h(\lambda) \neq 0\Big\}$$

ist dann

$$V : \; L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_x) \longrightarrow L_2(S), \quad f \mapsto h^{1/2} f$$

unitär, und unter V geht M_{id} in $L_2(\mathbb{R}, \mathrm{d}\varrho_x)$ über in M_{id} in $L_2(S)$. Also ist

$$W := I_{H_x^\perp} \oplus VU \; : \; H = H_x^\perp \oplus H_x \longrightarrow H_x^\perp \oplus L_2(S)$$

unitär mit $WT_1W^{-1}|_{L_2(S)} = M_{\mathrm{id}}$. Für $\tilde{T}_j := WT_jW^{-1}$ $(j = 1,2)$ ist also die gewünschte Situation gegeben.

Für die dichte Teilmenge M in $H_x = L_2(S)$ wählen wir im folgenden $M = L_2(S) \cap L_\infty(S)$. Mit

$$W(t) := e^{itT_2} J e^{-itT_1}$$

haben wir also zu zeigen:

$$\lim_{t \to \pm\infty} W(t)g \quad \text{existiert für alle} \quad g \in L_2(S) \cap L_\infty(S)\,,$$

bzw.

$$\Big\|(W(t) - W(s))g\Big\| \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad s,t \to \pm\infty\,.$$

Zunächst schreiben wir

$$\Big\|(W(t) - W(s))g\Big\|^2 = \Big\langle g, W(t)^*(W(t) - W(s))g + W(s)^*(W(s) - W(t))g\Big\rangle$$

und untersuchen zunächst den ersten Summanden auf der rechten Seite:

$$\begin{aligned} \Big\langle g, W(t)^*\Big(W(t) - W(s)\Big)g\Big\rangle &= \Big\langle g, e^{iaT_1} W(t)^* \Big(W(t) - W(s)\Big) e^{-iaT_1} g\Big\rangle \\ &+ \Big\langle g, \Big(W(t)^*W(t) - e^{iaT_1} W(t)^* W(t) e^{-iaT_1}\Big) g\Big\rangle \qquad (*) \\ &- \Big\langle g, \Big(W(t)^*W(s) - e^{iaT_1} W(t)^* W(s) e^{-iaT_1}\Big) g\Big\rangle \qquad (a > 0)\,. \end{aligned}$$

Die drei Terme auf der rechten Seite werden nun nacheinander untersucht.

(i) Da für $x \in D(T_1)$ auch $e^{-i\sigma T_1} x \in D(T_1)$ gilt, ist nach obiger Bemerkung auch $J e^{-i\sigma T_1} x \in D(T_2)$. Damit folgt die Differenzierbarkeit von $W(t)x$ für $x \in D(T_1)$,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} W(t)x = i\, e^{itT_2}\,(T_2 J - J T_1)\, e^{-itT_1} x = i\, e^{itT_2} C\, e^{-itT_1} x\,,$$

also

$$\Big(W(t) - W(s)\Big) e^{-iaT_1} g \;=\; i \int\limits_s^t e^{i\tau T_2} C\, e^{-i\tau T_1}\, \mathrm{d}\tau\, e^{-iaT_1}\, g\,.$$

Hier stellt das Integral einen kompakten Operator dar, da C kompakt ist, und es gilt $e^{-iaT_1} g(\cdot) = e^{-ia\,\cdot} g(\cdot) \xrightarrow{w} 0$ für $a \longrightarrow \infty$. Also gilt

$$\begin{aligned}
&\Big\langle g, e^{iaT_1} W(t)^* \Big(W(t) - W(s)\Big) e^{-iaT_1} g \Big\rangle \\
&\qquad = \Big\langle W(t) e^{-iaT_1} g, \Big(W(t) - W(s)\Big) e^{-iaT_1} g \Big\rangle \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad a \longrightarrow \infty
\end{aligned}$$

bei beliebigen fest gewählten s und t.

(ii) Dieser Term konvergiert unabhängig von $a > 0$ gegen 0 für $s, t \longrightarrow \infty$. Dies erhält man wie in Teil (iii), wenn man $s = t$ setzt.

(iii) Es gilt

$$\begin{aligned}
&\Big\langle g, \Big(W(t)^* W(s) - e^{iaT_1} W(t)^* W(s) e^{-iaT_1}\Big) g \Big\rangle \\
&= \; -\int\limits_0^a \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} \Big\langle e^{-i\tau T_1} g, e^{itT_1} J^* e^{-i(t-s)T_2} J e^{-i(\tau+s)T_1} g \Big\rangle\, \mathrm{d}\tau \\
&= \; -i \int\limits_0^a \Big\{ \Big\langle T_1 e^{-i\tau T_1} g, e^{itT_1} J^* e^{-i(t-s)T_2} J e^{-i(\tau+s)T_1} g \Big\rangle \\
&\qquad - \Big\langle e^{-i(t+\tau)T_1} g,\; J^* e^{-i(t-s)T_2} J T_1 e^{-i(\tau+s)T_1} g \Big\rangle \Big\}\, \mathrm{d}\tau
\end{aligned}$$

(Einschieben der zwei mittleren Terme, die sich offensichtlich wegheben)

$$\begin{aligned}
&= \; -i \int\limits_0^a \Big\{ \Big\langle e^{-i(t+\tau)T_1} g\,, \mathbf{T_1 J}^* e^{-i(t-s)T_2} J\, e^{-i(\tau+s)T_1} g \Big\rangle \\
&\qquad - \Big\langle e^{-i(t+\tau)T_1} g, \mathbf{J}^* \mathbf{T_2}\, e^{-i(t-s)T_2} J\, e^{-i(\tau+s)T_1} g \Big\rangle \\
&\qquad + \Big\langle e^{-i(t+\tau)T_1} g, J^* e^{-i(t-s)T_2} \mathbf{T_2 J}\, e^{-i(\tau+s)T_1} g \Big\rangle
\end{aligned}$$

$$- \left\langle e^{-i(t+\tau)T_1} g, J^* e^{-i(t-s)T_2} \mathbf{J T_1}\, e^{-i(\tau+s)T_1} g \right\rangle \Big\} \, \mathrm{d}\tau$$

(jeweils zwei fettgedruckte Terme ergeben zusammen $-C^*$ bzw. C)

$$= \quad -i \int_0^a \Big\{ - \left\langle J^* e^{i(t-s)T_2} C e^{-i(t+\tau)T_1} g, e^{-i(\tau+s)T_1} g \right\rangle + \left\langle e^{-i(t+\tau)T_1} g, J^* e^{-i(t-s)T_2} C\, e^{-i(\tau+s)T_1} g \right\rangle \Big\} \, \mathrm{d}\tau$$

(mit $Ch = \sum s_n \langle \varphi_n, h \rangle \psi_n$, wobei $s_n > 0$ und $\sum s_n < \infty$ gilt und $\{\varphi_n\}, \{\psi_n\}$ orthonormale Folgen sind)

$$= \quad i \int_t^{t+a} \left\langle J^* e^{i(t-s)T_2} \sum s_n \langle \varphi_n, e^{-i\tau T_1} g \rangle \psi_n, e^{-i(\tau+s-t)T_1} g \right\rangle \mathrm{d}\tau$$

$$- i \int_s^{s+a} \left\langle e^{-i(\tau+t-s)T_1} g, J^* e^{-i(t-s)T_2} \sum s_n \langle \varphi_n, e^{-i\tau T_1} g \rangle \psi_n \right\rangle \mathrm{d}\tau$$

$$= \quad i \sum s_n \int_t^{t+a} \Big\langle \underbrace{e^{i(s-t)T_1} J^* e^{-i(s-t)T_2}}_{=: X_{s,t}} \psi_n, e^{-i\tau T_1} g \Big\rangle \langle e^{-i\tau T_1} g, \varphi_n \rangle \, \mathrm{d}\tau$$

$$- i \sum s_n \int_s^{s+a} \Big\langle e^{-i\tau T_1} g, \underbrace{e^{i(t-s)T_1} J^* e^{-i(t-s)T_2}}_{=: X_{t,s}} \psi_n \Big\rangle \langle \varphi_n, e^{-i\tau T_1} g \rangle \, \mathrm{d}\tau \, .$$

Damit erhalten wir für den Betrag (erst Anwendung der Schwarzschen Ungleichung auf die Integrale, dann auf die Summe)

$$\leq \quad \Big\{ \sum s_n \int_t^{t+a} |\langle X_{s,t} \psi_n, e^{-i\tau T_1} g \rangle|^2 \, \mathrm{d}\tau \cdot \sum s_n \int_t^{t+a} |\langle e^{-i\tau T_1} g, \varphi_n \rangle|^2 \, \mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2}$$

$$+ \Big\{ \sum s_n \int_s^{s+a} |\langle e^{-i\tau T_1} g, X_{t,s} \psi_n \rangle|^2 \, \mathrm{d}\tau \cdot \sum s_n \int_s^{s+a} |\langle \varphi_n, e^{-i\tau T_1} g \rangle|^2 \, \mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2} .$$

Wir rechnen der Einfachheit halber nur mit dem ersten Term weiter und erhalten

$$= \quad \Big\{ \sum s_n \int_t^{t+a} \Big| \int e^{-i\tau\xi} g(\xi) \, \overline{(P_{H_x} X_{s,t} \psi_n)(\xi)} \, \mathrm{d}\xi \Big|^2 \, \mathrm{d}\tau$$

$$\times \sum s_n \int_t^{t+a} \Big| \int e^{i\tau\xi} \overline{g(\xi)} \, (P_{H_x} \varphi_n)\, (\xi) \, \mathrm{d}\xi \Big|^2 \, \mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2}$$

$$= \quad \Big\{ \sum s_n \int_t^{t+a} \Big| (2\pi)^{1/2} F(g \cdot \overline{P_{H_x} X_{s,t} \psi_n})\, (\tau) \Big|^2 \, \mathrm{d}\tau$$

$$
\begin{aligned}
& \times \sum s_n \int\limits_t^{t+a} \left|(2\pi)^{1/2} F^{-1}(\overline{g} \cdot P_{H_x}\varphi_n)\,(\tau)\right|^2 \mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2} \\
\leq \quad & 2\pi \Big\{ \sum s_n \|g \cdot \overline{P_{H_x} X_{s,t}\psi_n}\|^2 \cdot \int\limits_t^{t+a} \sum s_n \left|F^{-1}(\overline{g} \cdot P_{H_x}\varphi_n)\,(\tau)\right|^2 \mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2} \\
\leq \quad & 2\pi \Big\{ \sum s_n \sup |g|^2 \, \|P_{H_x} X_{s,t}\psi_n\|^2 \cdot \int\limits_t^{t+a} \sum s_n \left|F^{-1}(\overline{g} \cdot P_{H_x}\varphi_n)\,(\tau)\right|^2 \mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2} \\
\longrightarrow \quad & 0 \quad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty, \text{ unabhängig von } \quad s \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad a > 0\,,
\end{aligned}
$$

da der erste Faktor beschränkt ist und der zweite gegen 0 strebt, denn es ist $\sum s_n\, |F^{-1}(\overline{g} \cdot P_{H_x}\varphi_n)|^2 \in L_1(\mathbb{R})$. Für den zweiten Term in obiger Ungleichung folgt das gleiche für $s \longrightarrow \infty$.

Aus (i), (ii) und (iii) folgt damit insgesamt

$$\Big\langle g, W(t)^* \Big(W(t) - W(s)\Big) g \Big\rangle \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad s,t \longrightarrow \infty\,.$$

Ebenso gilt natürlich

$$\Big\langle g, W(s)^* \Big(W(s) - W(t)\Big) g \Big\rangle \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad s,t \longrightarrow \infty\,,$$

und damit ist die Behauptung für den Limes für $t \longrightarrow +\infty$ bewiesen. Ebenso geht man für $t \longrightarrow -\infty$ vor, wobei in $(*)$ $a < 0$ zu wählen ist. □

Korollar 5.9 *Seien T_1, T_2, J und C wie in Satz 5.7 und g wie im Beweis von Satz 5.7. Dann gilt:*

a) *für alle $s, t \in \mathbb{R}$ ist*

$$
\begin{aligned}
& \Big\| \Big(W(t) - W(s)\Big) g \Big\|^2 \\
& \qquad \leq K \, \Big(\sum s_n\Big)^{1/2} \|g\|_\infty \Big\{ \sum s_n \int\limits_{\min(s,t)}^{\infty} |F(g \cdot \overline{P_{H_x}\varphi_n})\,(\tau)|^2 \,\mathrm{d}\tau \Big\}^{1/2}.
\end{aligned}
$$

b) $$\Big\| \lim_{t\to\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} g - Jg \Big\| \;\leq\; K(g) \Big(\sum s_n\Big)^{1/2}.$$

Beweis. a) Folgt aus den Abschätzungen (i), (ii) und (iii) des Beweises von Satz 5.7.

b) Folgt aus a) für $s = 0$ und $t \longrightarrow \infty$. □

Die Aussage b) kann benutzt werden, um **eine** stetige Abhängigkeit der Wellenoperatoren von T_1 und T_2 zu beweisen ($J = I$), denn es gilt für $A \in B_1(H)$ und $\|A\|_1 \longrightarrow 0$ (z. B.)

$$\begin{aligned} W_+(T_2 + A, T_1) - W_+(T_2, T_1) &= W_+(T_2 + A, T_2)\, W_+(T_2, T_1) - W_+(T_2, T_1) \\ &= \Big(W_+(T_2 + A, T_2) - I\Big) W_+(T_2, T_1) \stackrel{s}{\longrightarrow} 0\,. \end{aligned}$$

Mit Teil a) von Korollar 5.9 kann auch das wichtige Invarianzprinzip bewiesen werden.

Satz 5.10 (Invarianzprinzip) *Seien* T_1, T_2, J *und* C *wie in Satz 5.7,* $\varphi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ *zweimal stetig differenzierbar mit* $\varphi'(x) > 0$ *bzw.* $\varphi'(x) < 0$ *für alle* $x \in \mathbb{R}$*. Dann gilt*

$$\lim_{t \to \pm\infty} e^{it\varphi(T_2)} J e^{-it\varphi(T_1)} P_{1,ac} = \begin{cases} \lim\limits_{t \to \pm\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} P_{1,ac} \\ \textit{bzw.} \\ \lim\limits_{t \to \mp\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} P_{1,ac} \end{cases}$$

Insbesondere existiert der Grenzwert auf der linken Seite.

Aus dem Beweis ist erkennbar, daß es z. B. genügt, daß $\varphi'(x) > 0$ bzw. $\varphi'(x) < 0$ im Inneren eines Intervalls $I \subset \mathbb{R}$ erfüllt ist, wenn $\sigma_{ac}(T_1) \subset I$ gilt. Ist I' ein Intervall mit $\varphi'(x) > 0$ bzw. $\varphi'(x) < 0$ im Inneren von I', so gilt die entsprechende Aussage für $\lim\limits_{t \to \pm\infty} e^{it\varphi(T_2)} J e^{-it\varphi(T_1)} P_{1,ac} E_1(I')$ und $\lim\limits_{t \to \pm\infty} e^{itT_2} J e^{-itT_1} P_{1,ac} E_1(I')$. Für alle folgenden Spurklassenbedingungen für die Existenz von $W_\pm = W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ ergibt sich damit, daß auch $W_\pm(\varphi(T_2), \varphi(T_1), P_{1,ac})$ existieren und mit $W_\pm$ bzw. $W_\mp$ übereinstimmen. Ein solches ***Invarianzprinzip*** ist auch für gewisse Nicht–Spurklassenbedingungen bewiesen worden, vgl. z. B. Reed–Simon, Scattering Theory, Notes to section XI.3, p. 347.

Zum Beweis dieses Satzes benötigen wir den

Hilfssatz 5.11 *Sei* $\varphi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ *zweimal stetig differenzierbar mit* $\varphi'(x) > 0$ *bzw.* $\varphi'(x) < 0$ *für alle* $x \in \mathbb{R}$*. Dann gilt für alle* $g \in L_2(\mathbb{R})$

$$\|g\|^2 \;\geq\; \int\limits_0^\infty \Big| F(e^{-is\varphi(\cdot)} g(\cdot))(u) \Big|^2 \, \mathrm{d}u \longrightarrow 0 \qquad \textit{für } s \longrightarrow \infty \textit{ bzw. } s \longrightarrow -\infty\,.$$

Das Entsprechende gilt für $\int_{-\infty}^0$ *, wenn man „* $s \longrightarrow \infty$ *“ und „* $s \longrightarrow -\infty$ *“ austauscht.*

Beweis. Die Ungleichung ist offensichtlich, da die Fouriertransformation F unitär ist und $\|e^{-is\varphi(\cdot)}g(\cdot)\| = \|g\|$ für alle $s \in \mathbb{R}$ gilt.

Es genügt deshalb, die Konvergenzaussage für alle g aus einer totalen Teilmenge von $L_2(\mathbb{R})$ zu beweisen, z. B. für charakteristische Funktionen beschränkter Intervalle. Wir betrachten nur den Fall $\varphi'(\cdot) > 0$. Für $g = \chi_{[a,b]}$ und $s > 0$ gilt dann

$$F(e^{-is\varphi(\cdot)}g(\cdot))(u) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_a^b e^{-iux} e^{-is\varphi(x)}\,\mathrm{d}x$$
$$= \frac{i}{(2\pi)^{1/2}} \int_a^b \frac{1}{u + s\varphi'(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{-iux - is\varphi(x)}\,\mathrm{d}x$$
$$= \frac{i}{(2\pi)^{1/2}} \left\{ \left[\frac{e^{-iux-is\varphi(x)}}{u + s\varphi'(x)} \right]_a^b + \int_a^b \frac{s\varphi''(x)}{(u + s\varphi'(x))^2} e^{-iux-is\varphi(x)}\,\mathrm{d}x \right\}.$$

Auf Grund der Voraussetzung existieren $C_1 > 0$ und $C_2 \geq 0$ mit $\varphi'(x) \geq C_1$ und $\left|\varphi''(x)\right| \leq C_2$ für alle $x \in [a,b]$. Also gilt für alle $u > 0$ und $s > 0$

$$\left|F(e^{-is\varphi(\cdot)}g)\,(u)\right| \leq \frac{C_3}{u+s}$$

und somit

$$\int_0^\infty \left|F(e^{is\varphi(\cdot)}g)\,(u)\right|^2 \mathrm{d}u \leq \frac{C_3^2}{s} \qquad \text{für alle} \quad s > 0\,.$$

Entsprechend behandelt man den Fall $\varphi'(\cdot) < 0$, wobei man $u > 0$ und $s < 0$ betrachtet. □

Beweis von Satz 5.10. Wir betrachten wieder nur den Fall $\varphi'(\cdot) > 0$. Mit $\hat{W}_+$ bezeichnen wir den nach Satz 5.7 existierenden Operator

$$\hat{W}_+ : H \longrightarrow H,\ x \mapsto \lim_{s\to\infty} e^{isT_2} J e^{-isT_1} P_{1,ac} x\,.$$

Offenbar gilt wieder $\hat{W}_+ e^{itT_1} = e^{itT_2}\hat{W}_+$ für alle $t \in \mathbb{R}$ (vgl. Beweis der Intertwining Eigenschaft, Satz 3.1). Nach Teil a) von Korollar 5.9 gilt also für g wie im Beweis von Satz 5.7 $(s = 0, t = \infty)$

$$\left\|(\hat{W}_+ - J)g\right\|^2 \leq K \left\{\sum s_n\right\}^{1/2} \|g\|_\infty \left\{ \sum s_n \int_0^\infty \left|F(g \cdot \overline{P_{H_x}\varphi_n})\,(\tau)\right|^2 \mathrm{d}\tau \right\}^{1/2},$$

also für alle $t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned}
&\left\| \left(\hat{W}_+ - e^{it\varphi(T_2)} J e^{-it\varphi(T_1)} \right) g \right\|^2 \\
&= \left\| \left(e^{-it\varphi(T_2)} \hat{W}_+ - J e^{-it\varphi(T_1)} \right) g \right\|^2 = \left\| (\hat{W}_+ - J) e^{-it\varphi(T_1)} g \right\|^2 \\
&\leq K \left\{ \sum s_n \right\}^{1/2} \|g\|_\infty \left\{ \sum s_n \int_0^\infty \left| F(e^{-it\varphi(\cdot)} g \overline{P_{H_x} \varphi_n})(\tau) \right|^2 \mathrm{d}\tau \right\}^{1/2} \\
&\longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty ,
\end{aligned}$$

denn nach Hilfssatz 5.11 gilt für jedes n

$$\|g\|^2 \geq \int_0^\infty \left| F(e^{-it\varphi(\cdot)} g \overline{P_{H_x} \varphi_n})(\tau) \right|^2 \mathrm{d}\tau \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \longrightarrow \infty . \qquad \square$$

5.3 Einige Anwendungen des Satzes von Pearson

Der bereits oben erwähnte Satz von Kato–Rosenblum (Korollar 5.8) ist für praktische Anwendungen kaum brauchbar, da $T_2 - T_1$ in der Regel kein Spurklassenoperator ist (ja, meistens sogar unbeschränkt). Dagegen ist der folgende Satz schon wesentlich nützlicher.

Satz 5.12 (S. T. Kuroda – M. S. Birman, ca. 1960) *Sind T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum H so, daß*

$$(T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1} \in B_1(H) \qquad \textit{für ein} \quad z \in \varrho(T_1) \cap \varrho(T_2)$$

gilt, so existieren die Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ und sind vollständig.

Anmerkung zu Satz 5.12 . Man kann beweisen, daß die Voraussetzung dieses Satzes von $z \in \varrho(T_1) \cap \varrho(T_2)$ unabhängig ist: Die Reihe

$$\begin{aligned}
(T_1 - \zeta)^{-1} - (T_2 - \zeta)^{-1} &= \sum_{k=0}^\infty (\zeta - z)^k \left\{ (T_1 - z)^{-k-1} - (T_2 - z)^{-k-1} \right\} \\
&= \sum_{k=0}^\infty (\zeta - z)^k \sum_{n=0}^k (T_1 - z)^{n-k} \left\{ (T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1} \right\} (T_2 - z)^{-n}
\end{aligned}$$

ist für $|\zeta - z| < d := \min \left\{ \mathrm{d}(z, \sigma(T_1)),\ \mathrm{d}(z, \sigma(T_2)) \right\}$ bezüglich der $\| \cdot \|_1$–Norm konvergent, denn es gilt

$$\begin{aligned}
&\left\| \sum_{n=0}^k (T_1 - z)^{n-k} \left\{ (T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1} \right\} (T_2 - z)^{-n} \right\|_1 \\
&\qquad \leq (k+1) d^k \left\| (T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1} \right\|_1 .
\end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung für diese ζ, mittels Iteration und Adjungiertenbildung für alle $\zeta \in \varrho(T_1) \cap \varrho(T_2)$.

Beweis. Da die Voraussetzung bezüglich T_1 und T_2 symmetrisch ist, genügt es, die Existenz von $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ zu beweisen; entsprechend folgt nämlich die Existenz von $W_\pm(T_1, T_2, P_{2,ac})$ und damit nach Satz 3.9 die Vollständigkeit.

Um den Satz von Pearson (Satz 5.7) anzuwenden, benutzen wir

$$\begin{aligned} J &:= (T_2 - z)^{-1}(T_1 - z)^{-1}, \\ C &:= \overline{T_2 J - J T_1} = \overline{(T_2 - z)J - J(T_1 - z)} \\ &= \overline{(T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1}|_{D(T_1)}} = (T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1} \in B_1 . \end{aligned}$$

Mit diesen Definitionen gilt offenbar für alle $x \in D(T_1)$, $y \in D(T_2)$

$$\begin{aligned} \langle y, Cx \rangle &= \langle y, \overline{(T_2 J - J T_1)} x \rangle = \langle y, T_2 J x - J T_1 x \rangle \\ &= \langle T_2 y, J x \rangle - \langle y, J T_1 x \rangle , \end{aligned}$$

wie dies in Satz 5.7 vorausgesetzt wurde. Damit folgt die Existenz von

$$\begin{aligned} &\underset{t\to\pm\infty}{\text{s-lim}}\, e^{itT_2}(T_2 - z)^{-1} e^{-itT_1} P_{1,ac}(T_1 - z)^{-1} \\ &\quad = \underset{t\to\pm\infty}{\text{s-lim}}\, e^{itT_2}(T_2 - z)^{-1}(T_1 - z)^{-1} e^{-itT_1} P_{1,ac} . \end{aligned}$$

Da $(T_1 - z)^{-1} - (T_2 - z)^{-1}$ kompakt ist und (vgl. Beweis von Satz 2.10 a)

$$e^{-itT_1} P_{1,ac} \xrightarrow{w} 0 \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \pm\infty$$

gilt, folgt

$$\Big\{ (T_2 - z)^{-1} - (T_1 - z)^{-1} \Big\} e^{-itT_1} P_{1,ac} \xrightarrow{s} 0 ,$$

und somit existiert dann auch der Limes

$$\begin{aligned} &\underset{t\to\pm\infty}{\text{s-lim}}\, e^{itT_2}(T_1 - z)^{-1} e^{-itT_1} P_{1,ac}(T_1 - z)^{-1} \\ &\quad = \underset{t\to\pm\infty}{\text{s-lim}}\, e^{itT_2} e^{-itT_1} P_{1,ac}(T_1 - z)^{-2} . \end{aligned}$$

Also existiert für jedes $x \in R((T_1 - z)^{-2}) = D(T_1^2)$, und damit für alle $x \in \overline{D(T_1^2)} = H$,

$$\lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2} e^{-itT_1} P_{1,ac} x . \qquad \square$$

Satz 5.13 (S. T. Kuroda) *Sei* T_1 *ein selbstadjungierter Operator in* $L_2(\mathbb{R}^m)$ *mit* $\mathbf{m \leq 3}$ *und* $D(T_1) \subset D(-\Delta)$ *(also z. B. ein Schrödingeroperator mit „vernünftigen“ elektromagnetischen Potentialen),* V *der Multiplikationsoperator mit einer reellen Funktion* $V \in L_1(\mathbb{R}^m) \cap L_2(\mathbb{R}^m)$ *(also z. B.* $|V(x)| \leq C(1+|x|)^{-\varepsilon-m}$*). Dann ist* $T_2 := T_1 + V$ *selbstadjungiert, und die Wellenoperatoren* $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ *existieren und sind vollständig.*

Beweis. V ist $-\Delta$–beschränkt mit Schranke 0 (vgl. Mathematische Methoden der Quantenmechanik, Satz 10.13; dafür genügt sogar gleichmäßig lokal quadratisch integrierbar). Da $-\Delta$ bezüglich T_1 relativ beschränkt ist, ist V auch T_1–beschränkt mit Schranke 0. Also ist T_2 selbstadjungiert auf $D(T_1)$. Es bleibt zu zeigen, daß die Differenz der Resolventen in B_1 liegt. Dies folgt aus

$$\begin{aligned}(T_1-z)^{-1} - (T_2-z)^{-1} &= (T_1-z)^{-1} V (T_2-z)^{-1} \\ = \Big[(T_1-z)^{-1}(-\Delta+1)\Big] &\Big\{(-\Delta+1)^{-1}(\operatorname{sgn} V)|V|^{1/2}\Big\} \Big\{|V|^{1/2}(-\Delta+1)^{-1}\Big\} \\ &\times \Big[(-\Delta+1)\,(T_2-z)^{-1}\Big],\end{aligned}$$

da die Operatoren in $[\ldots]$ beschränkt sind (für den letzten ist dies die T_2–Beschränktheit von $-\Delta$, die sich aus der T_1–Beschränktheit ergibt; der erste ist bis auf Abschließung gleich der Adjungierten von $(-\Delta+1)\,(T_1-\overline{z})^{-1}$) und die Operatoren in $\{\ldots\}$ Hilbert–Schmidt–Operatoren sind (dies folgt daraus, daß für $\mathbf{m \leq 3}$ der Operator $(-\Delta+1)^{-1}$ die Faltung mit einer L_2–Funktion ist). □

Um ein Resultat zu erhalten, das auch in höheren Dimensionen anwendbar ist, müssen wir etwas weiter ausholen.

Seien A und B selbstadjungierte Operatoren. Wir sagen: A ist B ***untergeordnet*** (d. h. A ist in einem abgeschwächten Sinn „kleiner“ als B), wenn es Borel–meßbare Funktionen

$$f,\, g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad f(s) \geq 1, \qquad f(s) \longrightarrow \infty \quad \text{für} \quad |s| \longrightarrow \infty$$

gibt mit

$$D\Big(g(B)\Big) \subset D\Big(f(A)\Big),$$

d. h. insbesondere, daß $f(A)$ bezüglich $g(B)$ beschränkt ist. (Hierzu kann natürlich o. E. $g(s) \geq 1$ angenommen werden, d. h. $g(B)$ ist stetig invertierbar.) — Ist A relativ beschränkt bezüglich B, so ist offenbar A dem Operator B untergeordnet (z. B. $f = g = |\,\mathrm{id}\,| + 1$).

Hilfssatz 5.14 a) *Ist* $\tilde{f} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ *Borel–meßbar mit* $|\tilde{f}(s)| \longrightarrow \infty$ *für* $|s| \longrightarrow \infty$ *und gilt*

$$R\Big(E_B(I)\Big) \subset D\Big(f(A)\Big) \qquad \textit{für jedes beschränkte Intervall } I\,,$$

so ist A *dem Operator* B *untergeordnet mit der Funktion* $f = |\tilde{f}| + 1$ *und einer geeigneten Funktion* g *.*

Speziell: Ist $R\Big(E_B(I)\Big) \subset D(A)$ *für jedes beschränkte Intervall* I *, so ist* A *dem Operator* B *untergeordnet mit* $f = |\,\mathrm{id}\,| + 1$ *und einer geeigeneten Funktion* g *.*

b) *Ist der Operator* T_2 *dem Operator* T_1 *untergeordnet, so gilt für jedes beschränkte Intervall* I

$$\lim_{a\to\infty} \Big\|\Big(I - E_2((-a,a])\Big)E_1(I)\Big\| = 0\,.$$

Beweis. a) Zum Beweis der ersten Aussage sei mit $f = |\tilde{f}| + 1$

$$c_n := \Big\|f(A)E_B\Big((-n-1,-n] \cup (n,n+1]\Big)\Big\|, \qquad n \in \mathbb{N}_0$$

(der Operator auf der rechten Seite ist tatsächlich beschränkt, da er nach Voraussetzung überall definiert und abgeschlossen ist).

Wir definieren

$$g(s) := (n+1)c_n \qquad \text{für} \quad s \in (-n-1,-n] \cup (n,n+1]\,, \quad n \in \mathbb{N}_0\,.$$

Dann gilt für alle $x \in D(g(B))$

$$\begin{aligned}
&\sum_n \Big\|f(A)E_B\Big((-n-1,-n] \cup (n,n+1]\Big)x\Big\| \\
&\quad\le \sum_n c_n \Big\|E_B\Big((-n-1,-n] \cup (n,n+1]\Big)x\Big\| \\
&\quad\le \Big\{\sum_n \frac{1}{(n+1)^2} \sum (n+1)^2 c_n^2 \Big\|E_B\Big((-n-1,-n] \cup (n,n+1]\Big)x\Big\|^2\Big\}^{1/2} \\
&\quad= \Big\{\sum_n \frac{1}{(n+1)^2}\Big\}^{1/2} \Big\|g(B)x\Big\|\,.
\end{aligned}$$

Also ist $\sum_n f(A)E_B\Big((-n-1,-n] \cup (n,n+1]\Big)x$ konvergent, und somit ist (wegen der Abgeschlossenheit von $f(A)$) $x = \sum\limits_n E_B\Big((-n-1,-n] \cup (n,n+1]\Big)x \in D(f(A))\,.$

Die zweite Aussage von Teil a) folgt aus der ersten mit $\tilde{f}(s) = \mathrm{id}$, also $\tilde{f}(A) = A$.

b) Es sei $F : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ definiert durch

$$F(s) := \inf_{|\sigma|\ge s} f(\sigma)\,, \quad \text{also} \quad 1 \le F(s) \le f(s)\,,\ F(s) \nearrow \infty \ \text{ für } \ |s| \longrightarrow \infty\,.$$

Wegen

$$
\begin{aligned}
&R\Big(g(T_1)^{-1}\Big) \;=\; D(g(T_1)) \;\subset\; D(f(T_2)) \;\subset\; D(F(T_2))\,, \\
&\Big(I - E_2((-a,a])\Big)D(F(T_2)) \;\subset\; D(F(T_2))\,, \\
&F(T_2)g(T_1)^{-1} \in B(H)
\end{aligned}
$$

gilt dann

$$
\begin{aligned}
&\Big\|\Big(I - E_2((-a,a])\Big)E_1(I)\Big\| \\
&\quad = \quad \Big\|F(T_2)^{-1}F(T_2)\,\Big(I - E_2((-a,a])\Big)g(T_1)^{-1}g(T_1)E_1(I)\Big\| \\
&\quad \le \quad F(a)^{-1}\Big\|F(T_2)g(T_1)^{-1}g(T_1)E_1(I)\Big\| \\
&\quad \le \quad F(a)^{-1}\Big\|F(T_2)g(T_1)^{-1}\Big\|\ \sup\Big\{|g(s)| : s \in I\Big\} \\
&\quad \longrightarrow \quad 0 \qquad \text{für} \quad a \longrightarrow \infty\,.
\end{aligned}
$$

□

Satz 5.15 (M. S. Birman, 1968) *Sind T_1 und T_2 selbstadjungiert und gegenseitig untergeordnet mit*

$$
\Big(T_2E_2(I) - E_2(I)T_1\Big)E_1(I) \in B_1 \quad \textit{für jedes beschränkte Intervall } I\,,
$$

so existieren die Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ und $W_\pm(T_1, T_2, P_{2,ac})$ (und sind somit vollständig). Die Spurklassenbedingung ist z. B. sicher dann erfüllt, wenn für jedes beschränkte Intervall I $R(E_1(I)) \subset D(T_2)$ gilt und $(T_2 - T_1)E_1(I)$ ein Spurklassenoperator ist.

Beweis. a) Wir zeigen zuerst, daß die zunächst unsymmetrische Voraussetzung tatsächlich symmetrisch ist, d. h. für jedes beschränkte Intervall I gilt auch

$$
\Big(T_1E_1(I) - E_1(I)T_2\Big)E_2(I) \in B_1\,.
$$

Dies folgt aus

$$
\Big(T_1E_1(I) - E_1(I)T_2\Big)E_2(I) \;=\; \Big[-\Big(T_2E_2(I) - E_2(I)T_1\Big)E_1(I)\Big]^*,
$$

was sich sofort aus der für alle $x, y \in H$ gültigen Gleichung

$$\begin{aligned}
&\Big\langle \Big(T_1E_1(I) - E_1(I)T_2\Big)E_2(I)x\,,\, y\Big\rangle \\
&\quad = \Big\langle E_1(I)T_1E_1(I)E_2(I)x - E_1(I)E_2(I)T_2E_2(I)x\,,\, y\Big\rangle \\
&\quad = \Big\langle x\,,\, E_2(I)E_1(I)T_1E_1(I)y - E_2(I)T_2E_2(I)E_1(I)y\Big\rangle \\
&\quad = \Big\langle x\,,\, -\Big(T_2E_2(I) - E_2(I)T_1\Big)E_1(I)y\Big\rangle
\end{aligned}$$

ergibt.

b) Es bleibt die Existenz von $W_\pm(T_2, T_1, P_{1,ac})$ zu beweisen. Mit

$$\begin{aligned}
C_I &:= \Big(T_2E_2(I) - E_2(I)T_1\Big)E_1(I) \in B_1(H)\,, \\
J_I &:= E_2(I)E_1(I) \in B(H)
\end{aligned}$$

gilt für alle $x \in D(T_2)$ und $y \in D(T_1)$

$$\begin{aligned}
\langle x, C_I y\rangle &= \langle T_2x, E_2(I)E_1(I)y\rangle - \langle x, E_2(I)E_1(I)T_1y\rangle \\
&= \langle T_2x, J_Iy\rangle - \langle x, J_IT_1y\rangle\,.
\end{aligned}$$

Nach dem Satz von Pearson (Satz 5.7) existiert also

$$\begin{aligned}
&\operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT_2}E_2(I)\, e^{-itT_1}P_{1,ac}E_1(I) \\
&\quad = \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT_2}J_I\, e^{-itT_1}P_{1,ac} \qquad \text{für jedes beschränkte Intervall } I\,.
\end{aligned}$$

Wir zeigen zunächst, daß für jedes feste I und jedes $\varphi \in R(E_1(I)) \cap H_{1,ac}$ die Grenzwerte $\lim\limits_{t\to\pm\infty} e^{itT_2}e^{-itT_1}\varphi$ existieren. Sei also I fest und $\varphi \in R(E_1(I)) \cap H_{1,ac}$. Für jedes a mit $I \subset (-a, a]$ ist dann

$$e^{itT_2}E_2((-a,a])\, e^{-itT_1}\varphi = e^{itT_2}E_2((-a,a])\, e^{-itT_1}P_{1,ac}E_1((-a,a])\varphi\,,$$

und somit existiert

$$\lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2}E_2((-a,a])\, e^{-itT_1}\varphi \qquad \text{für jedes } a \text{ mit } I \subset (-a,a]\,.$$

Aus Hilfssatz 5.14 b folgt

$$\lim_{a\to\infty} \Big\|\Big(I - E_2((-a,a])\Big)E_1(I)\Big\| = 0\,. \tag{$*$}$$

Daraus folgt dann

$$\lim_{a\to\infty}\sup_t \left\| \Big(I - E_2((-a,a])\Big)\, e^{-itT_1}\varphi \right\| = 0\,,$$

und somit die Existenz von

$$\lim_{t\to\pm\infty} e^{itT_2}e^{-itT_1}\varphi\,,$$

denn es gilt

$$\begin{aligned}
&\left\| e^{isT_2}e^{-isT_1}\varphi \;-\; e^{itT_2}e^{-itT_1}\varphi \right\| \\
&\quad\le\quad \left\| e^{isT_2}\Big(I - E_2((-a,a])\Big)\, e^{-isT_1}\varphi \right\| + \left\| e^{itT_2}\Big(E_2((-a,a]) - I\Big)\, e^{-itT_1}\varphi \right\| \\
&\qquad\quad + \left\| e^{isT_2}E_2((-a,a])\, e^{-isT_1}\varphi \;-\; e^{itT_2}E_2((-a,a])\, e^{-itT_1}\varphi \right\| \\
&\quad\longrightarrow\quad 0 \quad \text{für} \quad s,t\longrightarrow\pm\infty\,,\ a\longrightarrow\infty\,.
\end{aligned}$$

Also ist $R(E_1(I))\cap H_{1,ac} \subset D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ für jedes beschränkte I, und somit $H_{1,ac} \subset D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$, da $D(\Omega_\pm(T_2,T_1))$ abgeschlossen ist. □

Wir benutzen die folgende Bezeichnung: Eine Funktion $c(\cdot)\in L_{p,\mathrm{lok}}(\mathbb{R}^m)$ liegt in $\ell_q(L_p(\mathbb{R}^m))$, wenn mit Würfeln Q_γ der Kantenlänge 1 um die Punkte $\gamma = (\gamma_1,\dots,\gamma_m) \in \mathbb{Z}^m$ gilt $\sum_\gamma \|c(\cdot)\|^q_{L_p(Q_\gamma)} < \infty$.

Satz 5.16 *In $L_2(\mathbb{R}^m)$ sei der Operator T_1 definiert durch*

$$T_1 = F^{-1}M_hF \qquad \textit{mit} \qquad |h(x)|\longrightarrow\infty \quad \textit{für} \quad |x|\longrightarrow\infty\,,$$

T_2 sei ein weiterer selbstadjungierter Operator in $L_2(\mathbb{R}^m)$ so, daß T_1 und T_2 gegenseitig untergeordnet sind. Für alle $f\in R(E_1(I))$ mit beschränkten Intervallen I gelte

$$(T_2 - T_1)f \;=\; \sum_{|\alpha|\le k} c_\alpha(\cdot)\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha}\, f$$

mit $c_\alpha(\cdot)\in \ell_1(L_2(\mathbb{R}^m))$. Dann existieren $W_\pm(T_2,T_1,P_{1,ac})$ und sind vollständig.

Hilfssatz 5.17 *Ist $g\in L_2(\mathbb{R}^m)$ mit $\operatorname{supp} g\subset Q_\gamma$ und $K\subset\mathbb{R}^m$ kompakt, so gilt*

$$M_gFM_{\chi_K}\in B_1 \qquad \textit{mit} \quad \|M_gFM_{\chi_K}\|_1 \le D_K\|g\|_{L_2}\,,$$

wobei D_K von γ unabhängig ist.

Anmerkung zu Hilfssatz 5.17. Dies ist ein Spezialfall wesentlich allgemeinerer Resultate; vgl. z. B. B. Simon „Trace ideals and their applications“, Theorem 4.5 (Birman–Solomjak): Sind $f, h \in \ell_p(L_2(\mathbb{R}^m))$ mit $1 \leq p \leq 2$, so gilt $M_f F M_h \in B_p(L_2(\mathbb{R}^m))$ mit $\|M_f F M_h\|_p \leq C_p\Big(\sum\limits_\gamma \|f\|^p_{L_2(Q_\gamma)}\Big)^{1/p}\Big(\sum\limits_\gamma \|h\|_{L_2(Q_\gamma)}\Big)^{1/p}$.

Beweis von Hilfssatz 5.17. Für $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$ und $k > \dfrac{m}{2}$ gilt

$$\begin{aligned} M_g F M_{\chi_K} f &= M_g M_{\varphi_\gamma} F(M_{\chi_K} f) \\ &= M_g F M_{(1+|\cdot|)^{-k}} F^{-1} F M_{(1+|\cdot|)^k} F^{-1} M_{\varphi_\gamma} F(M_{\chi_K} f)\,, \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} &\varphi_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m), \quad \varphi_0(x) = 1 \quad \text{in} \quad Q_0, \quad \operatorname{supp}\varphi_0 \subset \Big\{x \in \mathbb{R}^m : d(x, Q_0) \leq 1\Big\}\,, \\ &\varphi_\gamma \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)\,, \quad \varphi_\gamma(x) := \varphi_0(x-\gamma)\,. \end{aligned}$$

Hier ist alles sinnvoll definiert, denn es gilt

$$\begin{aligned} &\chi_K f \in L_2(\mathbb{R}^m) \quad \text{mit kompaktem Träger}\,, \\ &F\chi_K f \in C^\infty(\mathbb{R}^m) \cap L_2(\mathbb{R}^m)\,, \\ &\varphi_\gamma F \chi_K f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)\,, \\ &F^{-1}\varphi_\gamma F\chi_K f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m) \subset D(M_{(1+|\cdot|)^k})\,. \end{aligned}$$

Nun ist $FM_{(1+|\cdot|)^{-k}}F^{-1}$ die Faltung mit der L_2–Funktion $F(1+|\cdot|)^{-k}$, also ist

$$M_g F M_{(1+|\cdot|)^{-k}} F^{-1} \quad \text{ein Hilbert–Schmidt–Operator mit } |||\cdot||| \leq C_k' \|g\|_{L_2}\,.$$

Da $F^{-1}M_{\varphi_\gamma}F$ der Faltungsoperator mit $\psi_\gamma := F^{-1}\varphi_\gamma \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ ist, ist

$$M_{(1+|\cdot|)^k} F^{-1} M_{\varphi_\gamma} F M_{\chi_K}$$

der Integraloperator mit dem Kern

$$(1+|x|)^k \psi_\gamma(x-y)\chi_K(y)\,.$$

Offenbar gilt $\psi_\gamma(x) = e^{ix\gamma}\psi_0(x)$, $|\psi_\gamma(x)| = |\psi_0(x)| \le C_\ell(1+|x|)^{-\ell}$ für alle ℓ, und somit für $l > k + \frac{m}{2} > m$

$$\begin{aligned}
|||M_{(1+|\cdot|)^k}F^{-1}M_{\varphi_\gamma}FM_{\chi_K}|||^2 &\le C_\ell \int\int (1+|x|)^{2k}(1+|x-y|)^{-2\ell}\chi_K(y)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x \\
&\le C_\ell \int (1+|x|)^{2k} C_{K,\ell}(1+|x|)^{-2\ell}\,\mathrm{d}x \\
&\le C_K^2
\end{aligned}$$

(dabei hängt C_K zunächst auch von ℓ und somit von k ab, diese können aber unabhängig von g und K fest gewählt werden; Entsprechendes gilt für das oben gefundene C_k).

Der Gesamtoperator ist also in B_1, und die $\|\cdot\|_1$–Norm läßt sich durch das Produkt der Hilbert–Schmidt–Normen der beiden Faktoren abschätzen:

$$\|M_gFM_{\chi_K}\|_1 \le |||M_gFM_{(1+|\cdot|)^{-k}}F^{-1}|||\ |||M_{(1+|\cdot|)^k}F^{-1}M_{\varphi_\gamma}FM_{\chi_K}||| \le D_K\|g\|_{L_2}. \qquad \square$$

Beweis von Satz 5.16. Nach Satz 5.15 genügt es zu zeigen, daß $(T_2 - T_1)E_1(I) \in B_1$ gilt. Hierfür genügt es natürlich

$$M_{c_\alpha}\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha}E_1(I) \in B_1 \qquad \text{für alle} \quad \alpha$$

zu beweisen. Offenbar gilt (dabei ist $K := \chi_{\{y\in\mathbb{R}^m : h(y)\in I\}}$ kompakt wegen $|h(x)| \to \infty$ für $|x| \to \infty$)

$$\begin{aligned}
M_{c_\alpha}\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha}E_1(I) &= M_{c_\alpha}F^{-1}M_{\mathrm{id}^\alpha}M_{\chi_{\{y\in\mathbb{R}^m:h(y)\in I\}}}F \\
&= \Big\{M_{c_\alpha}F^{-1}M_{\chi_K}\Big\}\Big\{M_{\mathrm{id}^\alpha}M_{\chi_K}F\Big\}.
\end{aligned}$$

Hier ist der zweite Faktor beschränkt. Für den ersten gilt

$$M_{c_\alpha}F^{-1}M_{\chi_K} = \sum_\gamma \Big(M_{c_\alpha}M_{\chi_{Q_\gamma}}\Big)F^{-1}M_{\chi_K}.$$

Für jeden Summanden gilt nach obigem Hilfssatz 5.17

$$\|(M_{c_\alpha}M_{\chi_{Q_\gamma}})F^{-1}M_{\chi_K}\|_1 \le D_K\|M_{c_\alpha}\|_{L_2(Q_\gamma)}.$$

Nach Satz 5.6 und wegen $c_\alpha \in \ell_1(L_2(\mathbb{R}^m))$ ist somit die Summe in B_1. $\square$

Anhang zu 5

Abschließend zeigen wir noch, daß man, wenn man in Satz 5.15 B_1 durch B_∞ ersetzt, die folgende Verallgemeinerung der Kriterien für die Invarianz des wesentlichen Spektrums erhält.

Satz 5.18 *Sind T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren, die gegenseitig untergeordnet sind mit*

$$\Big(T_2E_2(I) - E_2(I)T_1\Big)E_1(I) \in B_\infty \quad \textit{für jedes beschränkte Intervall } I\,,$$

so haben T_1 und T_2 das gleiche wesentliche Spektrum.

Beweis. Wie im Teil a) des Beweises von Satz 5.15 zeigt man, daß auch $\Big(T_1E_1(I) - E_1(I)T_2\Big)E_2(I) \in B_\infty$ für jedes beschränkte Intervall I gilt. Es genügt deshalb, z. B. $\sigma_e(T_1) \subset \sigma_e(T_2)$ zu beweisen.

Sei $\lambda \in \sigma_e(T_1)$, $I = (\lambda - 1, \lambda + 1)$, (x_n) eine singuläre Folge von T_1 und λ, die in $R(E_1(I))$ liegt. Wir zeigen, daß $(E_2(I_a)x_n)$ mit $I_a = (-a, a)$ für hinreichend großes a eine singuläre Folge von T_2 und λ ist. Zunächst gilt offensichtlich

$$E_2(I_a)x_n \xrightarrow{w} 0 \qquad \text{für jedes} \quad a > 0\,.$$

Aus Hilfssatz 5.14 b wissen wir

$$\Big\|\Big(I - E_2(I_a)\Big)E_1(I)\Big\| < \frac{1}{2} \quad \text{für hinreichend großes } a\,.$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \|E_2(I_a)x_n\| &= \Big\|x_n - \Big(I - E_2(I_a)\Big)E_1(I)x_n\Big\| \\ &\geq \|x_n\| - \Big\|\Big(I - E_2(I_a)\Big)E_1(I)x_n\Big\| > \frac{1}{2}\|x_n\| \not\to 0 \end{aligned}$$

und schließlich, da $\Big(T_2E_2(I_a) - E_2(I_a)T_1\Big)E_1(I)$ kompakt ist,

$$\begin{aligned} \Big\|(T_2 - \lambda)E_2(I_a)x_n\Big\| &\leq \Big\|\Big(T_2E_2(I_a) - E_2(I_a)T_1\Big)E_1(I)x_n\Big\| + \Big\|E_2(I_a)\,(T_1 - \lambda)x_n\Big\| \\ &\longrightarrow 0 \qquad \text{für} \qquad n \longrightarrow \infty\,. \end{aligned}$$

□

6 Ein eindimensionales Streuproblem

Wir betrachten in diesem Abschnitt das folgende einfache Streuproblem in $L_2(\mathbb{R})$. T_1 sei definiert durch

$$T_1 = -\Delta = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \quad \text{auf dem üblichen Definitionsbereich} \quad D(T_1) = W_{2,2}(\mathbb{R})\,.$$

Der gestörte Operator T_2 sei

$$T_2 \;=\; -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + q$$

mit $q \in L_{2,0}(\mathbb{R})$, d. h. q ist aus $L_2(\mathbb{R})$ und hat kompakten Träger; a sei so gewählt, daß $\operatorname{supp} q \subset [-a, a]$ gilt. T_2 ist selbstadjungiert mit $D(T_2) = D(T_1)$ (vgl. Mathematische Methoden der Quantenmechanik, Satz 10.13). Nach dem Satz von Kuroda (Satz 5.13) ist klar, daß die Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1) = W_\pm(T_2, T_1, I)$ existieren und vollständig sind. (Tatsächlich würde hierfür nach Satz 5.16 genügen, daß $\sum_{n\in\mathbb{Z}} \left\{ \int_n^{n+1} |q(x)|^2 \,\mathrm{d}\,x \right\}^{1/2} < \infty$ ist. Auch die folgenden Überlegungen lassen sich entsprechend verallgemeinern [z. B. auch auf $q \in L_1(\mathbb{R})$], sind dann aber etwas komplizierter.)

6.1 Streumatrix und Spektraldarstellung

Definieren wir

$$U_1 : L_2(\mathbb{R}) \;\longrightarrow\; L_2(0,\infty) \oplus L_2(0,\infty) = L_2(0,\infty)^2$$

durch

$$U_1 f(k) = \hat{f}(k) = \begin{pmatrix} \hat{f}_1(k) \\ \hat{f}_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} (2\pi)^{-1/2} \int_{-N}^{N} e^{-ikx} f(x)\,\mathrm{d}x \\ \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} (2\pi)^{-1/2} \int_{-N}^{N} e^{ikx} f(x)\,\mathrm{d}x \end{pmatrix},$$

so ist offenbar U_1 unitär mit

$$U_1^{-1} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}(x) = \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} (2\pi)^{-1/2} \int_0^N \left\{ e^{ikx} g_1(k) + e^{-ikx} g_2(k) \right\} \mathrm{d}k\,.$$

Der ***Beweis*** ergibt sich aus der Tatsache, daß dies lediglich eine etwas modifizierte Darstellung der Fouriertransformation ist. Hieraus folgt auch

$$U_1 T_1 U_1^{-1} = M_{\mathrm{id}^2} \qquad \text{in} \quad L_2(0,\infty)^2 .$$

Dies ist im wesentlichen das, was man als eine ***Spektraldarstellung*** von T_1 bezeichnet (dabei wird allerdings verlangt, daß $UTU^{-1} = M_{\mathrm{id}}$ ist, was natürlich leicht durch eine zusätzliche Transformation erreichbar wäre). Es sei angemerkt, daß die Funktionen $e^{\mp ikx}$ Lösungen der Differentialgleichung $(\tau_1 - \lambda)u = 0$ sind mit $\tau_1 u = -u''$ und $\lambda = k^2$, sogenannte ***verallgemeinerte Eigenfunktionen*** von T_1 zum verallgemeinerten Eigenwert $\lambda = k^2 \geq 0$.

Wir zeigen im nächsten Abschnitt, daß Lösungen $e_1(\cdot, k)$, $e_2(\cdot, k)$ von $(\tau_2 - k^2)u = 0$ mit $\tau_2 u = -u'' + qu$ existieren mit

$$e_1(x,k) = \begin{cases} e^{ikx} + r_1(k) e^{-ikx} & \text{für } x < -a\,, \\ t(k) e^{ikx} & \text{für } x > a\,, \end{cases}$$

$$e_2(x,k) = \begin{cases} t(k) e^{-ikx} & \text{für } x < -a\,, \\ e^{-ikx} + r_2(k) e^{ikx} & \text{für } x > a\,. \end{cases}$$

mit einer unitären [3] Matrix $\begin{pmatrix} t(k) & r_2(k) \\ r_1(k) & t(k) \end{pmatrix}$ so, daß

$$U_2 : L_2(\mathbb{R}) \longrightarrow L_2(0,\infty)^2 ,$$

$$U_2 f(k) = \tilde{f}(k) = \begin{pmatrix} \tilde{f}_1(k) \\ \tilde{f}_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} (2\pi)^{-1/2} \int_{-N}^{N} \overline{e_1(x,k)} f(x)\, \mathrm{d}x \\ \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} (2\pi)^{-1/2} \int_{-N}^{N} \overline{e_2(x,k)} f(x)\, \mathrm{d}x \end{pmatrix}$$

unitär ist mit

$$U_2^{-1} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix}(x) = \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} (2\pi)^{-1/2} \int_0^N \Big\{ e_1(x,k) g_1(k) + e_2(x,k) g_2(k) \Big\}\, \mathrm{d}k$$

(was wegen $\langle h, U_2^{-1} g\rangle_{L_2(0,\infty)^2} = \langle h, U_2^* g\rangle_{L_2(0,\infty)^2} = \langle U_2 h_1, g\rangle_{L_2(0,\infty)^2}$ leicht auch aus der Darstellung von U_2 folgt) und

$$U_2 T_{2,+} U_2^{-1} = M_{\mathrm{id}^2}\,, \qquad \text{wobei} \quad T_{2,+} = T_2 E_2((0,\infty)) \quad \text{ist,}$$

[3] Die Unitarität braucht nicht gesondert bewiesen zu werden, sie folgt aus der Tatsache, daß diese Matrix gleich der Streumatrix ist.

d. h. U_2 ist im gleichen Sinn eine Spektraldarstellung von $T_{2,+}$ wie U_1 eine solche von T_1 ist.

Für die Wellenoperatoren $W_\pm = W_\pm(T_2, T_1)$, deren Existenz und Vollständigkeit uns z. B. nach dem Satz von Kuroda (Satz 5.13) bekannt ist, gilt

$$\begin{aligned} U_2 W_\pm U_1^{-1} e^{-it\,\mathrm{id}^2} &= U_2 W_\pm e^{itT_1} U_1^{-1} = U_2 e^{-itT_2} W_\pm U_1^{-1} \\ &= e^{-it\,\mathrm{id}^2} U_2 W_\pm U_1^{-1}\,, \end{aligned}$$

d. h. $U_2 W_\pm U_1^{-1}$ ist mit $e^{-it\,\mathrm{id}^2}$ für alle $t \in \mathbb{R}$ vertauschbar. Mit den nun schon bekannten Techniken folgt, daß $U_2 W_\pm U_1^{-1}$ mit M_{id} (bzw. dessen Spektralschar $M_{\chi_{(-\infty,s]}}$ für jedes $s \in \mathbb{R}$) vertauschbar ist. Nach Satz 3.13 (mit $H = \mathbb{C}^2$) ist also

$$\begin{aligned} U_2 W_\pm U_1^{-1} &= \text{Multiplikationsoperator mit einer } 2\times 2\text{–matrixwertigen} \\ &\quad\ \text{Funktion } w^\pm(\cdot)\,, \\ w^\pm(k) &= \begin{pmatrix} w_{11}^\pm(k) & w_{12}^\pm(k) \\ w_{21}^\pm(k) & w_{22}^\pm(k) \end{pmatrix}; \end{aligned}$$

da $W_\pm$ isometrisch ist, muß $w^\pm(k)$ unitär sein. Also ist die Streumatrix

$$\begin{aligned} U_1 S U_1^{-1} &= U_1 W_+^* W_- U_1^{-1} = (U_1 W_+^* U_2^{-1})\,(U_2 W_- U_1^{-1}) \\ &= (U_2 W_+ U_1^{-1})^*\,(U_2 W_- U_1^{-1}) \end{aligned}$$

der Multiplikationsoperator mit der matrixwertigen Funktion

$$\hat{S}(k) = w^+(k)^*\, w^-(k)\,.$$

Es ist das Ziel dieses Abschnitts, $\hat{S}(k)$ mit Hilfe der Größen $t(k)$, $r_1(k)$ und $r_2(k)$ darzustellen.

Für jedes $f \in L_2(\mathbb{R})$ gilt

$$U_2 W_\pm f = (U_2 W_\pm U_1^{-1}) U_1 f = w^\pm(\cdot) \begin{pmatrix} \hat{f}_1(\cdot) \\ \hat{f}_2(\cdot) \end{pmatrix},$$

und damit erhalten wir nach Definition von $W_\pm$

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{t\to\pm\infty} \|W_\pm f - e^{itT_2} e^{-itT_1} f\| \\ &= \lim_{t\to\pm\infty} \|W_\pm f - U_2^{-1} e^{it\,\mathrm{id}^2} U_2 U_1^{-1} e^{-it\,\mathrm{id}^2} U_1 f\| \\ &= \lim_{t\to\pm\infty} \|U_2^{-1} e^{-it\,\mathrm{id}^2} U_2 W_\pm f - U_1^{-1} e^{-it\,\mathrm{id}^2} U_1 f\|\,. \end{aligned}$$

Vollständig ausgeschrieben bedeutet das:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Bigg| \int_0^{\infty} \Big\{ & e_1(x,k) e^{-itk^2} \Big(w_{11}^{\pm}(k) \hat{f}_1(k) + w_{12}^{\pm}(k) \hat{f}_2(k) \Big) \\
& + e_2(x,k) e^{-itk^2} \Big(w_{21}^{\pm}(k) \hat{f}_1(k) + w_{22}^{\pm}(k) \hat{f}_2(k) \Big) \\
& - e^{-ik(kt-x)} \hat{f}_1(k) - e^{-ik(kt+x)} \hat{f}_2(k) \Big\} \, \mathrm{d}k \Bigg|^2 \mathrm{d}x \\
\longrightarrow 0 \quad & \text{für} \quad t \to \pm\infty \quad (\text{die } +/- \text{ rechts und links sind gekoppelt})\,.
\end{aligned}
$$

Insbesondere gilt also

$$
\int_{-\infty}^{-a} |\ldots|^2 \, \mathrm{d}x \longrightarrow 0 \quad \text{und} \quad \int_a^{\infty} |\ldots|^2 \, \mathrm{d}x \longrightarrow 0 \text{ für } t \longrightarrow \pm\infty\,.
$$

Aber in diesen Bereichen können wir die $e_j(k,x)$ durch die oben angegebenen expliziten Ausdrücke ersetzen. Wir erhalten somit im ersten Fall

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{-a} \Bigg| \int_0^{\infty} \Big\{ & e^{-ik(kt-x)} \Big(w_{11}^{\pm}(k) \hat{f}_1(k) + w_{12}^{\pm}(k) \hat{f}_2(k) \Big) \\
& + e^{-ik(kt+x)} r_1(k) \Big(w_{11}^{\pm}(k) \hat{f}_1(k) + w_{12}^{\pm}(k) \hat{f}_2(k) \Big) \\
& + e^{-ik(kt+x)} t(k) \Big(w_{21}^{\pm}(k) \hat{f}_1(k) + w_{22}^{\pm}(k) \hat{f}_2(k) \Big) \\
& - e^{-ik(kt-x)} \hat{f}_1(k) - e^{-ik(kt+x)} \hat{f}_2(k) \Big\} \, \mathrm{d}k \Bigg|^2 \mathrm{d}x \\
\longrightarrow 0 \quad & \text{für} \quad t \longrightarrow \pm\infty\,.
\end{aligned}
$$

Die Terme mit $e^{-ik(kt-x)}$ stellen „nach rechts laufende Wellen“ dar, in dem Sinne, daß für jedes $b \in \mathbb{R}$ ihr Quadratintegral über $(-\infty, b)$ für $t \longrightarrow +\infty$ gegen Null geht (das zeigt man z. B., indem man zunächst für $\varphi \in C_0^{\infty}(0,\infty)$ zeigt, daß $\int_{-\infty}^b |\psi_t(x)|^2 \, \mathrm{d}x \longrightarrow 0$ gilt für $t \longrightarrow \infty$, $\psi_t(x) := \int e^{-ik(kt-x)} \varphi(k) \, \mathrm{d}k$; dazu zeigt man mit den Methoden von Satz 3.15 z. B. $(1+|x|)\,|\psi_t(x)| \le c|t|^{-1}$ für $x < b$ und $t > 1$). Damit ergibt sich

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{-a} \Bigg| \int_0^{\infty} e^{-ik(kt+x)} \Big\{ & r_1(k) \Big(w_{11}^{+}(k) \hat{f}_1(k) + w_{12}^{+}(k) \hat{f}_2(k) \Big) \\
& + t(k) \Big(w_{21}^{+}(k) \hat{f}_1(k) + w_{22}^{+}(k) \hat{f}_2(k) \Big) - \hat{f}_2(k) \Big\} \, \mathrm{d}k \Bigg|^2 \mathrm{d}x \\
\longrightarrow 0 \quad & \text{für} \quad t \longrightarrow +\infty\,.
\end{aligned}
$$

Entsprechend stellen die Terme mit $e^{-ik(kt+x)}$ „nach links laufende“ Wellen dar, deren Quadratintegral über $(-\infty,-a)$ für $t\longrightarrow-\infty$ verschwindet. Damit folgt

$$\int_{-\infty}^{-a}\left|\int_0^\infty e^{-ik(kt-x)}\Big\{\Big(w_{11}^-(k)\hat f_1(k)+w_{12}^-(k)\hat f_2(k)\Big)-\hat f_1(k)\Big\}\,\mathrm{d}k\right|^2\mathrm{d}x$$
$$\longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t\longrightarrow-\infty\,.$$

Und da die im Integral verbliebenen Wellen nach links bzw. rechts laufen, kann für $t\longrightarrow+\infty$ bzw. $t\longrightarrow-\infty$ das Integral $\int_{-\infty}^{-a}$ durch $\int_{\mathbb{R}}$ ersetzt werden, d. h. es gilt

$$\Big\|F\Big(e^{-it|\cdot|^2}\Big\{r_1(\cdot)\,\Big(w_{11}^+(\cdot)\hat f_1(\cdot)+w_{12}^+(\cdot)\hat f_2(\cdot)\Big)+t(\cdot)\,\Big(w_{21}^+(\cdot)\hat f_1(\cdot)+w_{22}^+(\cdot)\hat f_2(\cdot)\Big)-\hat f_2(\cdot)\Big\}\Big)\Big\|$$
$$\longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t\longrightarrow+\infty,$$
$$\Big\|F^{-1}\Big(e^{-it|\cdot|^2}\Big\{w_{11}^-(\cdot)\hat f_1(\cdot)+w_{12}^-(\cdot)\hat f_2(\cdot)-\hat f_1(\cdot)\Big\}\Big)\Big\|$$
$$\longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad t\longrightarrow-\infty\,.$$

Tatsächlich sind diese Ausdrücke von t unabhängig, d. h. es gilt für f. a. $k\in(0,\infty)$

$$\begin{aligned}\hat f_1(k) &= w_{11}^-(k)\hat f_1(k)+w_{12}^-(k)\hat f_2(k)\,,\\ \hat f_2(k) &= r_1(k)\Big(w_{11}^+(k)\hat f_1(k)+w_{12}^+(k)\hat f_2(k)\Big)+t(k)\Big(w_{21}^+(k)\hat f_1(k)+w_{22}^+(k)\hat f_2(k)\Big)\,.\end{aligned}$$

Betrachtet man entsprechend die Integrale $\int_a^\infty$, so folgt für f. a. $k\in(0,\infty)$

$$\begin{aligned}\hat f_2(k) &= w_{21}^-(k)\hat f_1(k)+w_{22}^-(k)\hat f_2(k)\,,\\ \hat f_1(k) &= t(k)\Big(w_{11}^+(k)\hat f_1(k)+w_{12}^+(k)\hat f_2(k)\Big)+r_2(k)\Big(w_{21}^+(k)\hat f_1(k)+w_{22}^+(k)\hat f_2(k)\Big)\,.\end{aligned}$$

Da dies für alle f gilt, folgt

$$w^-(k)=\begin{pmatrix} w_{11}^-(k) & w_{12}^-(k)\\ w_{21}^-(k) & w_{22}^-(k)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} t(k) & r_2(k)\\ r_1(k) & t(k)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} w_{11}^+(k) & w_{12}^+(k)\\ w_{21}^+(k) & w_{22}^+(k)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}.$$

Da $w^+(k)$ unitär ist, folgt also

$$w^+(k)^*=w^+(k)^{-1}=\begin{pmatrix} t(k) & r_2(k)\\ r_1(k) & t(k)\end{pmatrix}$$

und somit

$$\hat{S}(k) = w^+(k)^* w^-(k) = \begin{pmatrix} t(k) & r_2(k) \\ r_1(k) & t(k) \end{pmatrix},$$

womit insbesondere auch die Unitarität dieser Matrix bewiesen ist. Damit ist nun die Bedeutung der Koeffizienten $t(\cdot)$, $r_1(\cdot)$ und $r_2(\cdot)$ klar:

- $t(k)$ ist, für beide Richtungen, der ***Transmissionskoeffizient***, d. h. $|t(k)|^2$ ist der Anteil der einlaufenden Welle, der durchläuft (transmittiert wird); außerdem wird je nach $\arg t(k)$ die Phase verschoben.
- $r_j(k)$ sind die ***Reflexionskoeffizienten***: $|r_1(k)|^2$ ist der Anteil einer nach rechts laufenden Welle, der reflektiert wird; entsprechendes gilt für $|r_2(k)|^2$ und nach links laufende Wellen. Außerdem gibt $\arg r_j(\cdot)$ die Phasenverschiebung an.

6.2 Konstruktion der Spektraldarstellung von $\mathbf{T_2}$

Aus der Theorie der Sturm–Liouville–Operatoren wissen wir: Ist $z \in \varrho(T_2)$ und sind v_1, v_2 Lösungen von $-v'' + qv = zv$ mit v_1 rechts in $L_2(\mathbb{R})$ und v_2 links in $L_2(\mathbb{R})$, so ist die Resolvente $R_z = (T_2 - z)^{-1}$ gegeben durch

$$R_z f(x) = W(v_1, v_2)^{-1} \left\{ v_1(x) \int_{-\infty}^{x} v_2(y) f(y)\, \mathrm{d}y + v_2(x) \int_{x}^{\infty} v_1(y) f(y)\, \mathrm{d}y \right\}$$

für alle $f \in L_2(\mathbb{R})$, wobei

$$W(v, w) \;=\; v(x)w'(x) - v'(x)w(x)$$

die ***Wronski–Determinante*** von v und w ist. Sie ist für Lösungen v und w von $-u''+qu = zu$ konstant und genau dann $\neq 0$, wenn $\{v, w\}$ ein Fundamentalsystem ist. Für $z \in \mathbb{C}\backslash(-\infty, 0]$ sei $\sqrt{z}$ so definiert, daß gilt

$$\operatorname{Re} \sqrt{z} > 0; \quad \text{dann ist} \quad \operatorname{Im} \sqrt{z} \gtrless 0 \quad \text{für} \quad \operatorname{Im} z \gtrless 0\,.$$

Spezielle Lösungen v_1, v_2 von $-v'' + qv = zv$ für $z \in \mathbb{C}\backslash(-\infty, 0]$ sind offenbar gegeben durch

$$v_1(x, z) \;=\; \begin{cases} a_1(z)e^{i\sqrt{z}x} + b_1(z)e^{-i\sqrt{z}x} & \text{für } x < -a\,, \\ e^{i\sqrt{z}x} & \text{für } x > a\,, \end{cases}$$

$$v_2(x, z) \;=\; \begin{cases} e^{-i\sqrt{z}x} & \text{für } x < -a\,, \\ a_2(z)e^{-i\sqrt{z}x} + b_2(z)e^{i\sqrt{z}x} & \text{für } x > a\,. \end{cases}$$

Durch die Vorgabe von $v_1 = \exp(i\sqrt{z}x)$ bzw. $v_2 = \exp(-i\sqrt{z}x)$ für $x > a$ bzw. für $x < -a$ sind $v_j(x, \cdot)$ und somit die Koeffizienten $a_j(\cdot)$ und $b_j(\cdot)$ eindeutig bestimmt und analytisch in $\mathbb{C}\backslash(-\infty, 0]$.

Für $\operatorname{Im} z > 0$ ist

$$v_1(\cdot, z) \in L_2(c, \infty), \quad v_2(\cdot, z) \in L_2(-\infty, c) \qquad \text{für jedes} \quad c \in \mathbb{R}.$$

Für $\operatorname{Im} z < 0$ sind $\overline{v_j(\cdot, \overline{z})}$ Lösungen von $-v'' + qv = zv$, und es gilt wieder

$$\overline{v_1(\cdot, \overline{z})} \in L_2(c, \infty), \quad \overline{v_2(\cdot, \overline{z})} \in L_2(-\infty, c) \quad \text{für jedes } c \in \mathbb{R}.$$

Also hat die Resolvente $(T_2 - z)^{-1}$ für $\operatorname{Im} z > 0$ den Kern

$$R(x, y; z) = W(z)^{-1} \begin{cases} v_1(x, z)v_2(y, z) & \text{für } y \leq x, \\ v_2(x, z)v_1(y, z) & \text{für } y > x \end{cases} \qquad \text{mit} \quad W(z) := W(v_1(\cdot, z), v_2(\cdot, z)).$$

(Für $\operatorname{Im} z < 0$ erhält man den entsprechenden Ausdruck mit $\overline{W(\overline{z})}$ und $\overline{v_j(\cdot, \overline{z})}$.)

Durch Auswertung der Wronski–Determinante $W(v_1, v_2)$ in den Bereichen $x \leq -a$ und $x \geq a$, wo sie natürlich den gleichen Wert annimmt, erhalten wir

$$\begin{aligned} W(v_1, v_2) &= W\left(a_1(z)e^{i\sqrt{z}x} + b_1(z)e^{-i\sqrt{z}x}, e^{-i\sqrt{z}x}\right) \\ &= a_1(z)W\left(e^{i\sqrt{z}x}, e^{-i\sqrt{z}x}\right) = -2ia_1(z)\sqrt{z} \qquad \text{für} \quad x \leq -a, \\ &= W\left(e^{i\sqrt{z}x}, a_2(z)e^{-i\sqrt{z}x} + b_2(z)e^{i\sqrt{z}x}\right) \\ &= a_2(z)W\left(e^{i\sqrt{z}x}, e^{-i\sqrt{z}x}\right) = -2ia_2(z)\sqrt{z} \qquad \text{für} \quad x \geq a, \end{aligned}$$

und somit

$$a_1(z) = a_2(z) =: a(z) \qquad \text{für alle} \quad z \in \mathbb{C}\backslash(-\infty, 0].$$

Für $\operatorname{Im} z > 0$ sind die Lösungen v_1 und v_2 (und entsprechend natürlich $\overline{v_1(\cdot, \overline{z})}$ und $\overline{v_2(\cdot, \overline{z})}$ für $\operatorname{Im} z < 0$) linear unabhängig, denn sonst wären sie bis auf einen Faktor gleich, d. h. sie wären (beide) in $L_2(\mathbb{R})$ und somit hätte T_2 einen nicht–reellen Eigenwert z, was mit der Selbstadjungiertheit nicht verträglich wäre. Dies hat

$$a(z) \neq 0 \quad \text{für} \quad z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R},$$

zur Folge.

Weiter gilt für $\lambda \in (0,\infty)$

$$\begin{aligned}
W(v_1(\cdot,\lambda),\overline{v_1(\cdot,\lambda)}) &= W\Big(a(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda}x}+b_1(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda}x},\overline{a(\lambda)}e^{-i\sqrt{\lambda}x}+\overline{b_1(\lambda)}e^{i\sqrt{\lambda}x}\Big)\\
&= |a(\lambda)|^2\,W\left(e^{i\sqrt{\lambda}x},e^{-i\sqrt{\lambda}x}\right)+|b_1(\lambda)|^2\,W\left(e^{-i\sqrt{\lambda}x},e^{i\sqrt{\lambda}x}\right)\\
&= \left(|b_1(\lambda)|^2-|a(\lambda)|^2\right)2i\sqrt{\lambda} \qquad \text{für} \quad x<-a\,,\\
&= W\left(e^{i\sqrt{\lambda}x},e^{-i\sqrt{\lambda}x}\right)=-2i\sqrt{\lambda} \qquad \text{für} \quad x>a\,,
\end{aligned}$$

d. h. es gilt

$$|a(\lambda)|^2-|b_1(\lambda)|^2=1\,.$$

Insbesondere ist $a(\lambda)\neq 0$ auch für $\lambda\in(0,\infty)$ und somit

$$a(z)\neq 0 \qquad \text{für alle} \quad z\in\mathbb{C}\backslash(-\infty,0]\,.$$

Ebenfalls für $\lambda\in(0,\infty)$ gilt

$$\begin{aligned}
W(v_2(\cdot,\lambda),\overline{v_2(\cdot,\lambda)}) &= W\left(e^{-i\sqrt{\lambda}x},e^{i\sqrt{\lambda}x}\right) = 2i\sqrt{\lambda} \qquad \text{für} \quad x<-a\,,\\
&= W\left(a(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda}x}+b_2(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda}x},\overline{a(\lambda)}e^{i\sqrt{\lambda}x}+\overline{b_2(\lambda)}e^{-i\sqrt{\lambda}x}\right)\\
&= \left(|a(\lambda)|^2-|b_2(\lambda)|^2\right)2i\sqrt{\lambda} \qquad \text{für} \quad x>a\,,
\end{aligned}$$

woraus die analoge Gleichung folgt:

$$|a(\lambda)|^2-|b_2(\lambda)|^2=1\,.$$

Und schließlich ergibt sich für $\lambda\in(0,\infty)$ aus

$$\begin{aligned}
W(v_1(\cdot,\lambda),\overline{v_2(\cdot,\lambda)}) &= W\Big(a(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda}x}+b_1(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda}x},e^{i\sqrt{\lambda}x}\Big)\\
&= b_1(\lambda)\,W\left(e^{-i\sqrt{\lambda}x},e^{i\sqrt{\lambda}x}\right)=b_1(\lambda)2i\sqrt{\lambda} \qquad \text{für } x<-a\\
&= W\left(e^{i\sqrt{\lambda}x},\overline{a(\lambda)}e^{i\sqrt{\lambda}x}+\overline{b_2(\lambda)}e^{-i\sqrt{\lambda}x}\right)\\
&= \overline{b_2(\lambda)}\,W\left(e^{i\sqrt{\lambda}x},e^{-i\sqrt{\lambda}x}\right)=-\overline{b_2(\lambda)}2i\sqrt{\lambda} \quad \text{für} \quad x>a\,,
\end{aligned}$$

$$b_1(\lambda)=-\overline{b_2(\lambda)}\,, \qquad \text{insbesondere} \quad |b_1(\lambda)|=|b_2(\lambda)|\,.$$

Aus den hiermit bewiesenen Beziehungen zwischen $a(\cdot)$, $b_1(\cdot)$ und $b_2(\cdot)$ folgt, daß die Matrix

$$\begin{pmatrix} \dfrac{1}{a(\lambda)} & \dfrac{b_2(\lambda)}{a(\lambda)} \\ \dfrac{b_1(\lambda)}{a(\lambda)} & \dfrac{1}{a(\lambda)} \end{pmatrix}$$

unitär ist.

Wegen

$$W(v_1, v_2) = -2i\sqrt{z}a(z)$$

hat also der Kern der Resolvente $R_z = (T_2 - z)^{-1}$ für $\operatorname{Im} z > 0$ die Gestalt

$$\begin{aligned} R(x,y;z) &= \frac{i}{2\sqrt{z}a(z)} \begin{cases} v_1(x,z)\,v_2(y,z) & \text{für } y \le x\,, \\ v_2(x,z)\,v_1(y,z) & \text{für } y > x\,, \end{cases} \\ R(x,y;\overline{z}) &= \overline{R(y,x;z)} = \frac{-i}{2\sqrt{\overline{z}}\,\overline{a(z)}} \begin{cases} \overline{v_1(x,z)}\,\overline{v_2(y,z)} & \text{für } y \le x\,, \\ \overline{v_2(x,z)}\,\overline{v_1(y,z)} & \text{für } y > x\,. \end{cases} \end{aligned}$$

Aus den für $x < -a$ gültigen Beziehungen

$$\begin{aligned} \overline{v_1(x,\overline{z})} &= \overline{a(\overline{z})}e^{-i\sqrt{z}x} + \overline{b_1(\overline{z})}e^{i\sqrt{z}x}\,, \\ \overline{v_2(x,\overline{z})} &= e^{i\sqrt{z}x} \end{aligned}$$

folgt

$$v_2(y,z) = e^{-i\sqrt{z}y} = \frac{1}{\overline{a(\overline{z})}}\,\overline{v_1(y,\overline{z})} - \frac{\overline{b_1(\overline{z})}}{\overline{a(\overline{z})}}\,\overline{v_2(y,\overline{z})}\,.$$

Entsprechend kann aus den für $x > a$ gültigen Beziehungen

$$\begin{aligned} v_1(x,\overline{z}) &= e^{i\sqrt{\overline{z}}x}\,, \\ v_2(x,\overline{z}) &= a(\overline{z})e^{-i\sqrt{\overline{z}}x} + b_2(\overline{z})e^{i\sqrt{\overline{z}}x} \end{aligned}$$

gefolgert werden

$$\overline{v_1(x,z)} = e^{-i\sqrt{\overline{z}}x} = -\frac{b_2(\overline{z})}{a(\overline{z})}v_1(x,\overline{z}) + \frac{1}{a(\overline{z})}v_2(x,\overline{z})\,.$$

Also gilt für $\operatorname{Im} z > 0$ und $y \le x$

$$\begin{aligned} R(x,y;z) &= \frac{i}{2\sqrt{z}\,a(z)\overline{a(\overline{z})}}v_1(x,z)\Big\{\overline{v_1(y,\overline{z})} - \overline{b_1(\overline{z})}\,\overline{v_2(y,\overline{z})}\Big\}\,, \\ R(x,y;\overline{z}) &= \frac{-i}{2\sqrt{\overline{z}}\,\overline{a(z)}a(\overline{z})}\Big\{ - b_2(\overline{z})v_1(x,\overline{z}) + v_2(x,\overline{z})\Big\}\overline{v_2(y,z)}\,. \end{aligned}$$

Der Vergleich der Koeffizienten mit der Darstellung

$$R(x,y;z) \;=\; \sum_{j,k=1}^{2} m^+_{jk}(z) v_j(x,z)\overline{v_k(y,\overline{z})} \qquad \text{für} \quad y \le x$$

liefert (wobei $*, **$ und $***$ nicht weiter interessieren)

$$m^+(z) \;=\; \frac{i}{2\sqrt{z}\,a(z)} \begin{pmatrix} \overline{a(\overline{z})}^{-1} & * \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad m^+(\overline{z}) \;=\; \frac{-i}{2\sqrt{\overline{z}}\,\overline{\overline{a(z)}}} \begin{pmatrix} 0 & ** \\ 0 & a(\overline{z})^{-1} \end{pmatrix},$$

und somit

$$m^+(z) - m^+(\overline{z}) \;=\; \begin{pmatrix} \dfrac{i}{2\sqrt{z}\,a(z)\overline{a(\overline{z})}} & *** \\ 0 & \dfrac{i}{2\sqrt{\overline{z}}\,\overline{a(z)}a(\overline{z})} \end{pmatrix},$$

und somit für das Spektralmaß ϱ in $(0,\infty)$

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\varrho_{ik}(\lambda) \;&=\; \frac{1}{2\pi i}\Big(m^+_{jk}(\lambda+0i) - m^+_{jk}(\lambda-0i)\Big), \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\varrho_{11}(\lambda) \;&=\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\varrho_{22}(\lambda) \;=\; \frac{1}{4\pi\sqrt{\lambda}|a(\lambda)|^2}, \end{aligned}$$

und (wegen der Symmetrie von ϱ)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\varrho_{21}(\lambda) \;=\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\varrho_{12}(\lambda) \;=\; 0\,.$$

Eine Spektraldarstellung F_1 von $T_{2,+}$ (positiver Teil von T_2) sieht also wie folgt aus:

$$F_1 \,:\, R\Big(E_2((0,\infty))\Big) \longrightarrow L_2\Big(0,\infty;\, \frac{1}{4\pi\sqrt{\lambda}|a(\lambda)|^2}\Big)^2$$

$$(F_1 f)\,(\lambda) \;=\; \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \begin{pmatrix} \displaystyle\int_{-N}^{N} \overline{v_1(x,\lambda)} f(x)\,\mathrm{d}x \\ \displaystyle\int_{-N}^{N} \overline{v_2(x,\lambda)} f(x)\,\mathrm{d}x \end{pmatrix}.$$

Ersetzt man v_1 und v_2 durch

$$\begin{aligned} u_1(x,\lambda) \;&:=\; \frac{1}{a(\lambda)} v_1(x,\lambda) \;=\; \begin{cases} e^{i\sqrt{\lambda}x} + R_1(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda}x} & \text{für } \; x < -a\,, \\ T(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda}x} & \text{für } \; x > \;a\,, \end{cases} \\ u_2(x,\lambda) \;&:=\; \frac{1}{a(\lambda)} v_2(x,\lambda) \;=\; \begin{cases} T(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda}x} & \text{für } \; x < -a\,, \\ e^{-i\sqrt{\lambda}x} + R_2(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda}x} & \text{für } \; x > \;a\,, \end{cases} \end{aligned}$$

mit

$$T(\lambda) = \frac{1}{a(\lambda)} \quad \text{und} \quad R_j(\lambda) = \frac{b_j(\lambda)}{a(\lambda)},$$

so erhält man eine weitere Spektraldarstellung von $T_{2,+}$:

$$F_2 : R\Big(E_2((0,\infty))\Big) \longrightarrow L_2\Big(0,\infty; \frac{1}{4\pi\sqrt{\lambda}}\Big)^2$$

$$(F_2 f)(\lambda) = \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}} \begin{pmatrix} \int\limits_{-N}^{N} \overline{u_1(x,\lambda)} f(x)\,\mathrm{d}x \\ \int\limits_{-N}^{N} \overline{u_2(x,\lambda)} f(x)\,\mathrm{d}x \end{pmatrix}.$$

Eine zusätzliche Variablensubstitution $\lambda = k^2$ zusammen mit den neuen Funktionen

$$e_1(x,k) := u_1(x,k^2) = \begin{cases} e^{ikx} + r_1(k)e^{-ikx} & \text{für } x < -a\,, \\ t(k)e^{ikx} & \text{für } x > a\,, \end{cases}$$

$$e_2(x,k) := u_2(x,k^2) = \begin{cases} t(k)e^{-ikx} & \text{für } x < -a\,, \\ e^{-ikx} + r_2(k)e^{ikx} & \text{für } x > a \end{cases}$$

mit $t(k) = T(k^2)$ und $r_j(k) = R_j(k^2)$, liefert schließlich die Spektraldarstellung (im Sinne von Abschnitt 6.1)

$$U_2 : R\Big(E_2((0,\infty))\Big) \longrightarrow L_2(0,\infty)^2$$

$$(U_2 f)(k) = \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}} \begin{pmatrix} (2\pi)^{-1/2} \int\limits_{-N}^{N} e_1(x,k) f(x)\,\mathrm{d}x \\ (2\pi)^{-1/2} \int\limits_{-N}^{N} e_2(x,k) f(x)\,\mathrm{d}x \end{pmatrix},$$

wie dies im Abschnitt 6.1 benutzt wurde.

6.3 Berechnung der Streumatrix für den Potentialtopf/Potentialbarriere

Zur Illustration betrachten wir abschließend die Streuung am Potentialtopf bzw. an der Potentialbarriere

$$q(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \text{ und für } x > L\,, \\ U & \text{für } 0 \le x \le L\,. \end{cases}$$

Für $U < 0$ hat T_2 endlich viele negative Eigenwerte, die implizit gegeben sind durch

$$2 \arctan \frac{\sqrt{\lambda_k - U}}{\sqrt{-\lambda_k}} - k\pi \;=\; -\sqrt{\lambda_k - U}L \qquad (\, k \in \mathbb{N},\, U < \lambda_k < 0\,)\,.$$

Für $\lambda > 0$ hat die Lösung $v_1(x,\lambda)$ die Form

$$v_1(x,\lambda) \;=\; \begin{cases} a(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda}x} + b(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda}x} & \text{für} \quad x < 0\,, \\ c(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda-U}x} + d(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda-U}x} & \text{für} \quad 0 \le x \le L\,, \\ e^{i\sqrt{\lambda}x} & \text{für} \quad x > L\,. \end{cases}$$

Die Stetigkeit von v_1 und v_1' an den Stellen $x = 0$ und $x = L$ erfordert die Beziehungen

$$\begin{aligned} c(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda-U}L} + d(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda-U}L} \quad &= \quad e^{i\sqrt{\lambda}L}\,, \\ c(\lambda)e^{i\sqrt{\lambda-U}L} - d(\lambda)e^{-i\sqrt{\lambda-U}L} \quad &= \quad \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-U}}e^{i\sqrt{\lambda}L}\,, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a(\lambda) + b(\lambda) \;&=\; c(\lambda) + d(\lambda)\,, \\ a(\lambda) - b(\lambda) \;&=\; \frac{\sqrt{\lambda-U}}{\sqrt{\lambda}}\Big(c(\lambda) - d(\lambda)\Big)\,. \end{aligned}$$

Aus den ersten beiden Gleichungen folgt

$$\begin{aligned} c(\lambda) \;&=\; \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-U}}\right) e^{i\sqrt{\lambda}L}e^{-i\sqrt{\lambda-U}L}\,, \\ d(\lambda) \;&=\; \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-U}}\right) e^{i\sqrt{\lambda}L}e^{i\sqrt{\lambda-U}L}\,. \end{aligned}$$

Einsetzen in die beiden letzten Gleichungen liefert ($b(\lambda)$ interessiert uns im folgenden nicht)

$$\begin{aligned} a(\lambda) \;=\; \frac{1}{4}\bigg\{&\left(2 + \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-U}} + \frac{\sqrt{\lambda-U}}{\sqrt{\lambda}}\right)e^{-i\sqrt{\lambda-U}L} \\ &+ \left(2 - \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-U}} - \frac{\sqrt{\lambda-U}}{\sqrt{\lambda}}\right)e^{i\sqrt{\lambda-U}L}\bigg\}e^{i\sqrt{\lambda}L}\,. \end{aligned}$$

Ist $\boldsymbol{\lambda > \max(0, U)}$, so gilt

$$\begin{aligned} a(\lambda) \;&=\; e^{i\sqrt{\lambda}L}\left\{\cos\sqrt{\lambda-U}L - \frac{i}{2}\left(\frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-U}} + \frac{\sqrt{\lambda-U}}{\sqrt{\lambda}}\right)\sin\sqrt{\lambda-U}L\right\}, \\ |T(\lambda)|^2 \;&=\; |a(\lambda)|^{-2} \;=\; 4\lambda(\lambda-U)\Big\{4\lambda(\lambda-U) + U^2\sin^2\sqrt{\lambda-U}L\Big\}^{-1}\,. \end{aligned}$$

Ist $U \leq 0$, so gilt also

$$\lim_{\lambda \to 0+} |T(\lambda)|^2 \;=\; \begin{cases} 0 & \text{falls} \quad \sqrt{U}L \neq k\pi\,, k \in \mathbb{N}_0\,, \\ 1 & \text{falls} \quad \sqrt{U}L = k\pi\,, k \in \mathbb{N}_0\,. \end{cases}$$

Im Fall $U \leq 0$ ist damit das Verhalten von $|T(\lambda)|^2$ klar:

$\mathbf{|T(\lambda)|^2}$ **für** $\mathbf{U = -5,\; L = 5}$.

$|\mathbf{T}(\lambda)|^{\mathbf{2}}$ **für** $\mathbf{U} = -\mathbf{4},\ \mathbf{L} = \mathbf{6.2}\,,$ **d. h.** $\sqrt{|\mathbf{U}|}\mathbf{L} \sim \mathbf{4}\pi\,.$

$|\mathbf{T}(\lambda)|^{\mathbf{2}}$ **für** $\mathbf{U} = -\mathbf{4},\ \mathbf{L} = \mathbf{2}\pi\,,$ **d. h.** $\sqrt{|\mathbf{U}|}\mathbf{L} = \mathbf{4}\pi\,.$

Ist $U > 0$ und $\lambda > U$, so gelten die obigen Formeln weiter. Ist $\lambda \in (0, U)$, so folgt

$$
\begin{aligned}
a(\lambda) &= e^{i\sqrt{\lambda}L} \left\{ \cosh \sqrt{U-\lambda}L + \frac{i}{2} \left(\frac{\sqrt{U-\lambda}}{\sqrt{\lambda}} - \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{U-\lambda}} \right) \sinh \sqrt{U-\lambda}L \right\}, \\
|T(\lambda)|^2 &= |a(\lambda)|^{-2} \;=\; 4\lambda(U-\lambda) \Big\{ 4\lambda(U-\lambda) + U^2 \sinh^2 \sqrt{U-\lambda}L \Big\}^{-1}, \\
|T(0)|^2 &= 0\,, \qquad |T(U)|^2 \;=\; 4(4+UL^2)^{-1}\,.
\end{aligned}
$$

$|T(\cdot)|^2$ wird also beispielhaft durch die beiden folgenden Graphen beschrieben.

Die Reflexionskoeffizienten berechnen wir nicht explizit. Die in diesem Zusammenhang wesentlichen Aussagen ergeben sich aus

$$
|R_j(\lambda)|^2 \;=\; 1 - |T(\lambda)|^2\,.
$$

$\mathbf{|T(\lambda)|^2}$ **für** $\mathbf{U = 2}$, $\mathbf{L = 2}$.

$|\mathbf{T}(\lambda)|^{\mathbf{2}}$ **für** $\mathbf{U = 2},\ \mathbf{L = 5}$.

6.4 Streuung an einem Treppenpotential

Etwas allgemeiner als im Abschnitt 6.3 betrachten wir jetzt noch Potentiale der Form

$$q(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < L_1 \text{ und für } x \geq L_k\,, \\ U_j & \text{für } L_j \leq x < L_{j+1},\ \ j = 1, \ldots, k-1\,. \end{cases}$$

Um $T(\lambda)$ zu berechnen, genügt es offenbar, den Koeffizienten $a(\lambda) := a_k(\lambda)$ der Lösung $u(x, \lambda)$ von $-u'' + q(x)u = \lambda u$ zu bestimmen mit

$$u(x) = \begin{cases} e^{-i\sqrt{\lambda}x} & \text{für } x < L_1\,, \\ a_j(\lambda)\, e^{-i\sqrt{\lambda - U_j}x} + b_j(\lambda)\, e^{i\sqrt{\lambda - U_j}x} & \text{für } L_j \leq x < L_{j+1}\,, \\ a_k(\lambda)\, e^{-i\sqrt{\lambda}x} + b_k(\lambda)\, e^{i\sqrt{\lambda}x} & \text{für } x \geq L_k\,. \end{cases}$$

Es ist dann $|T(\lambda)|^2 = |a(\lambda)|^{-2}$.

Mit $a_0(\lambda) = 1, b_0(\lambda) = 0$ und $U_0 = U_k = 0$ kann man offenbar die $a_j(\lambda), b_j(\lambda)$ nacheinander bestimmen aus den Stetigkeitsbedingungen

$$u(L_j+) = u(L_j-),\ \ u'(L_j+) = u'(L_j-) \qquad \text{für} \quad j = 1, \ldots, k\,.$$

Diese liefern:

$$\begin{aligned}
&a_j(\lambda)\, e^{-i\sqrt{\lambda-U_j}L_j} + b_j(\lambda)\, e^{i\sqrt{\lambda-U_j}L_j} \\
&\qquad = a_{j-1}(\lambda)\, e^{-i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j} + b_{j-1}(\lambda)\, e^{i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j}\,,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&-a_j(\lambda)\, e^{-i\sqrt{\lambda-U_j}L_j} + b_j(\lambda)\, e^{i\sqrt{\lambda-U_j}L_j} \\
&\qquad = \frac{\sqrt{\lambda-U_{j-1}}}{\sqrt{\lambda-U_j}}\Big\{ - a_{j-1}(\lambda)\, e^{-i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j} + b_{j-1}(\lambda)\, e^{i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j}\Big\}\,,
\end{aligned}$$

woraus offensichtlich folgt $(j = 1, \ldots, k)$

$$\begin{aligned}
a_j(\lambda) \quad &= \quad \frac{1}{2}\, e^{i\sqrt{\lambda-U_j}L_j} \left\{ e^{-i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j}\left(1 + \frac{\sqrt{\lambda-U_{j-1}}}{\sqrt{\lambda-U_j}}\right) a_{j-1}(\lambda) \right. \\
&\qquad \left. + e^{i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j}\left(1 - \frac{\sqrt{\lambda-U_{j-1}}}{\sqrt{\lambda-U_j}}\right) b_{j-1}(\lambda) \right\}\,, \\
b_j(\lambda) \quad &= \quad \frac{1}{2}\, e^{-i\sqrt{\lambda-U_j}L_j} \left\{ e^{-i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j}\left(1 - \frac{\sqrt{\lambda-U_{j-1}}}{\sqrt{\lambda-U_j}}\right) a_{j-1}(\lambda) \right. \\
&\qquad \left. + e^{i\sqrt{\lambda-U_{j-1}}L_j}\left(1 + \frac{\sqrt{\lambda-U_{j-1}}}{\sqrt{\lambda-U_j}}\right) b_{j-1}(\lambda) \right\}\,.
\end{aligned}$$

Bei mehr als zwei Treppen ist es natürlich ziemlich hoffnungslos, $a(\lambda)$ explizit zu berechnen; andererseits ist es natürlich kein Problem, $a(\lambda)$ näherungsweise numerisch zu berechnen. Betrachtet man z. B. für $k = 4$

$$q(x) = \begin{cases} U_0 = U_4 = 0 & \text{für } \; x < 0 \quad \text{und für} \quad x \geq 14\,, \\ U_1 = U_3 = 1 & \text{für } \; 0 \leq x < 2 \quad \text{und für} \quad 12 \leq x < 14, \\ U_2 = 0 \quad \text{bzw.} \quad -1 & \text{für } \; 2 \leq x < 12\,, \end{cases}$$

so erhält man für $|T(\lambda)|^2$ in $0 < \lambda < 1$ die folgenden Kurven. Die Spitzen liegen jeweils etwa dort, wo das Eigenwertproblem eingeschränkt auf $(2, 12)$ mit Dirichlet–Randbedingungen bei 2 und 12 die Eigenwerte hätte. Werden die Potentialbarrieren breiter gewählt, so werden die Spitzen noch stärker ausgeprägt.

$$\mathbf{U_2} = \mathbf{0}\,.$$

$$\mathbf{U_2} = -\mathbf{1}\,.$$

7 Existenz und Vollständigkeit der Wellenoperatoren nach V. Enß

Die Untersuchungen dieses Abschnitts gehen im wesentlichen auf V. Enß (ab 1978) zurück. Weitere Vereinfachungen stammen insbesondere von E. B. Davies (On Enss' approach to scattering theory, Duke Math. J. **47**, 171–185 (1980)) und P. A. Perry (Scattering Theory by the Enss Method, Mathematical Reports, Vol. 1, Harwood Academic Publishers 1983).

Im folgenden sei

$$T_1 = -\Delta \qquad \text{in} \quad L_2(\mathbb{R}^m)$$

mit dem üblichen Definitionsbereich

$$D(T_1) = F^{-1}\Big\{f \in L_2(\mathbb{R}^m) : (1 + |\cdot|^2)f \in L_2(\mathbb{R}^m)\Big\}.$$

Ein Operator V heißt eine ***Enß–Störung*** (meist auch als Enß–Potential bezeichnet), wenn gilt:

(i) V ist symmetrisch und T_1–beschränkt mit T_1–Schranke < 1,

(ii) Für $h : (0, \infty) \longrightarrow \mathbb{R}$, $\quad h(R) := \|V(T_1 - i)^{-1}\chi_{\{|x|>R\}}\|$ gilt $h \in L_1(0, \infty)$.

Die erste Bedingung impliziert insbesondere, daß

$$T_2 := T_1 + V \qquad \text{mit} \quad D(T_2) = D(T_1)$$

selbstadjungiert und nach unten halbbeschränkt ist. — Die Funktion $h(\cdot)$ ist offenbar nichtwachsend.

Neben einigen auch für sich selbst interessanten Resultaten ist es das Ziel dieses Abschnitts, den folgenden Satz zu beweisen.

Satz 7.1 *Sei $T_1 = -\Delta$, V eine Enß–Störung, $T_2 = T_1 + V$. Dann gilt*

a) $W_\pm = W_\pm(T_2, T_1)$ *existieren und sind vollständig.*

b) Das singulär stetige Spektrum von T_2 *ist leer, d. h. es gilt*

$$H_{sc}(T_2) = \{0\}, \quad L_2(\mathbb{R}^m) = H_p(T_2) \oplus H_{ac}(T_2).$$

c) Die Eigenwerte von T_2 *können sich nur bei* 0 *häufen; alle von* 0 *verschiedenen Eigenwerte haben endliche Vielfachheit.*

Es sei angemerkt, daß die Existenz positiver Eigenwerte (die sich allerdings höchstens bei 0 häufen können) unter den obigen Voraussetzungen nicht ohne weiteres ausgeschlossen werden kann. Andererseits scheint die Existenz solcher Eigenwerte nicht bekannt zu sein.

7.1 Eigenschaften von Enß–Störungen; die Existenz der Wellenoperatoren

Im folgenden sei V ein T_1–beschränkter Operator, und h sei wie oben definiert. Weiter sei $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^m)$ mit

$$0 \le \varphi(x) \le 1\,, \qquad \varphi(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| \le 1, \\ 1 & \text{für } |x| \ge 2, \end{cases} \qquad \varphi_R(x) := \varphi\left(\frac{x}{R}\right),$$

$$\begin{aligned} k(R) &:= \|V(T_1 - i)^{-1}\varphi_R\|\,, \\ k_1(R) &:= \|V\varphi_R(T_1 - i)^{-1}\|\,. \end{aligned}$$

Satz 7.2 *Unter den obigen Voraussetzungen gilt*

$$k(R) \le h(R) \le k\left(\frac{R}{2}\right) \qquad \textit{für alle} \quad R > 0\,,$$

und

$$h \in L_1(0,\infty) \Longleftrightarrow k \in L_1(0,\infty) \Longleftrightarrow k_1 \in L_1(0,\infty)\,.$$

Strebt eine der Funktionen h, k, k_1 für $R \longrightarrow \infty$ gegen 0, so gilt dies für alle. In der Bedingung (ii) *kann i durch jedes $z \in \mathbb{C}\backslash[0,\infty)$ ersetzt werden.*

Beweis. Für jedes $c > 0$ bezeichnen wir mit $\chi_{<c}$ bzw. $\chi_{>c}$ den Operator der Multiplikation mit der charakteristischen Funktion von $\{x \in \mathbb{R}^m : |x| < c\}$ bzw. $\{x \in \mathbb{R}^m : |x| > c\}$. Aus

$$\begin{aligned} V(T_1 - i)^{-1}\chi_{>R} &= \{V(T_1 - i)^{-1}\varphi_{R/2}\}\chi_{>R}\,, \\ V(T_1 - i)^{-1}\varphi_R &= \{V(T_1 - i)^{-1}\chi_{>R}\}\varphi_R \end{aligned}$$

ergeben sich die behaupteten Ungleichungen und somit die erste Äquivalenzaussage.

Wir beweisen die zweite Äquivalenz: Offenbar gilt

$$\begin{aligned} |k(R) - k_1(R)| &\le \left\|V(T_1 - i)^{-1}\varphi_R - V\varphi_R(T_1 - i)^{-1}\right\| \\ &\qquad \Big(\varphi_{R/2}\varphi_R = \varphi_R,\ \ \varphi_{R/2}(T_1 - i)\varphi_R = (T_1 - i)\varphi_R\Big) \\ &= \left\|V(T_1 - i)^{-1}\varphi_{R/2}\Big\{\varphi_R(T_1 - i) - (T_1 - i)\varphi_R\Big\}(T_1 - i)^{-1}\right\| \\ &= \left\|V(T_1 - i)^{-1}\varphi_{R/2}\Big\{\varphi_R T_1 - T_1\varphi_R\Big\}(T_1 - i)^{-1}\right\|. \end{aligned}$$

Da der Kommutator $\varphi_R T_1 - T_1\varphi_R = [\varphi_R, T_1]$ ein Differentialoperator erster Ordnung ist, dessen Koeffizienten sich gleichmäßig durch $1/R$ abschätzen lassen (Beweis!), gilt

$$\|(\varphi_R T_1 - T_1\varphi_R)(T_1 - i)^{-1}\| \le \frac{C}{R},$$

und somit

$$\begin{aligned}
|k(R) - k_1(R)| &\le \frac{C}{R}\left\|V(T_1-i)^{-1}\varphi_{R/2}\right\| = \frac{C}{R}\,k\left(\frac{R}{2}\right) \\
&= \frac{C}{R}\left\{k\left(\frac{R}{2}\right) - k_1\left(\frac{R}{2}\right)\right\} + \frac{C}{R}\,k_1\left(\frac{R}{2}\right) \\
&\qquad \text{(Anwendung der in der ersten Zeile dieser Formel} \\
&\qquad \text{bewiesenen Ungleichung mit } \frac{R}{2} \text{ statt } R\text{)} \\
&\le \frac{C}{R}\,\frac{2C}{R}\,k\left(\frac{R}{4}\right) + \frac{C}{R}\,k_1\left(\frac{R}{2}\right) \\
&= q(R) + \frac{C}{R}\,k_1\left(\frac{R}{2}\right)
\end{aligned}$$

mit einem $q \in L_1(1,\infty)$, da k beschränkt ist. Aus den Ungleichungen

$$\Big|k(R) - k_1(R)\Big| \le \begin{cases} \dfrac{C}{R}\,k\left(\dfrac{R}{2}\right), \\[2ex] q(R) + \dfrac{C}{R}\,k_1\left(\dfrac{R}{2}\right). \end{cases}$$

folgt nun die zweite Äquivalenz. Damit ist auch die Äquivalenz der Konvergenzaussagen für $R \longrightarrow \infty$ bewiesen.

Die letzte Behauptung folgt nun aus

$$\begin{aligned}
\|V\varphi_R(T_1 - z)^{-1}\| &\le k_1(R)\,\|(T_1 - i)\,(T_1 - z)^{-1}\|, \\
k_1(R) &\le \|V\varphi_R(T_1 - z)^{-1}\|\,\|(T_1 - z)\,(T_1 - i)^{-1}\|
\end{aligned}$$

und der Tatsache, daß in den oben durchgeführten Abschätzungen offenbar z durch i ersetzt werden kann. □

Satz 7.3 *a) Ist V ein symmetrischer Differentialoperator der Ordnung ≤ 1, dessen Koeffizienten sich durch $(1+|x|)^{-1-\varepsilon}$ abschätzen lassen, so ist V eine Enß–Störung. (Es können ohne Schwierigkeiten auch lokale Singularitäten zugelassen werden.)*

b) Das entsprechende Resultat gilt für Differentialoperatoren der Ordnung ≤ 2, *wenn zusätzlich die relative Beschränktheit mit Schranke* < 1 *garantiert ist.*

Beweis. Der Beweis kann für a) und b) gemeinsam geführt werden, da im Fall a) V automatisch die T_1–Schranke 0 hat. Nach Satz 7.2 genügt es, $k_1 \in L_1(0,\infty)$ zu beweisen. Offenbar gilt mit $c_\alpha(x) \leq C(1+|x|)^{-1-\varepsilon}$

$$\begin{aligned} k_1(R) &= \left\| V\varphi_R(T_1-i)^{-1} \right\| = \Big\| \sum_{|\alpha|\leq 2} c_\alpha \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} \varphi_R (T_1-i)^{-1} \Big\| \\ &\leq \sum_{|\beta|\leq 2} \left\| \tilde{c}_{\beta,R}\, \frac{\partial^\beta}{\partial x^\beta}\,(T_1-i)^{-1} \right\| \end{aligned}$$

mit $|\tilde{c}_{\beta,R}(x)| \leq \tilde{C}(1+|R|)^{-1-\varepsilon}$. Da die Operatoren $\dfrac{\partial^\beta}{\partial x^\beta}\,(T_1-i)^{-1}$ für $|\beta| \leq 2$ beschränkt sind, folgt die Behauptung. □

Satz 7.4 *Sei* $T_1 = -\Delta$, V *sei* T_1*–beschränkt, und es gelte* $k(R) \longrightarrow 0$ *für* $R \longrightarrow \infty$ *(da* h *nichtwachsend ist, ist diese Bedingung wegen Satz 7.2 insbesondere dann erfüllt, wenn* V *eine Enß–Störung ist). Dann ist* V *relativ kompakt bezüglich* T_1^2, *und für jedes* $g \in C(\mathbb{R})$ *mit* $g(\lambda) \longrightarrow 0$ *für* $|\lambda| \longrightarrow \infty$ *ist* $g(T_1) - g(T_2)$ *kompakt (insbesondere ist auch* $(T_1-z)^{-1} - (T_2-z)^{-1}$ *kompakt für jedes* $z \in \varrho(T_1) \cap \varrho(T_2)$ *).*

Beweis. **V ist $\mathbf{T_1^2}$–kompakt**: Da V T_1–beschränkt ist, genügt es nach Satz 10.8 in „Mathematische Methoden der Quantenmechanik“ zu beweisen, daß $VE_1(J)$ kompakt ist für jedes beschränkte Intervall J. Zunächst ist

$$V(I-\varphi_R)\,E_1(J) = V(T_1-i)^{-1}\,(T_1-i)\,(I-\varphi_R)E_1(J)$$

kompakt für jedes $R > 0$, da $V(T_1-i)^{-1}$ beschränkt ist und $(T_1-i)\,(I-\varphi_R)E_1(J)$ ein Hilbert–Schmidt–Operator ist. Letzteres folgt sofort aus der Tatsache, daß $(T_1-i)\,(I-\varphi_R)$ ein Differentialoperator der Ordnung 2 mit C_0^∞–Koeffizienten $c_\alpha(\cdot)$ ist, d. h.

$$\begin{aligned} (T_1-i)\,(I-\varphi_R)E_1(J)f &= \sum_{|\alpha|\leq 2} c_\alpha(x) \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha}\,(2\pi)^{-m/2} \int\limits_{\{|y|^2\in J\}} e^{ixy} Ff(y)\,\mathrm{d}y \\ &= (2\pi)^{-m/2} \sum_{|\alpha|\leq 2} i^{|\alpha|} c_\alpha(x) \int\limits_{\{|y|^2\in J\}} e^{ixy} y^\alpha Ff(y)\,\mathrm{d}y\,. \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$V\varphi_R E_1(J) = \Big\{ V\varphi_R(T_1-i)^{-1} \Big\} (T_1-i)E_1(J) \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad R \longrightarrow \infty\,,$$

da $k(R) \longrightarrow 0$ gilt für $R \longrightarrow \infty$. Insgesamt folgt für jedes beschränkte Intervall J die Kompaktheit von $VE_1(J)$.

Da V T_1–beschränkt und T_1^2–kompakt ist, folgt

$$(T_1 - \mu)^{-2} - (T_2 - \mu)^{-2} \qquad \text{kompakt für} \quad \mu \in \varrho(T_1) \cap \varrho(T_2)\,.$$

Dies erhält man mit Hilfe der zweiten Resolventengleichung (dabei setzen wir im folgenden $R_j := (T_j - \mu)^{-1}$):

$$\begin{aligned} R_2^2 &= (R_1 - R_2VR_1)\,(R_1 - R_1VR_2) \\ &= (I - R_2V)R_1^2(I - VR_2)\,, \\ R_2^2 - R_1^2 &= -R_1^2VR_2 - R_2VR_1^2(I - VR_2) \\ &= -\Big\{(T_2 - \overline{\mu})^{-1}V(T_1 - \overline{\mu})^{-2}\Big\}^* - R_2VR_1^2(I - VR_2)\,; \end{aligned}$$

da hier jeweils $V(T_1 - \overline{\mu})^{-2}$ bzw. VR_1^2 enthalten ist, folgt die gewünschte Kompaktheit.

Eine einfache Induktion zeigt, daß dann auch gilt

$$(T_1 - i)^{-2k}(T_1 + i)^{-2\ell} - (T_2 - i)^{-2k}(T_2 + i)^{-2\ell} \quad \text{kompakt für} \quad k, \ell \in \mathbb{N}_0\,;$$

sind nämlich A_j, B_j beschränkt für $j = 1, 2,$ $A_1 - A_2$ und $B_1 - B_2$ kompakt, so folgt aus der Kompaktheit von $A_1^kB_1^\ell - A_2^kB_2^\ell$ auch die Kompaktheit von (z. B.)

$$A_1^{k+1}B_1^\ell - A_2^{k+1}B_2^\ell \;=\; A_1\Big(A_1^kB_1^\ell - A_2^kB_2^\ell\Big) + \Big(A_1 - A_2\Big)A_2^kB_2^\ell\,.$$

Nach dem Satz von Stone–Weierstraß (Korollar 7.13 a) gibt es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein Polynom P in zwei Variablen mit

$$\Big|P\Big((\lambda - i)^{-2}, (\lambda + i)^{-2}\Big) - g(\lambda)\Big| < \varepsilon \qquad \text{für alle} \quad \lambda \in \mathbb{R}\,.$$

Da für jedes Polynom P der Operator

$$P\Big((T_1 - i)^{-2}, (T_1 + i)^{-2}\Big) \;-\; P\Big((T_2 - i)^{-2}, (T_2 + i)^{-2}\Big) \qquad \text{kompakt}$$

ist, folgt somit die Kompaktheit von $g(T_2) - g(T_1)$. (Setzt man voraus, daß T_2 halbbeschränkt ist, z. B. indem man fordert, daß V eine T_1–Schranke < 1 hat, so kann Korollar 7.13 b mit $n = 2$ benutzt werden, was eine geringfügige Vereinfachung bedeutet.) □

Beweis der Existenz der Wellenoperatoren (Satz 7.1). Die Existenz der Wellenoperatoren $W_\pm(T_2,T_1)$ folgt aus dem Cook'schen Lemma (Satz 4.2), wenn wir einen dichten Teilraum D von $L_2(\mathbb{R}^m)$ angeben können so, daß für alle $f\in D$ die Funktion $t\mapsto Ve^{-itT_1}f$ Norm–stetig und $t\mapsto \|Ve^{-itT_1}f\|$ über $\mathbb{R}$ integrierbar ist. Wir wählen

$$D=\left\{f\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^m): Ff\in C_0^\infty(\mathbb{R}^m\backslash\{0\})\right\}.$$

Wegen $D\subset D(T_1)$ und der T_1–Beschränktheit von V ist

$$Ve^{-itT_1}f=\left\{V(T_1-i)^{-1}\right\}\left\{e^{-itT_1}(T_1-i)f\right\}$$

stetig.

Sei nun $f\in D$ und $a>0$ so, daß $Ff(y)=0$ gilt für $|y|<a$. Wir schreiben

$$\begin{aligned}Ve^{-itT_1}f &= V(T_1-i)^{-1}e^{-itT_1}(T_1-i)f\\ &= V(T_1-i)^{-1}\chi_{<a|t|}e^{-itT_1}(T_1-i)f\\ &\qquad +V(T_1-i)^{-1}\chi_{>a|t|}e^{-itT_1}(T_1-i)f\,.\end{aligned}$$

Nach Satz 3.15 c gilt für jedes $n\in\mathbb{N}$ (beachte $a<2a$) mit einer geeigneten Konstanten C_n

$$\begin{aligned}\left\|\chi_{<a|t|}e^{-itT_1}(T_1-i)f\right\| &\le \left\{\int\limits_{|x|<a|t|}\frac{C_n}{(1+|t|)^{2n}}\,\mathrm{d}x\right\}^{1/2}\\ &\le \tilde C_n|t|^{-n+m/2}\,.\end{aligned}$$

Für $n>\dfrac{m}{2}+1$ ist also in obiger Gleichung die Norm des ersten Terms integrierbar. Der zweite Term ist nach Voraussetzung (ii) integrierbar. □

7.2 Die Dilatationsgruppe und ihr Generator

Es ist das Ziel dieses Abschnitts, eine Möglichkeit anzugeben, die Elemente aus $L_2(\mathbb{R}^m)$ in solche Teile zu zerlegen, die bezüglich der Gruppe e^{-itT_1} ein– bzw. auslaufen.

Die ***Dilatationsgruppe*** $\mathcal{D}=\{U(t):t\in\mathbb{R}\}$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$ ist gegeben durch

$$\Big(U(t)f\Big)(x)=\exp\left(\frac12 mt\right)f(e^tx)\qquad\text{für}\quad t\in\mathbb{R},\ f\in L_2(\mathbb{R}^m)\,.$$

Man rechnet leicht nach (Substitutionsregel), daß jedes $U(t)$ unitär ist und daß $\mathcal{D}$ eine Gruppe ist ($U(0) = I$, $U(t+s) = U(t)U(s)$). Für $f \in C_0(\mathbb{R}^m)$ und $\varepsilon > 0$ existiert ein Kompaktum $K \subset \mathbb{R}^m$ mit $\operatorname{supp} U(s)f \subset K$ für alle $s \in (t-\varepsilon, t+\varepsilon)$; außerdem gilt

$$\Big(U(s)f\Big)(x) \longrightarrow \Big(U(t)f\Big)(x) \quad \text{gleichmäßig für} \quad s \longrightarrow t\,.$$

Daraus folgt $U(s)f \longrightarrow U(t)f$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$. Wegen der Beschränktheit von $\mathcal{D}$ gilt dies dann für alle $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$, d. h. $\mathcal{D}$ ist ***stark stetig***.

Im folgenden seien die Operatoren A_0 und A_{00} in $L_2(\mathbb{R}^m)$ definiert durch

$$\begin{aligned}
D(A_0) = C_0^\infty(\mathbb{R}^m), \qquad D(A_{00}) &= C_0^\infty(\mathbb{R}^m \setminus \{0\})\,,\\
(A_0 f)(x) = (A_{00} f)(x) &= \frac{1}{2i} \sum_{j=1}^m \Big(x_j \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} x_j\Big) f(x)\\
&= \frac{1}{i}\Big\{\frac{1}{2}m + \sum_{j=1}^m x_j \frac{\partial}{\partial x_j}\Big\} f(x) \;=\; \frac{1}{i}\Big\{\frac{1}{2}m + r\frac{\partial}{\partial r} f(x)\Big\}
\end{aligned}$$

für $f \in D(A_0)$ bzw. $D(A_{00})$.

Satz 7.5 *A_0 und A_{00} sind wesentlich selbstadjungiert mit $\overline{A_0} = \overline{A_{00}}$; dieser gemeinsame Abschluß sei mit A bezeichnet. Dann ist iA der infinitesimale Generator von $\mathcal{D}$. Es gilt $FAF^{-1} = -A$.*

Beweis. Offensichtlich bildet jedes $U(t)$ die Definitionsbereiche $D(A_0) = C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ und $D(A_{00}) = C_0^\infty(\mathbb{R}^m \setminus \{0\})$ in sich ab, und für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ bzw. $C_0^\infty(\mathbb{R}^m \setminus \{0\})$ rechnet man leicht nach:

$$\lim_{t\to 0} \frac{1}{t}\,(U(t) - I)f \;=\; iA_0 f(x)\,, \qquad \text{bzw.} \qquad = iA_{00} f(x)\,.$$

Zusammen mit dem folgenden Satz von Nelson folgt hieraus, daß $i\overline{A_0} = i\overline{A_{00}}$ der infinitesimale Generator von $\mathcal{D}$ ist. Für $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ rechnet man leicht $FAF^{-1}f = -Af$ nach. Das liefert die letzte Behauptung. □

Satz 7.6 (E. Nelson) *Sei $\{U(t) : t \in \mathbb{R}\}$ eine stark stetige unitäre Gruppe, D ein dichter Teilraum, der durch alle $U(t)$ in sich abgebildet wird, und für jedes $f \in D$ existiere*

$$Bf := \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(U(t) - I)f\,.$$

Dann ist iB wesentlich selbstadjungiert auf D, und $\overline{B}$ ist der infinitesimale Generator von $\{U(t) : t \in \mathbb{R}\}$.

Beweis. Die wesentliche Selbstadjungiertheit des symmetrischen Operators iB ist äquivalent zu $N(B^* \pm I) = R(B \pm I)^\perp = R(iB \pm iI)^\perp = \{0\}$.

Nehmen wir also an, daß z. B. $g_+ \in N(B^* - I)$ ist, d. h. $B^* g_+ = g_+$. Dann gilt für alle $f \in D$ und $\psi_f(t) := \langle U(t)f,\, g_+\rangle$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\psi_f(t) \;&=\; \left\langle \frac{d}{dt}(U(t)f), g_+\right\rangle \;=\; \langle BU(t)f, g_+\rangle \;=\; \langle U(t)f, B^* g_+\rangle \\ &=\; \langle U(t)f, g_+\rangle \;=\; \psi_f(t)\,,\end{aligned}$$

also

$$\langle U(t)f, g_+\rangle \;=\; \psi_f(t) = \psi_f(0)e^t = \langle f, g_+\rangle e^t \qquad \text{für alle} \quad t \in \mathbb{R}\,.$$

Da $\langle U(t)f, g\rangle$ beschränkt ist, gilt also $g_+ \perp f$ für alle $f \in D$, also $g_+ = 0$.

Entsprechend folgt aus $B^* g_- = -g_-$ die Gleichung

$$\langle U(t)f, g_-\rangle \;=\; \langle f, g_-\rangle e^{-t} \qquad \text{für alle} \quad f \in D \qquad \text{und alle} \quad t \in \mathbb{R}\,,$$

und somit $g_- = 0$. □

Wir wollen nun eine Art ***Spektraldarstellung*** von A konstruieren, die es dann ohne weiteres erlaubt, die Spektralschar $E_A(\cdot)$ und somit die Projektionen $I - E_A(0)$ und $E_A(0)$ auf den zu A gehörigen positiven bzw. negativen Teilraum anzugeben. Dazu führen wir die folgende unitäre Abbildung U ein:

$$\begin{aligned}&U : L_2(\mathbb{R}^m) \longrightarrow L_2(\mathbb{R} \times S^{m-1}) \qquad (\cong L_2(\mathbb{R})\hat{\otimes} L_2(S^{m-1}))\,,\\ &(Uf)\,(s,\omega) = \exp(\tfrac{1}{2}ms) f(e^s\omega) \qquad \text{für} \quad s \in \mathbb{R},\, \omega \in S^{m-1}\,.\end{aligned}$$

Man sieht leicht, daß diese Abbildung isometrisch,

$$\begin{aligned}\|Uf\|^2_{L_2(\mathbb{R}\times S^{m-1})} \;&=\; \int_{\mathbb{R}} \int_{S^{m-1}} \exp(ms)\left|f(e^s\omega)\right|^2 \mathrm{d}\omega\, \mathrm{d}s \\ &\qquad (\text{Substitution} \quad s = \ln t\,) \\ &=\; \int_0^\infty \int_{S^{m-1}} t^m |f(t\omega)|^2\, \mathrm{d}\omega \frac{1}{t}\, \mathrm{d}t = \int_{\mathbb{R}^m} |f(x)|^2\, \mathrm{d}x = \|f\|^2_{L_2(\mathbb{R}^m)}\,,\end{aligned}$$

und surjektiv (also unitär) ist mit

$$U^{-1} : L_2(\mathbb{R} \times S^{m-1}) \longrightarrow L_2(\mathbb{R}^m)$$

$$(U^{-1}g)\,(r\omega) = r^{-m/2}\, g(\ln r, \omega) \qquad \text{für} \quad r \in (0,\infty),\ \omega \in S^{m-1}\,.$$

Außerdem benötigen wir die ***partielle Fouriertransformation*** F_1 in $L_2(\mathbb{R} \times S^{m-1})$; sie ist definiert als die Abschließung von

$$F_{1,0} : C_0(\mathbb{R} \times S^{m-1}) \longrightarrow L_2(\mathbb{R} \times S^{m-1})\,,$$

$$(F_{1,0}f)\,(\lambda,\omega) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda s} f(s,\omega)\,\mathrm{d}s\,.$$

Man rechnet leicht nach, daß F_1 unitär ist und daß F_1^{-1} analog dargestellt werden kann mit $e^{i\lambda s}$ statt $e^{-i\lambda s}$.

Satz 7.7 a) *Sei* B_0 *definiert durch*

$$D(B_0) \;=\; C_0^\infty(\mathbb{R}) \otimes L_2(S^{m-1})\,, \qquad (B_0 f)(s,\omega) \;=\; \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial s} f(s,\omega)\,.$$

Mit $B := \overline{B_0}$ *gilt dann* $UAU^{-1} = B$.

b) *Mit der partiellen Fouriertransformation* F_1 *gilt*

(i) $F_1 UAU^{-1}F_1^{-1} = M_\lambda$ *Multiplikation mit* $t(\lambda,\omega) = \lambda$ *in* $L_2(\mathbb{R} \times S^{m-1})$,

(ii) $\sigma(A) = \mathbb{R}$,

(iii) $H_{ac}(A) = L_2(\mathbb{R}^m)$.

Beweis. a) Für einfache Tensoren $g \otimes h \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \otimes C^\infty(S^{m-1})$, $(g\otimes h)(r,\omega) = g(r)h(\omega)$, rechnet man nach (dabei stehen s bzw. τ für „stumme“ radiale bzw. sphärische Variablen):

$$\begin{aligned} UAU^{-1}\,(g\otimes h)\,(r,\omega) \;&=\; UA\Big\{s^{-m/2}\, g(\ln s)\, h(\tau)\Big\}(r,\omega) \\ &=\; U\frac{1}{i}\Big\{\Big[\frac{m}{2}s^{-m/2}\, g(\ln s) + s\Big(s^{-m/2}\; g(\ln s)\Big)'\Big]h(\tau)\Big\}(r,\omega) \\ &=\; \frac{1}{i}U\Big\{s^{-m/2}\, g'(\ln s)\, h(\tau)\Big\}(r,\omega) \;=\; \frac{1}{i}\, g'(r)\, h(\omega) \\ &=\; B_0(g\otimes h)\,(r,\omega)\,. \end{aligned}$$

Also ist $B_0\big|_{C_0^\infty(\mathbb{R})\otimes C^\infty(S^{m-1})}$ in UAU^{-1} enthalten. Ist $g\otimes h$ ein beliebiger einfacher Tensor aus $D(B_0)=C_0^\infty(\mathbb{R})\otimes L_2(S^{m-1})$, so gibt es eine Folge (h_n) aus $C^\infty(S^{m-1})$ mit $h_n\longrightarrow h$ in $L_2(S^{m-1})$, also auch

$$g\otimes h_n\longrightarrow g\otimes h\,,\qquad B_0(g\otimes h_n)\longrightarrow B_0(g\otimes h)\,.$$

Damit folgt, da UAU^{-1} abgeschlossen ist,

$$B_0\subset UAU^{-1}\,.$$

Zeigen wir noch, daß B_0 wesentlich selbstadjungiert ist, so folgt die Behauptung $\overline{B_0}=UAU^{-1}$.

Für beliebige $h\in L_2(S^{m-1})$ sei $H_h:=L\{h\}$. Wegen der wesentlichen Selbstadjungiertheit von $\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ auf $C_0^\infty(\mathbb{R})$ ist

$$(B_0\pm iI)\Big\{C_0^\infty(\mathbb{R})\otimes H_h\Big\} \;=\; \Big\{\Big(\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\pm iI\Big)C_0^\infty(\mathbb{R})\Big\}\otimes H_h$$

dicht in $L_2(\mathbb{R})\otimes H_h$ für jedes h; also ist $R(B_0\pm iI)$ dicht, und daraus folgt die wesentliche Selbstadjungiertheit von B_0.

b) Für $\hat g=Fg\in FC_0^\infty(\mathbb{R})$ erhält man mit Hilfe von Teil a)

$$\begin{aligned}F_1UAU^{-1}F_1^{-1}(\hat g\otimes h)\,(\lambda,\omega)&=F_1UAU^{-1}(g\otimes h)\,(\lambda,\omega)\\&=\frac{1}{i}F_1(g'\otimes h)\,(\lambda,\omega)=M_\lambda(\hat g\otimes h)\,(\lambda,\omega)\,.\end{aligned}$$

Durch Abschließung der Operatoren auf beiden Seiten folgt die Behauptung.

Die Aussagen (i) und (ii) ergeben sich nun sofort, da A unitär äquivalent ist zum Multiplikationsoperator mit $t(\lambda,\omega)=\lambda$ im Raum $L_2(\mathbb{R}\times S^{m-1})$. □

Der eben bewiesene Satz besagt, daß die ***Mellin–Transformation***

$$\mathcal{M}:=F_1U:L_2(\mathbb{R}^m)\longrightarrow L_2(\mathbb{R}\times S^{m-1})$$

im wesentlichen eine ***Spektraldarstellung*** von A ist. Ausgeschrieben sind $\mathcal{M}$ und $\mathcal{M}^{-1}$ gegeben durch

$$(\mathcal{M}f)\,(\lambda,\omega)\quad=\quad(F_1Uf)\,(\lambda,\omega)=(2\pi)^{-1/2}\,\underset{N\to\infty}{\mathrm{l.i.m.}}\int_{-N}^{N}e^{-i\lambda s+\frac{m}{2}s}f(e^s\omega)\,\mathrm{d}s$$

$$
\begin{aligned}
& \qquad (\text{Substitution} \quad s = \ln r) \\
&= (2\pi)^{-1/2} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \int\limits_{1/N}^{N} r^{-i\lambda+m/2-1} f(r\omega)\,\mathrm{d}r\,,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(\mathcal{M}^{-1}g)\,(r\omega) &= (U^{-1}F_1^{-1}g)\,(r\omega) = U^{-1}\Big\{(2\pi)^{-1/2} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \int\limits_{-N}^{N} e^{is\lambda} g(\lambda,\cdot)\,\mathrm{d}\lambda\Big\}\,(r,\omega) \\
&= (2\pi)^{-1/2}\, r^{-m/2} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \int\limits_{-N}^{N} e^{i\lambda\ln r} g(\lambda,\omega)\,\mathrm{d}\lambda \\
&= (2\pi)^{-1/2}\, r^{-m/2} \operatorname*{l.i.m.}_{N\to\infty} \int\limits_{-N}^{N} r^{i\lambda} g(\lambda,\omega)\,\mathrm{d}\lambda\,.
\end{aligned}
$$

7.3 Ein– und auslaufende Zustände; der Enß'sche Zerlegungssatz

Für hinreichend glatte f (z. B. aus $C_0^\infty(\mathbb{R}^m)$ oder $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$) ist

$$
\langle f, Af\rangle = \frac{1}{2}\sum \Big\{\Big\langle x_j f, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j} f\Big\rangle + \Big\langle \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_j} f, x_j f\Big\rangle\Big\}
$$

das symmetrisierte Skalarprodukt zwischen Ort und Impuls. Das bedeutet also intuitiv: Bei Elementen aus dem positiven/negativen Teilraum zu A ist das Skalarprodukt zwischen Ort und Impuls positiv/negativ. Man wird also erwarten, daß Elemente aus dem positiven/negativen Teilraum auslaufende/einlaufende Wellen sind. Dies wird (in etwas abgeschwächter Form) im folgenden Satz bewiesen.

Mit der Spektralschar E von A sei also

$$
P_+ := I - E(0)\,, \qquad P_- = E(0)\,;
$$

das sind die Projektionen auf den positiven bzw. negativen Teilraum zu A. Wegen $FAF^{-1} = -A$ (vgl. Satz 7.5) und $P_\pm = \chi_\pm(A)$, wobei $\chi_\pm$ die charakteristische Funktion der positiven/negativen Halbachse ist, gilt

$$
\begin{aligned}
FP_\pm &= F\chi_\pm(A) = F\chi_\pm(A)F^{-1}F = \chi_\pm(FAF^{-1})F \\
&= \chi_\pm(-A)F = P_\mp F\,.
\end{aligned}
$$

Im folgenden sei wieder $T_1 = -\Delta$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$.

Satz 7.8 *Sei* $g \in C_0^\infty(0,\infty)$ *und* $c > 0$ *mit* $g(s) = 0$ *für* $s \le c^2$. *Dann gibt es für jedes* $n \in \mathbb{N}$ *und jedes* $\varepsilon > 0$ *eine Konstante* $C = C(n,\varepsilon,g)$ *mit*

$$\left\| \chi_{<(2-\varepsilon)c|t|} e^{-itT_1} g(T_1) P_\pm \right\| \le C(1+|t|)^{-n} \qquad \text{für} \quad t \gtrless 0\,.$$

(Dies bedeutet tatsächlich: Für jedes $f \in L_2(\mathbb{R}^m)$ *ist* $g(T_1)P_\pm f$ *ein aus– bzw. einlaufender Zustand. Besonders bemerkenswert ist, daß diese Ungleichung nicht nur elementweise, sondern für die Operatornorm gilt.)*

Beweis. Wir zeigen im folgenden, daß für jedes $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ mit $Ff \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m \backslash \{0\})$ und jedes $\ell \in \mathbb{N}$ gilt

$$(e^{-itT_1} g(T_1) P_\pm f)(x) \;=\; \langle h_{x,t}^\pm, Ff \rangle$$

mit

$$\|h_{x,t}^\pm\| \le C_{\ell,\varepsilon,g}(1+|t|)^{-\ell} \quad \text{für} \quad |x| < (2-\varepsilon)c|t| \qquad \text{und} \quad t \begin{cases} > 1\,, \\ < -1\,. \end{cases}$$

Wählen wir hier $\ell > n + \frac{m}{2}$, so folgt (mit $V_m =$ Volumen der 1–Kugel in $\mathbb{R}^m$)

$$\begin{aligned} \left\| \chi_{<(2-\varepsilon)c|t|} e^{-itT_1} g(T_1) P_\pm f \right\|^2 &= \int\limits_{|x|<(2-\varepsilon)c|t|} \left| \langle h_{x,t}^\pm,\, Ff \rangle \right|^2 \mathrm{d}x \\ &\le V_m \,[(2-\varepsilon)c|t|\,]^m\, C_{\ell,\varepsilon,g}^2\, (1+|t|)^{-2\ell} \|Ff\|^2 \\ &\le C^2\, (1+|t|)^{-2n}\, \|f\|^2\,; \end{aligned}$$

das ist die Behauptung des Satzes.

Bleibt also die obige Darstellung zu beweisen. Für f mit $Ff \in C_0^\infty(\mathbb{R}^m \backslash \{0\})$ gilt

$$\begin{aligned} (e^{-itT_1} g(T_1) P_\pm f)(x) &= (2\pi)^{-m/2} \int\limits_{\mathbb{R}^m} e^{i(xy-ty^2)} g(y^2)\, (FP_\pm f)(y)\, \mathrm{d}y \\ &= \langle k_{x,t},\, FP_\pm f \rangle = \langle k_{x,t},\, P_\mp Ff \rangle = \langle P_\mp k_{x,t},\, Ff \rangle \end{aligned}$$

mit

$$k_{x,t}(y) = (2\pi)^{-m/2}\, e^{-i(xy-ty^2)}\, \overline{g(y^2)}\,.$$

Dies ist die behauptete Identität mit

$$h_{x,t}^\pm := P_\mp k_{x,t}\,,$$

$$\|h_{x,t}^\pm\| = \|P_\mp k_{x,t}\| = \|\mathcal{M} P_\mp k_{x,t}\| = \|\chi_\mp \mathcal{M} k_{x,t}\|\,.$$

Es bleibt die gewünschte Abschätzung für $\|h^{\pm}_{x,t}\| = \|\chi_{\mp}\mathcal{M}k_{x,t}\|$ zu beweisen. Dies gelingt einmal mehr mit Hilfe der Methode der ***stationären Phase***. Wir beschränken uns auf den Fall „ $-$ “. Es sei d so gewählt, daß $g(s) = 0$ gilt für $s \geq d^2$. Dann gilt für $\lambda > 0$ und $t < -1$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}k_{x,t}(\lambda,\omega) &= (2\pi)^{-(m+1)/2} \int r^{-i\lambda-1+\frac{m}{2}} e^{-i(rx\omega - tr^2)}\, \overline{g(r^2)}\,\mathrm{d}r \\
&= C_1 \int \exp\Big\{ -i(rx\omega - tr^2 + \lambda \ln r)\Big\}\, r^{\frac{m}{2}-1}\, \overline{g(r^2)}\,\mathrm{d}r \\
&= C_1 \int i\Big(x\omega - 2tr + \frac{\lambda}{r}\Big) \exp\Big\{...\Big\} \frac{r^{\frac{m}{2}-1}\overline{g(r^2)}}{i(x\omega - 2tr + \frac{\lambda}{r})}\,\mathrm{d}r \\
&= -iC_1 \int \exp\Big\{...\Big\} \frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{r^{\frac{m}{2}-1}\overline{g(r^2)}}{x\omega - 2tr + \frac{\lambda}{r}}\right] \mathrm{d}r\,.
\end{aligned}$$

Durch $(\ell + 1)$–fache Anwendung dieses Schrittes erhält man

$$\mathcal{M}k_{x,t}(\lambda,\omega) = (-i)^{l+1} C_1' \int \exp\Big\{...\Big\} \frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{x\omega - 2tr + \frac{\lambda}{2}}\frac{\partial}{\partial r}\left[... \left[\frac{r^{\frac{m}{2}-1}\,\overline{g(r^2)}}{x\omega - 2tr + \frac{\lambda}{r}}\right] ... \right]\right] \mathrm{d}r\,.$$

Für $t < -1,\ \lambda > 0,\ |x| < (2-\varepsilon)c|t|$ und $r^2 \in \operatorname{supp} g$ (d. h. $c \leq r \leq d$) gilt

$$\Big|x\omega - 2tr + \frac{\lambda}{r}\Big| > 2|t|r - |x| + \frac{\lambda}{r} > \Big(2c - (2-\varepsilon)c\Big)|t| + \frac{\lambda}{r} > \varepsilon c|t| + \frac{\lambda}{d}\,.$$

Damit folgt für $|x| < (2-\varepsilon)c|t|$ die Abschätzung

$$\Big|\mathcal{M}k_{x,t}(\lambda,\omega)\Big| \leq C_2(1 + |t| + |\lambda|)^{-\ell-1} \qquad \text{für} \quad t < -1,\ \lambda > 0,\ \omega \in S^{m-1}\,,$$

also, für $x < (2-\varepsilon)c|t|$ und $t < -1$,

$$\Big\|h^{-}_{x,t}\Big\| = \Big\{\int_0^\infty \int_{S^{m-1}} \Big|\mathcal{M}k_{x,t}(\lambda,\omega)\Big|^2 \mathrm{d}\omega\, \mathrm{d}\lambda\Big\}^{1/2} \leq C_3(1 + |t|)^{-\ell}\,. \qquad \square$$

Hilfssatz 7.9 *Seien A_σ, B_σ und K beschränkte Operatoren im Hilbertraum H. Gilt $A_\sigma \xrightarrow{s} A_0$ und $B_\sigma^* \xrightarrow{s} B_0^*$ für $\sigma \longrightarrow 0$ und ist K kompakt, so gilt*

$$\|A_\sigma K B_\sigma - A_0 K B_0\| \longrightarrow 0 \qquad \textit{für} \quad \sigma \longrightarrow 0\,.$$

Beweis. K kann man darstellen als Produkt von zwei kompakten Operatoren, $K = K_2K_1$: Hat K die Form

$$Kx = \sum_n s_n \langle e_n, x\rangle f_n$$

mit orthonormalen Folgen (e_n) und (f_n) und einer Nullfolge nichtnegativer Zahlen (s_n), so kann man z. B. wählen

$$K_1x = \sum_n s_n^{1/2} \langle e_n, x\rangle \, e_n \,, \quad K_2x = \sum_n s_n^{1/2} \langle e_n, x\rangle \, f_n \,.$$

Wir zeigen $\|A_\sigma K_1 - A_0K_1\| \longrightarrow 0$; entsprechend folgt dann

$$\|K_2B_\sigma - K_2B_0\| \;=\; \|B_\sigma^* K_2^* - B_0^* K_2^*\| \longrightarrow 0\,,$$

und damit die Behauptung wegen $A_\sigma K_1K_2B_\sigma - A_0K_1K_2B_0 = (A_\sigma K_1 - A_0K_1)K_2B_\sigma + A_0K_1(K_2B_\sigma - K_2B_0)$.

Nehmen wir an, daß $\|A_\sigma K_1 - A_0K_1\| \longrightarrow 0$ **nicht** gilt. Dann gibt es ein $\varepsilon > 0$, eine Nullfolge (σ_n) und eine beschränkte Folge (x_n) aus H mit

$$\|(A_{\sigma_n}K_1 - A_0K_1)x_n\| \geq \varepsilon \qquad \text{für alle} \quad n\,.$$

Da K_1 kompakt ist, enthält (x_n) eine Teilfolge (x_{n_k}), für die $(K_1x_{n_k})$ konvergiert. Zusammen mit $A_{\sigma_{n_k}} \xrightarrow{s} A_0$ für $k \longrightarrow \infty$, ergibt sich ein Widerspruch. □

Satz 7.10 *Sei* $T_1 = -\Delta$, V *eine Enß–Störung,* $T_2 := T_1 + V$, $W_\pm := W_\pm(T_2, T_1)$, g *und* $P_\pm$ *wie in Satz 7.8. Dann ist*

$$(W_\pm - I)g(T_1)P_\pm \qquad \textit{kompakt}$$

Beweis. Wir betrachten hier nur den Fall „ + “. Es gilt

$$\Big(e^{itT_2}e^{-itT_1} - I\Big)g(T_1)P_+ \;=\; i\int_0^t e^{isT_2}Ve^{-isT_1}g(T_1)P_+ \,\mathrm{d}s\,,$$

wobei das Integral als Riemann–Integral bezüglich der Operatornorm verstanden werden kann, denn da $Vg(T_1) \;=\; \{V(T_1 - i)^{-2}\}\,\{(T_1 - i)^2 g(T_1)\}$ kompakt ist, ist der Integrand nach Hilfssatz 7.9

normstetig. Da der Integrand für jedes t kompakt ist, ist das Integral kompakt. Es genügt also zu zeigen, daß das Integral für $t \longrightarrow \infty$ bezüglich der Operatornorm konvergiert. Es gilt

$$\begin{aligned}
&\|e^{isT_2} V e^{-isT_1} g(T_1) P_+\| \;=\; \|V e^{-isT_1} g(T_1) P_+\| \\
\leq\;& \|V(T_1 - i)^{-1}\| \, \|\chi_{<(2-\varepsilon)c|s|} e^{-isT_1} (T_1 - i)\, g(T_1) P_+\| \\
&+ \|V(T_1 - i)^{-1} \chi_{>(2-\varepsilon)c|s|}\| \, \|(T_1 - i)\, g(T_1) P_+\| \,.
\end{aligned}$$

Ist $c > 0$ so, daß $g(s) = 0$ gilt für $s \leq c^2$, so ist der erste Term nach Satz 7.8 in $L_1(0,\infty)$; der zweite Term ist in $L_1(0,\infty)$, da V eine Enß–Störung ist. □

Satz 7.11 (Enß'scher Zerlegungssatz) *Sei $T_1 = -\Delta$, V eine Enß–Störung, $T_2 := T_1 + V$, E_2 die Spektralschar von T_2, $\varphi_n \in L_2(\mathbb{R}^m)$ mit*

(i) $\|\varphi_n\| \longrightarrow 1$ *für* $n \longrightarrow \infty$,

(ii) $\|\chi_{<n} \varphi_n\| \longrightarrow 0$ *für* $n \longrightarrow \infty$,

(iii) $\|\Big(E_2(b^2) - E_2(a^2)\Big)\varphi_n\| \longrightarrow 1$ *für* $n \longrightarrow \infty$ *und geeignete* a, b *mit* $0 < a < b$.

Ist $g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ *mit*

$$\operatorname{supp} g \subset \left(\tfrac{1}{4}\, a^2,\, 4b^2\right) \,.$$

$$g(s) \;=\; 1 \quad \textit{in} \quad (a^2,\, b^2), \qquad 0 \leq g(s) \leq 1 \quad \textit{für alle} \quad s \in \mathbb{R}\,,$$

so gelten für

$$\varphi_{n,in} := g(T_1)\, P_-\, \varphi_n\,, \qquad \varphi_{n,out} := g(T_1)\, P_+\, \varphi_n$$

die Aussagen:

$$\begin{aligned}
&\|\varphi_{n,in}\| \leq \|\varphi_n\| \qquad \textit{und} \qquad \|\varphi_{n,out}\| \leq \|\varphi_n\|\,, \\
&\varphi_n - (\varphi_{n,in} + \varphi_{n,out}) \longrightarrow 0 \quad \textit{für} \quad n \longrightarrow \infty\,, \\
&(W_- - I)\varphi_{n,in} \longrightarrow 0 \qquad \textit{für} \quad n \longrightarrow \infty\,, \\
&(W_+ - I)\varphi_{n,out} \longrightarrow 0 \qquad \textit{für} \quad n \longrightarrow \infty\,.
\end{aligned}$$

Beweis. Auf Grund der Definition von $\varphi_{n,in}$ und $\varphi_{n,out}$ gilt offenbar

$$\|\varphi_{n,in}\| \leq \|g(T_1)\|\,\|P_-\|\,\|\varphi_n\| \leq \|\varphi_n\|\,, \qquad \|\varphi_{n,out}\| \leq \|\varphi_n\|\,,$$

$$\begin{aligned}\varphi_n - (\varphi_{n,in} + \varphi_{n,out}) &= \varphi_n - g(T_1)(P_+ + P_-)\varphi_n = \varphi_n - g(T_1)\varphi_n \\ &= \Big(I - g(T_2)\Big)\varphi_n + \Big(g(T_2) - g(T_1)\Big)\varphi_n\,.\end{aligned}$$

Wegen (ii) gilt $\varphi_n \xrightarrow{w} 0$, also

$$\Big(g(T_2) - g(T_1)\Big)\varphi_n \longrightarrow 0\,,$$

da nach Satz 7.4 $g(T_2) - g(T_1)$ kompakt ist. Außerdem gilt

$$\Big\|\Big(I - g(T_2)\Big)\varphi_n\Big\| \leq \Big\|\Big(I - (E_2(b^2) - E_2(a^2))\Big)\varphi_n\Big\| \longrightarrow 0\,.$$

Damit ist die zweite Behauptung bewiesen. Die letzten beiden Behauptungen folgen mit Hilfe der Kompaktheit von $(W_\pm - I)g(T_1)P_\pm$ (vgl. Satz 7.10):

$$\begin{aligned}\Big\|(W_+ - I)\varphi_{n,out}\Big\| &= \Big\|(W_+ - I)g(T_1)P_+\varphi_n\Big\| \longrightarrow 0\,, \\ \Big\|(W_- - I)\varphi_{n,in}\Big\| &= \Big\|(W_- - I)g(T_1)P_-\varphi_n\Big\| \longrightarrow 0\,.\end{aligned}$$ □

7.4 Fortsetzung des Beweises des Satzes von Enß

Von allen Aussagen des Satzes 7.1 haben wir bisher lediglich die Existenz der Wellenoperatoren $W_\pm = W_\pm(T_2, T_1)$ bewiesen (vgl. Abschnitt 7.1). Als nächstes beweisen wir die Vollständigkeit der Wellenoperatoren, womit dann Teil a) von Satz 7.1 vollständig bewiesen ist:

Wir beweisen die ***Vollständigkeit von*** $\mathbf{W}_+$. Nehmen wir an, daß W_+ nicht vollständig ist, d. h. $R(W_+)$ ist ein T_2 reduzierender echter Teilraum von $H_{ac}(T_2)$, $H_{ac}(T_2) \cap R(W_+)^\perp \neq \{0\}$. Dann gibt es a, b mit $0 < a < b < \infty$ und ein

$$\psi \in R\Big(E_2(b^2) - E_2(a^2)\Big) \cap H_{ac}(T_2) \cap R(W_+)^\perp \quad \text{mit} \quad \|\psi\| = 1\,.$$

Nach Satz 2.10 a gilt für jedes Kompaktum K in $\mathbb{R}^m$

$$\int\limits_K \Big|e^{-itT_2}\psi(x)\Big|^2\,\mathrm{d}x \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty\,.$$

Also gibt es eine Folge (τ_n) mit $\tau_n \longrightarrow +\infty$ und

$$\|\chi_{<n}\varphi_n\| \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad \varphi_n := e^{-i\tau_n T_2}\psi$$

(man kann z. B. $\tau_n \geq n$ so wählen, daß $\left\|\chi_{<n}e^{-i\tau_n T_2}\psi\right\| < \dfrac{1}{n}$ gilt). Diese φ_n erfüllen die Voraussetzungen des Zerlegungssatzes. Definieren wir wie in Satz 7.11 mit $g \in C_0^\infty(0,\infty)$, $\operatorname{supp} g \subset (\frac{1}{4}a^2,\, 4b^2)$ die Funktionen $\varphi_{n,in}$ und $\varphi_{n,out}$ durch

$$\varphi_{n,in} := g(T_1)P_-\varphi_n, \quad \varphi_{n,out} := g(T_1)P_+\varphi_n\,,$$

so gilt also

$$\begin{aligned}
&\|\varphi_{n,in}\| \leq 1\,, \qquad \|\varphi_{n,out}\| \leq 1\,,\\
&\varphi_n - \varphi_{n,in} - \varphi_{n,out} \;\longrightarrow\; 0 \quad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,,\\
&\varphi_n - W_-\varphi_{n,in} - W_+\varphi_{n,out}\\
&\qquad = -(W_- - I)\varphi_{n,in} - (W_+ - I)\varphi_{n,out} - (\varphi_{n,in} + \varphi_{n,out} - \varphi_n)\\
&\qquad \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,.
\end{aligned}$$

Weiter folgt

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_n, W_+\varphi_{n,out}\rangle &= 0, \qquad \text{da} \quad \varphi_n = e^{-i\tau_n T_2}\psi \in R(W_+)^\perp\,,\\
|\langle \varphi_n, W_-\varphi_{n,in}\rangle| &= |\langle \psi, e^{i\tau_n T_2}W_-\varphi_{n,in}\rangle|\\
&= |\langle \psi, W_- e^{i\tau_n T_1}\varphi_{n,in}\rangle| \;=\; |\langle W_-^*\psi, e^{i\tau_n T_1}\varphi_{n,in}\rangle|\\
&\leq \underbrace{\|\chi_{>ac|\tau_n|}W_-^*\psi\|}_{\to 0}\;\underbrace{\|\varphi_{n,in}\|}_{\leq 1} + \|\psi\|\;\underbrace{\|\chi_{<ac|\tau_n|}e^{-i(-\tau_n)T_1}g(T_1)P_-\varphi_n\|}_{\to 0 \text{ (Satz 7.8)}}\\
&\longrightarrow \quad 0 \qquad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,.
\end{aligned}$$

Damit folgt

$$\|\psi\|^2 = \|\varphi_n\|^2 = \lim_{n\to\infty}\Big\langle \varphi_n, W_-\varphi_{n,in} + W_+\varphi_{n,out}\Big\rangle = 0\,.$$

Das ist ein Widerspruch zu $\|\psi\| = 1$.

Entsprechend zeigt man die ***Vollständigkeit von*** $\mathbf{W}_-$: Man muß jetzt (τ_n) mit $\tau_n \longrightarrow -\infty$ wählen; im letzten Teil des Beweises wechseln W_+ und W_- im wesentlichen ihre Rollen.

Ebenso, wie hier die Vollständigkeit $(R(W_\pm) = H_{ac}(T_2))$ gezeigt wurde, kann auch $R(W_\pm) = H_c(T_2)$ gezeigt werden, wenn man Satz 2.10 b (RAGE–Theorem) statt Satz 2.10 a verwendet. Wir beweisen diese Aussage im folgenden Beweisteil auf etwas anderem Wege.

Beweis der Aussagen b) und c) von Satz 7.1. Da sich (eventuell vorhandene) negative Eigenwerte nur bei 0 häufen können, folgen beide Aussagen aus

$$\dim\left\{R\Big(E_2(b^2) - E_2(a^2)\Big) \cap H_s(T_2)\right\} < \infty \qquad \text{für} \quad 0 < a < b < \infty\,.$$

Nehmen wir an, daß dies nicht gilt. Dann gibt es a, b mit $0 < a < b < \infty$ und eine orthonormale Folge (f_k) aus $L := R\Big(E_2(b^2) - E_2(a^2)\Big) \cap H_s(T_2)$. Da T_2 auf L beschränkt ist ($\Big\|T_2\Big|_L\Big\| \le b^2$), gilt dann auch $T_2 f_k \xrightarrow{w} 0$. Da $\chi_{<n}$ für jedes n T_2–kompakt ist, folgt $\chi_{<n} f_k \longrightarrow 0$ für $k \longrightarrow \infty$ und festes n. Also gibt es eine Folge $(k(n))$ mit $k(n+1) > k(n)$ und

$$\chi_{<n} f_{k(n)} \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,.$$

Die Folge $\varphi_n := f_{k(n)}$ erfüllt also die Voraussetzungen des Zerlegungssatzes. Für die entsprechenden $\varphi_{n,in}$ und $\varphi_{n,out}$ erhält man also wie im Beweis von Teil a)

$$\varphi_n - W_- \varphi_{n,in} - W_+ \varphi_{n,out} \ \longrightarrow\ 0 \qquad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty\,.$$

Wegen $\varphi_n \in H_s(T_2) \ =\ H_{ac}(T_2)^\perp$ und

$$W_- \varphi_{n,in} + W_+ \varphi_{n,out} \in H_{ac}(T_2)$$

folgt hieraus $\varphi_n \longrightarrow 0$, im Widerspruch zur Konstruktion von φ_n. □

7.5 Anhang zu 7: Der Satz von Stone–Weierstraß

Beweise des Satzes von Stone–Weierstraß und des folgenden Korollars finden sich in Abschnitt 11 des Skriptes „Einführung in die Funktionalanalysis und die Lebesgue'sche Integrationstheorie".

Satz 7.12 (Stone–Weierstraß) *Sei X ein kompakter Hausdorff–Raum, $C(X)$ der Raum der stetigen komplexwertigen Funktionen auf X, ausgestattet mit der Supremumsnorm $\|\cdot\|_\infty$. Sei F eine Teilmenge von $C(X)$ mit den Eigenschaften*

(i) *F enthält eine konstante Funktion ungleich 0 (z. B. die Funktion 1),*

(ii) F *trennt die Punkte von* X, *d. h. zu* $x_1, x_2 \in X$ *mit* $x_1 \neq x_2$ *gibt es ein* $f \in F$ *mit* $f(x_1) \neq f(x_2)$,

(iii) *mit jedem* $f \in F$ *liegt auch* $\overline{f}$ $(\overline{f}(x) := \overline{f(x)})$ *in* F *(auf diese Eigenschaft kann natürlich verzichtet werden, wenn* $C(X)$ *den Raum der stetigen reellwertigen Funktionen bezeichnet).*

Dann ist die von F *erzeugte Algebra dicht in* $C(X)$.

Korollar 7.13 *a) Sei* $C^*(\mathbb{R})$ *der Raum der stetigen Funktionen auf* $\mathbb{R}$ *mit* $\lim\limits_{x\to-\infty} f(x) = \lim\limits_{x\to\infty} f(x)$ *(endlich),* $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$. *Dann ist die Menge der Polynome in* $(x-z)^{-1}$ *und* $(x-\overline{z})^{-1}$ *dicht in* $C^*(\mathbb{R})$; *das gleiche gilt für* $(x-z)^{-2}$ *und* $(x-\overline{z})^{-2}$, *aber nicht für* $(x-z)^{-n}$ *und* $(x-\overline{z})^{-n}$ *mit* $n \geq 3$.

b) Ist $C^*([\mu,\infty))$ *der Raum der auf* $[\mu,\infty)$ *stetigen Funktionen, für die* $\lim\limits_{x\to\infty} f(x)$ *existiert, und* $z \in (-\infty,\mu)$, *so ist die Menge der Polynome in* $(x-z)^{-n}$ *dicht in* $C^*([\mu,\infty))$ *für jedes* $n \in \mathbb{N}$.

8 Prinzipien der Mehrkanalstreuung

8.1 Das Kanalkonzept

Unsere bisherigen Überlegungen zur Streutheorie gingen von folgender Vorstellung aus: Ein System wird durch den Schrödingeroperator T (bisher T_2) beschrieben. Die Streuzustände des Systems verhalten sich für $t \longrightarrow \pm\infty$ wie geeignete Zustände ***eines*** („freien“) Systems, das durch einen (meistens wesentlich einfacheren) Schrödingeroperator T_0 (bisher T_1) beschrieben wird.

Nun ist es aber keineswegs zwingend, daß es nur einen Typ asymptotischen Verhaltens gibt. Tatsächlich können sich während des Streuprozesses sogar die Zahl und die Art der beteiligten Teilchen ändern.

Seien im folgenden T_j ($j \in I$, beliebige Indexmenge) selbstadjungierte Operatoren in Hilberträumen H_j (da im folgenden stets klar sein wird, aus welchem Raum die Elemente sind, verzichten wir auf eine besondere Bezeichnung der Normen in H_j),

$$U_j : H_j \longrightarrow H \qquad T_j\text{–}\textbf{\textit{asymptotisch isometrisch}},$$

d. h. es gilt

$$\lim_{|t|\to\infty} \|U_j e^{-itT_j} x\| = \|x\| \quad \text{für alle} \quad x \in H_j$$

(U_j identifiziert H_j mit einem Teilraum von H; diese Einbettung soll für jedes $x \in H$ auf $e^{-itT_j} x$ „im wesentlichen“ isometrisch wirken). Die U_j werden als ***Identifizierungsoperatoren*** bezeichnet.

Man definiert (falls der Limes existiert)

$$W_{j,\pm} = W_\pm(T, U_j, T_j) = \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT} U_j e^{-itT_j} .$$

Dies ist dann jedenfalls ein isometrischer Operator von H_j in H.

Natürlich sollte (im Sinne einer grundlegenden Forderung an die Streutheorie) gelten:

> Der Typ des asymptotischen Verhaltens (d. h. oben z. B. der Index j) für $t \longrightarrow +\infty$ bzw. für $t \longrightarrow -\infty$ ist eine Observable des Systems.

Wenn ein bestimmtes asymptotisches Verhalten für $t \longrightarrow +\infty$ (bzw. für $t \longrightarrow -\infty$) vorliegt, kann also für $t \longrightarrow +\infty$ (bzw. für $t \longrightarrow -\infty$) nicht gleichzeitig ein anderes vorliegen. Das bedeutet insbesondere, wenn zwei Zustände für $t \longrightarrow +\infty$ (bzw. für $t \longrightarrow -\infty$) verschiedenes asymptotisches Verhalten haben, liegen sie in den Eigenräumen zu verschiedenen Eigenwerten eines geeigneten selbstadjungierten Operators, sind also orthogonal; somit sollte gelten

$$R(W_{j,+}) \perp R(W_{k,+}) \quad \text{und} \quad R(W_{j,-}) \perp R(W_{k,-}) \qquad \text{für} \quad j \neq k$$

(i. allg. kann aber nicht $R(W_{j,+}) \perp R(W_{k,-})$ erwartet werden). Dies ist eine Forderung an die Definition der Operatoren T_j (die aber durch diese Forderung i. allg. nicht eindeutig bestimmt sind).

Die Räume H_j werden als ***Kanäle*** (oder auch ***Kanalräume***), die T_j als die ***Kanal–Operatoren*** (Channel Hamiltonians), $W_{j,\pm}$ als die ***Kanal–Wellenoperatoren*** bezeichnet. Die obige Orthogonalitätsrelation bezeichnet man kurz als die ***Orthogonalität der Kanäle***.

Aus Sicht der Streutheorie wird man erwarten, daß durch $U_j e^{-itT_j} x_j$ (bzw. durch die sich für $t \longrightarrow \pm\infty$ asymptotisch genauso verhaltenden Zustände $e^{-itT} y_{j,\pm}$ mit $y_{j,\pm} = W_{j,\pm} x_j$) die Streuzustände des Sytems beschrieben werden. Demgemäß sagt man, daß die oben beschriebene Familie von Wellenoperatoren $\{W_{j,\pm} : j \in I\}$ ***asymptotisch vollständig*** ist, wenn gilt

$$H = H_p(T) \oplus \Big(\bigoplus_j R(W_{j,\pm}) \Big) \qquad (\text{für} \quad + \quad \text{und} \quad - \quad \textbf{getrennt}),$$

bzw. ***vollständig***, wenn wenigstens gilt

$$H_{ac}(T) = \bigoplus_j R(W_{j,\pm}) \, .$$

Die oben geforderte Orthogonalität der Kanäle bedeutet u. a., daß man ***nicht zu viele*** bzw. ***zu große Kanäle*** wählen darf. Die Vollständigkeit bedeutet andererseits, daß man ***hinreichend viele*** bzw. ***hinreichend große Kanäle*** wählen muß.

In Analogie zur Definition bei „einfachen“ Streusystemen, wie wir sie bisher betrachtet haben (das sind nach J. M. Jauch solche, die durch einen Kanal allein beschrieben werden, Ein–Kanal–Streuung), sagt man auch hier, daß die Wellenoperatoren $\{W_{j,\pm} : j \in I\}$ ***schwach*** (***asymptotisch***) ***vollständig*** sind, wenn lediglich gilt

$$\bigoplus_j R(W_{j,+}) = \bigoplus_j R(W_{j,-}) \, .$$

Natürlich gilt wieder die intertwining Eigenschaft

$$TW_{j,\pm} = W_{j,\pm}T_j$$

und

$$W_{j,\pm}^* W_{j,\pm} = I_{H_j}\,, \quad W_{j,\pm}W_{j,\pm}^* = P_{R(W_{j,\pm})}\,,$$

also

$$T\Big|_{\oplus R(W_{j,\pm})} \cong \bigoplus_j T_j\,,$$

und im Fall der asymptotischen Vollständigkeit, bzw. der Vollständigkeit, bzw. der schwachen Vollständigkeit

$$\bigoplus_j T_j \cong T\Big|_{H_p(T)^\perp} \quad \text{bzw.} \quad T\Big|_{H_{ac}(T)} \quad \text{bzw.} \quad T\Big|_{\bigoplus\limits_j R(W_{j,\pm})}\,.$$

Ist die Familie von Wellenoperatoren $\{W_{j,\pm} : j \in I\}$ wenigstens schwach vollständig, so definiert man den ***Streuoperator***

$$S:\ \bigoplus_j H_j \longrightarrow \bigoplus_j H_j$$

durch

$$(Sf)_j = \sum_k W_{j,+}^* W_{k,-} f_k = \sum_k S_{jk} f_k \qquad \text{für} \quad f = (f_k) \in \bigoplus_k H_k$$

mit $S_{jk} := W_{j,+}^* W_{k,-}$. Wegen $\bigoplus_j R(W_{j,+}) = \bigoplus_j R(W_{j,-})$ (schwache Vollständigkeit) ist dieser Streuoperator offensichtlich unitär.

Formal kann man (falls die $R(U_j)$ paarweise orthogonal sind) leicht auf die Mehr–Kanal–Schreibweise verzichten, indem man definiert

$$\begin{aligned}
&H_0 := \bigoplus_j H_j\,, \qquad T_0 := \bigoplus_j T_j\,,\\
&U_0 :\ H_0 \longrightarrow H\,, \quad U_0 f = \sum_j U_j f_j\,,\\
&W_\pm := \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT} U_0 e^{-itT_0}\,,\\
&S = W_+^* W_-\,.
\end{aligned}$$

Offensichtlich ist

$$W_\pm = \bigoplus_j W_{j,\pm}(T, U_j, T_j) \quad \text{und} \quad W_{j,\pm} = W_\pm\Big|_{H_j} .$$

Deshalb sind diese $W_\pm$ genau dann asymptotisch vollständig / vollständig / schwach vollständig, wenn dies für die Familie von Kanalwellenoperatoren $\{W_{j,\pm} : j \in I\}$ gilt; die Orthogonalität der Kanäle ergibt sich sofort aus der Isometrie von $W_\pm$. — Diese Schreibweise trägt sicher nicht zum Verständnis der Mehr–Kanal–Streuung bei, sondern eher zur Verschleierung. (In dieser Form handelt es sich um das, was man als „Streutheorie zwischen zwei Hilberträumen“ bezeichnet; dies ist allerdings nur für den Fall, daß der Identifizierungsoperator U_0 nicht unitär ist, etwas wirklich Neues.)

Wir fassen zusammen: Die ***Grundprobleme der Mehr–Kanal–Streuung*** sind: Das Auffinden der Kanäle (d. h. der Kanaloperatoren T_j in geeigneten Kanalräumen H_j), die die Arten möglichen asymptotischen Verhaltens beschreiben, und der zugehörigen Identifizierungsoperatoren U_j so, daß

(i) die Kanal–Wellenoperatoren $W_{j,\pm} = \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT} U_j e^{-itT_j}$ existieren,

(ii) die Kanäle orthogonal sind,

(iii) die Familie von Wellenoperatoren $\{W_{j,\pm} : j \in I\}$ (schwach) vollständig ist.

Im nächsten Abschnitt konkretisieren wir das bis hierher beschriebene Konzept an einem besonders einfachen (wenn auch physikalisch nicht relevanten) Beispiel. Im folgenden Paragraphen werden wir uns dann mit dem eigentlichen Gegenstand der Mehr–Kanal–Streuung befassen, der Streuung in Mehr–Teilchen–Systemen.

8.2 Ein eindimensionales 2–Kanal–System

Wir verallgemeinern hier das in 6 studierte Problem. Es sei T der in $L_2(\mathbb{R})$ definierte Operator

$$Tf = -f'' + qf$$

mit $q : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ z. B. stetig und

$$q(x) = \begin{cases} q_1 & \text{für } x \le -a\,, \\ q_2 & \text{für } x > a\,, \end{cases} \qquad \text{o. E.} \quad q_1 \le q_2 .$$

T entsteht also aus dem Operator $-\Delta = -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ durch Störung mit dem beschränkten Operator der Multiplikation mit q; also ist T ***selbstadjungiert*** auf $D(T) = D(-\Delta)$.

Mit Rechnungen, die denen von 6 weitgehend entsprechen (und die auf etwas andere Weise in J. Weidmann: „Spectral Theory of Ordinary Differential Operators“, LN **1258**, 17.C explizit durchgeführt sind), kann man zeigen, daß der stetige Teil von T, d. h. T unter Vernachlässigung der evtl. vorhandenen endlich vielen Eigenwerte $< q_1$, eine Spektraldarstellung $\mathcal{F}$ der folgenden Form besitzt[4]:

$$\mathcal{F}:\ R\big(E((q_{1,\infty}))\big) \longrightarrow L_2\Big(q_1,\infty;\ \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda-q_1}}\Big) \oplus L_2\Big(q_2,\infty;\ \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda-q_2}}\Big),$$

$$(\mathcal{F}f)(\lambda) \;=\; \underset{N\to\infty}{\mathrm{l.i.m.}} \begin{pmatrix} \int_{-N}^{N} \overline{u_1(x,\lambda)}\, f(x)\,\mathrm{d}x \\ \int_{-N}^{N} \overline{u_2(x,\lambda)}\, f(x)\,\mathrm{d}x \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}(\mathcal{F}^{-1}g)(x) \;&=\; \underset{N\to\infty}{\mathrm{l.i.m.}} \left\{ \int_{q_1}^{N} u_1(x,\lambda)\, g_1(\lambda) \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda-q_1}} \right.\\ &\qquad \left. + \int_{q_2}^{N} u_2(x,\lambda)\, g_2(\lambda) \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda-q_2}} \right\}.\end{aligned}$$

Dabei sind die $u_j(\cdot,\lambda)$ für $\lambda > q_1$ bzw. $\lambda > q_2$ Lösungen der Differentialgleichung $-u'' + qu = \lambda u$ mit

$$u_1(x,\lambda) = \begin{cases} \exp\Big(i\sqrt{\lambda-q_1}\,x\Big) + \varrho_1(\lambda)\exp\Big(-i\sqrt{\lambda-q_1}\,x\Big) & \text{für } x < -a\,, \\ \tau_1(\lambda)\exp\Big(i\sqrt{\lambda-q_2}\,x\Big) & \text{für } x > a\,, \end{cases}$$

$$u_2(x,\lambda) = \begin{cases} \tau_2(\lambda)\exp\Big(-i\sqrt{\lambda-q_1}\,x\Big) & \text{für } x < -a\,, \\ \exp\Big(-i\sqrt{\lambda-q_2}\,x\Big) + \varrho_2(\lambda)\exp\Big(i\sqrt{\lambda-q_2}\,x\Big) & \text{für } x > a\,, \end{cases}$$

und

$$\mathrm{Im}\,\sqrt{z} > 0 \quad \text{für} \quad z \in \mathbb{C}\setminus[0,\infty)\,, \qquad \sqrt{z} > 0 \quad \text{für} \quad z > 0\,;$$

offenbar gilt

[4] Da die Lösungen von $(\tau - q_1)u = 0$ nur endlich viele Nullstellen haben, folgt aus der Oszillationstheorie, daß nur endlich viele Eigenwerte $< q_1$ existieren; da für $\lambda \geq q_1$ offenbar keine Lösung von $(\tau-\lambda)u = 0$ in $L_2(-\infty,0)$ liegt, hat T keine Eigenwerte in $[q_1,\infty)$.

$$u_1(\cdot\,,z) \in L_2(c,\infty) \qquad \text{für} \quad z \in \mathbb{C}\backslash[q_2,\infty)\,,$$

$$u_2(\cdot\,,z) \in L_2(-\infty,c) \qquad \text{für} \quad z \in \mathbb{C}\backslash[q_1,\infty)\,.$$

Betrachtet man „Wellenpakete“

$$\psi_j(x,t) \;=\; e^{-itT}\psi_j(x) \;=\; \int_{q_j}^{\infty} u_j(x,\lambda)\,e^{-it\lambda}\,g(\lambda)\,\frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda-q_j}}\,,$$

$$\psi_j(x) \;=\; \int_{q_j}^{\infty} u_j(x,\lambda)\,g(\lambda)\,\frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda-q_j}}$$

mit $g \in C_0^\infty(q_j,\infty)$, so erkennt man nach Einsetzen der expliziten Ausdrücke für $u_j(\cdot,\cdot)$ (wieder wie in 6), daß der Term mit $\exp(i\sqrt{\lambda-q_1}x)$ eine von $-\infty$ kommende Welle beschreibt, die in eine reflektierte Welle der Intensität $|\varrho_1(\lambda)|^2$ und eine transmittierte Welle der Intensität $|\tau_1(\lambda)|^2$ aufgespalten wird. Dabei ist letztere nur für $\lambda > q_2$ tatsächlich eine Welle, die nach $+\infty$ läuft; für $\lambda < q_2$ klingt die Wellenfunktion rechts von a exponentiell ab. Analog beschreibt der Term mit $\exp(-i\sqrt{\lambda-q_2}\,x)$ eine Welle, die von $+\infty$ kommt und in eine reflektierte Welle der Intensität $|\varrho_2(\lambda)|^2$ und eine transmittierte Welle der Intensität $|\tau_2(\lambda)|^2$ aufgespalten wird; wegen $q_2 \geq q_1$ trifft dies nun für **alle** $\lambda > q_2$ zu.

Dabei ist bemerkenswert, daß hier die transmittierte Welle eine andere Frequenz aufweist als die ankommende Welle. Man hat für $x \longrightarrow +\infty$ und $x \longrightarrow -\infty$ verschiedenes asymptotisches Verhalten. Deshalb ist es vernünftig, wenn man dieses System im Rahmen der Streutheorie beschreiben will, dies im Rahmen der Zwei–Kanal–Streuung, also mit zwei verschiedenen Hamiltonoperatoren zu tun, z. B. durch die selbstadjungierten Operatoren

$$\begin{array}{lcll} T_1 &=& -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + q_1 & \text{in } L_2(-\infty,0)\,, \\ T_2 &=& -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + q_2 & \text{in } L_2(0,\infty)\,, \end{array} \qquad \text{jeweils mit} \quad f(0)=0$$

(statt 0 könnte hier jeder beliebige endliche Randpunkt gewählt werden). Durch die angegebene Randbedingung erhält man selbstadjungierte Operatoren mit

$$D(T_1) \;=\; \Big\{f \in L_2(-\infty,0):\; f,f' \text{ abs. stetig},\; f(0)=0,\; f'' \in L_2(-\infty,0)\Big\}\,,$$

$$D(T_2) \;=\; \Big\{f \in L_2(0,\infty):\; f,f' \text{ abs. stetig},\; f(0)=0,\; f'' \in L_2(0,\infty)\Big\}\,.$$

Die gewählte Randbedingung hat natürlich Einfluß auf die im folgenden berechneten „Streugrößen“: Die Transmissions– und Reflexionskoeffizienten werden verschiedene Phasen haben, da die verwendeten verallgemeinerten Eigenfunktionen andere Phasen haben. An den Beträgen dieser Koeffizienten kann sich nichts ändern. — Die Wahl des Randpunktes 0 ist ebenfalls willkürlich; man könnte o. w. T_1 in $L_2(-\infty, c_1)$ und T_2 in $L_2(c_2, \infty)$ betrachten.

Für diese Operatoren findet man auf entsprechende Weise (oder unter Verwendung der allgemeinen Spektraltheorie für Sturm–Liouville–Operatoren) die Spektraldarstellungen

$$\begin{aligned}
&\mathcal{F}_1 : \; L_2(-\infty, 0) \longrightarrow L_2\Big(q_1, \infty; \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_1}}\Big)\,, \\
&(\mathcal{F}_1 f)\,(\lambda) \;=\; \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}} \int\limits_{-N}^{0} \sin\Big(\sqrt{\lambda - q_1}\,x\Big)\, f(x)\,\mathrm{d}x\,, \\
&(\mathcal{F}_1^{-1} g)\,(x) \;=\; \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}} \int\limits_{q_1}^{N} \sin\Big(\sqrt{\lambda - q_1}\,x\Big)\, g(\lambda)\,\frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_1}}\,, \\[1em]
&\mathcal{F}_2 : \; L_2(0, \infty) \longrightarrow L_2\Big(q_2, \infty; \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_2}}\Big)\,, \\
&(\mathcal{F}_2 f)\,(\lambda) \;=\; \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}} \int\limits_{0}^{N} \sin\Big(\sqrt{\lambda - q_2}\,x\Big)\, f(x)\,\mathrm{d}x\,, \\
&(\mathcal{F}_2^{-1} g)\,(x) \;=\; \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}} \int\limits_{q_2}^{N} \sin\Big(\sqrt{\lambda - q_2}\,x\Big)\, g(\lambda)\,\frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_2}}\,.
\end{aligned}$$

Zerlegt man hier

$$\sin\Big(\sqrt{\lambda - q_j}\,x\Big) \;=\; \frac{1}{2i}\Big(\exp\Big(i\sqrt{\lambda - q_j}\,x\Big) - \exp\Big(-\,i\sqrt{\lambda - q_j}\,x\Big)\Big)\,,$$

so erkennt man, wieder mit den Überlegungen aus Abschnitt 6, daß die Welle

$$\mathcal{F}_j^{-1}(e^{-it\,\mathrm{id}} g)(x) = \int \sin\Big(\sqrt{\lambda - q_j}\,x\Big) e^{-it\lambda}\, g(\lambda)\,\frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_j}}$$

$$\begin{aligned}
&\text{für} \quad j = 1: \quad \text{von} \quad -\infty \quad \text{kommt und nach} \quad -\infty \quad \text{wegläuft}\,, \\
&\text{für} \quad j = 2: \quad \text{von} \quad +\infty \quad \text{kommt und nach} \quad +\infty \quad \text{wegläuft}\,.
\end{aligned}$$

Dabei findet die Reflexion bei 0 in der Weise statt, daß sich die auslaufende Welle bis auf das Vorzeichen von x genau so verhält, wie sich eine frei durchlaufende Welle verhalten würde (Spiegelung an der y–Achse). Das liegt an der Wahl der Randbedingung für T_j; wählt man statt der Dirichlet–Randbedingung andere Randbedingungen, so erhält man ein anderes „Reflexionsverhalten“ (Phasenverschiebung). (Für den Beweis dieses Verhaltens der Welle beachtet man, daß der Term

$\exp\{-i\sqrt{\lambda - q_j}\,x\}$ auf der einen Halbachse aus dem Term $\exp\{i\sqrt{\lambda - q_j}\,x\}$ auf der anderen Halbachse durch Spiegelung an der y–Achse hervorgeht.)

Für die Identifizierungsoperatoren U_1, U_2 ist es naheliegend, die Einbettungen $U_1 : L_2(-\infty, 0) \longrightarrow L_2(\mathbb{R})$, $U_2 : L_2(0, \infty) \longrightarrow L_2(\mathbb{R})$ zu verwenden, die offensichtlich isometrisch sind. Außerdem ist hier $R(U_1) \perp R(U_2)$ und $R(U_1) \oplus R(U_2) = H$.

Zunächst ist es leicht zu sehen, daß mit diesen Kanal–Operatoren T_1, T_2 und Identifizierungsoperatoren U_1, U_2 die Kanal–Wellenoperatoren existieren, die Kanäle orthogonal sind und die Wellenoperatoren $W_{1,\pm}$ und $W_{2,\pm}$ vollständig sind (so daß also auch der Streuoperator existiert und unitär ist): Auf Grund der Wahl von U_1 und U_2 können wir $T_0 := T_1 \oplus T_2$ (genauer: $= U_1 T_1 U_1^* + U_2 T_2 U_2^*$) als selbstadjungierten Operator in $L_2(\mathbb{R})$ auffassen; $\mathcal{F}_0 := \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$ ist eine Spektraldarstellung von T_0. Wählen wir nun noch den („intermediate“) Operator $\tilde{T}$ in $L_2(\mathbb{R})$ mit

$$D(\tilde{T}) = D(T) \qquad \tilde{T}f = -f'' + \tilde{q}f\,, \quad \tilde{q}(x) = \begin{cases} q_1 & \text{für } x < 0 \\ q_2 & \text{für } x \geq 0\,, \end{cases}$$

so gilt (im 1. Fall vergleiche man die im Beweis von Satz 5.13 [Satz von Kuroda] benutzte Technik, im zweiten Fall folgt dies daraus, daß $\tilde{T}$ und T_0 selbstadjungierte Fortsetzungen des gleichen symmetrischen Operators T_{00} mit $D(T_{00}) = \{f \in D(T) : f(0) = f'(0) = 0\}$ sind, der offenbar Defekt $(2,2)$ hat)

$$(T - i)^{-1} - (\tilde{T} - i)^{-1} \quad \in B_1(L_2(\mathbb{R}))\,,$$

$$(\tilde{T} - i)^{-1} - (T_0 - i)^{-1} \text{ ist höchstens } 2\text{–dimensional}.$$

Also ist

$$(T - i)^{-1} - (T_0 - i)^{-1} \quad \in B_1(L_2(\mathbb{R}))\,,$$

und somit existieren nach Satz 5.12 (Kuroda–Birman) die Wellenoperatoren $W_\pm(T, T_0)$ und sind vollständig.

Hiermit sind offensichtlich die ***Existenz, die Isometrie, die Orthogonalität und die Vollständigkeit der Kanalwellenoperatoren*** $W_{j,\pm}$ bewiesen (vgl. Schluß von Abschnitt 8.1).

Wir wollen nun noch, ähnlich wie in 6, die Koeffizienten $\varrho_j(\cdot)$ und $\tau_j(\cdot)$ interpretieren.

Es gilt für alle $t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}W_\pm(T,\,U_0,\,T_0)\mathcal{F}_0^{-1}e^{-it\,\mathrm{id}} &= \mathcal{F}W_\pm(T,\,U_0,\,T_0)e^{-itT_0}\mathcal{F}_0^{-1} \\ = \mathcal{F}e^{-itT}W_\pm(T,\,U_0,\,T_0)\mathcal{F}_0^{-1} &= e^{-it\,\mathrm{id}}\mathcal{F}W_\pm(T,\,U_0,\,T_0)\mathcal{F}_0^{-1}\,, \end{aligned}$$

d. h. $\mathcal{F}W_\pm(T,\,U_0,\,T_0)\mathcal{F}_0^{-1}$ ist mit $e^{-it\,\mathrm{id}}$ für alle t vertauschbar, also auch mit M_{id}, und somit ist nach Satz 3.13

$$\mathcal{F}\,W_\pm(T,\,U_0,\,T_0)\mathcal{F}_0^{-1} \quad = \quad \text{Multiplikationsoperator mit } 2\times 2\text{–matrixwertiger Funktion } w^\pm(\lambda)\,;$$

genauer: in $(q_1,\,q_2)$ ist $w^\pm(\lambda)$ eine 1×1–matrixwertige Funktion, d. h. $w^\pm(\lambda) = \left(\begin{smallmatrix} * & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}\right)$.

Mit der gleichen Methode wie in 6 findet man

$$w^-(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad \lambda \in (q_1,\,q_2)\,, \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \text{für} \quad \lambda \in (q_1,\infty) \end{cases}$$

und

$$w^+(\lambda)^{-1} = \begin{cases} \varrho_1(\lambda) & \text{für} \quad \lambda \in (q_1,q_2)\,, \\ \begin{pmatrix} \varrho_1(\lambda) & \tau_2(\lambda) \\ \tau_1(\lambda) & \varrho_2(\lambda) \end{pmatrix} & \text{für} \quad \lambda \in (q_2,\infty)\,. \end{cases}$$

Wir erinnern ganz kurz daran, wie man das beweist:

Für jedes $f \in L_2(-\infty,0)\oplus L_2(0,\infty)$ gilt mit $U_0 = U_1 \oplus U_2$ und $\mathcal{F}_0 = \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2$

$$\mathcal{F}W_\pm(T,U_0,T_0)f \;=\; \Big(\mathcal{F}W_\pm(T,U_0,T_0)\mathcal{F}_0^{-1}\Big)\mathcal{F}_0 f \;=\; w^\pm(\cdot)\begin{pmatrix}\mathcal{F}_1 f_1 \\ \mathcal{F}_2 f_2\end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{t\to\pm\infty}\Big\|W_\pm f - e^{itT}U_0 e^{-itT_0}f\Big\| \\ &= \lim_{t\to\pm\infty}\Big\|\mathcal{F}^{-1}e^{-it\,\mathrm{id}}\mathcal{F}\Big(W_\pm f - e^{itT}U_0e^{-itT_0}f\Big)\Big\| \\ &= \lim_{t\to\pm\infty}\Big\|\mathcal{F}^{-1}e^{-it\,\mathrm{id}}\mathcal{F}W_\pm f - U_0\mathcal{F}_0^{-1}e^{-it\,\mathrm{id}}\mathcal{F}_0 f\Big\|\,. \end{aligned}$$

Diese letzte Beziehung wird explizit als Integral mit allen „Fouriertransformationen“ ausgeschrieben. In den Bereichen $x < -a$ und $x > a$ sind dabei alle Terme explizit bekannt.

Schaut man sich z. B. das Integral über $(-\infty,-a)$ an, so können dort die nach rechts laufenden Wellen für den Limes $t \longrightarrow +\infty$ gestrichen werden (die nach links laufenden Wellen für den Limes

$t \longrightarrow -\infty$). Die Tatsache, daß die jeweils verbleibenden Terme gegen 0 gehen für $t \longrightarrow +\infty$ bzw. $t \longrightarrow -\infty$, liefert die gewünschten Beziehungen. (Für Details vgl. man 6.1.)

Ist S der Streuoperator, so ist also $\mathcal{F}_0 S \mathcal{F}^{-1}$ der durch die Matrix–Funktion

$$\hat{S}(\lambda) \;=\; w^+(\lambda)^{-1} w^-(\lambda) \;=\; w^+(\lambda)^*$$

erzeugte Multiplikationsoperator in

$$L_2\Big(q_1, \infty;\, \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_1}}\Big) \oplus L_2\Big(q_2, \infty;\, \frac{\mathrm{d}\lambda}{4\pi\sqrt{\lambda - q_2}}\Big)\,.$$

Dieser Operator ist unitär. Deshalb ist notwendigerweise

$$|\varrho_1(\lambda)| = 1 \qquad \text{für} \quad \lambda \in (q_1,\, q_2)\,,$$

und für $\lambda \in (q_2,\, \infty)$ ist

$$\begin{pmatrix} \Big(4\pi\sqrt{\lambda - q_1}\Big)^{-1/2} & 0 \\ 0 & \Big(4\pi\sqrt{\lambda - q_2}\Big)^{-1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varrho_1(\lambda) & \tau_2(\lambda) \\ \tau_1(\lambda) & \varrho_2(\lambda) \end{pmatrix} \times$$
$$\times \begin{pmatrix} \Big(4\pi\sqrt{\lambda - q_1}\Big)^{-1/2} & 0 \\ 0 & \Big(4\pi\sqrt{\lambda - q_2}\Big)^{-1/2} \end{pmatrix}^{-1}$$

unitär, d. h. es gilt

$$\begin{aligned} |\varrho_1(\lambda)|^2 (\lambda - q_1)^{-1/2} + |\tau_1(\lambda)|^2 (\lambda - q_2)^{-1/2} &= (\lambda - q_1)^{-1/2}\,, \\ |\tau_2(\lambda)|^2 (\lambda - q_1)^{-1/2} + |\varrho_2(\lambda)|^2 (\lambda - q_2)^{-1/2} &= (\lambda - q_2)^{-1/2}\,, \\ \overline{\varrho_1(\lambda)}\tau_2(\lambda)(\lambda - q_2) + \overline{\tau_1(\lambda)}\varrho_2(\lambda)(\lambda - q_1) &= 0\,; \end{aligned}$$

die ersten beiden Gleichungen beschreiben in diesem Fall gerade die Energieerhaltung der Welle.

8.3 Noch etwas zur Streutheorie mit zwei Hilberträumen

Seien H_1 und H_2 Hilberträume, T_1 und T_2 selbstadjungierte Operatoren in H_1 bzw. H_2, J ein beschränkter Operator von H_1 in H_2. Man definiert dann, falls die Grenzwerte existieren,

$$W_\pm(T_2,\, J,\, T_1) \;:=\; \operatorname*{s-lim}_{t \to \pm\infty} e^{itT_2} J\, e^{-itT_1} P_{1,ac}\,.$$

Man erkennt, völlig analog wie bei gewöhnlichen Wellenoperatoren, daß die **„*intertwining Eigenschaft*“** gilt,

$$T_2 W_\pm(T_2,\, J,\, T_1) \;=\; W_\pm(T_2,\, J,\, T_1) T_1 P_{1,ac}\,.$$

Ist J isometrisch, oder zumindest auf $H_{ac}(T_1)$ T_1–asymptotisch isometrisch, so ist $W_\pm(T_2,\, J,\, T_1)$ isometrisch und somit unitär als Abbildung von $H_{ac}(T_1)$ auf $R(W_\pm(T_2,\, J,\, T_1))$, d. h.

$$T_1|_{H_{ac}(T_1)} \quad \text{und} \quad T_2|_{R(W_\pm(T_2,J,T_1))} \quad \text{sind unitär äquivalent.}$$

Letztere Aussage gilt aber viel allgemeiner:

Satz 8.1 *Seien T_1 und T_2 selbstadjungiert in H_1 bzw. H_2, J ein beschränkter Operator von H_1 in H_2. Existiert $W_\pm(T_2,\, J,\, T_1)$, so sind*

$$T_1\Big|_{N(W_\pm(T_2,J,T_1))^\perp} \qquad \textit{und} \qquad T_2\Big|_{\overline{R(W_\pm(T_2,J,T_1))}} \quad \textit{unitär äquivalent.}$$

Beweis. Wir benutzen die polare Zerlegung von $W_\pm = W_\pm(T_2, J, T_1)$, (vgl. Mathematische Methoden der Quantenmechanik II, Satz 11.19, S. 20)

$$W_\pm \;=\; V_\pm |W_\pm|$$

mit $|W_\pm| \;=\; (W_\pm^* W_\pm)^{1/2}$ und einer partiell isometrischen Abbildung $V_\pm$ mit Anfangsmenge $\overline{R(|W_\pm|)} = N(|W_\pm|)^\perp = N(W_\pm)^\perp$ und Endmenge $\overline{R(W_\pm)}$. Aus der intertwining Eigenschaft folgt für jedes $s \in \mathbb{R}$

$$W_\pm^* e^{-isT_2} = (e^{isT_2} W_\pm)^* = (W_\pm e^{isT_1})^* = e^{-isT_1} W_\pm^*\,,$$

$$W_\pm^* W_\pm e^{-isT_1} = W_\pm^* e^{-isT_2} W_\pm = e^{-isT_1} W_\pm^* W_\pm\,.$$

Mit $W_\pm^* W_\pm$ ist dann aber auch jede Funktion von $W_\pm^* W_\pm$, also z. B. die Quadratwurzel $|W_\pm|$, mit e^{-isT_1} vertauschbar. Damit folgt

$$\begin{aligned}(e^{-isT_2} V_\pm)|W_\pm| \;&=\; e^{-isT_2}(V_\pm|W_\pm|) = e^{-isT_2} W_\pm \\ &=\; W_\pm e^{-isT_1} = V_\pm |W_\pm| e^{-isT_1} \\ &=\; (V_\pm e^{-isT_1})|W_\pm|\,,\end{aligned}$$

d. h. auf $\overline{R(|W_\pm|)} = N(W_\pm)^\perp$ gilt

$$e^{-isT_2} V_\pm = V_\pm e^{-isT_1} .$$

Wegen $R(V_\pm) = \overline{R(W_\pm)}$ ist also

$$e^{-isT_2} P_{R(W_\pm)} = e^{-isT_2} V_\pm V_\pm^* = V_\pm e^{-isT_1} V_\pm^* ;$$

das ist die Behauptung, wobei die unitäre Äquivalenz durch $V_\pm$ vermittelt wird. □

Offenbar wurde tatsächlich sogar bewiesen: Sind T_1, T_2 selbstadjungiert und A beschränkt mit $e^{isT_2} A = A e^{isT_1}$ für alle $s \in \mathbb{R}$, so sind

$$T_1|_{N(A)^\perp} \quad \text{und} \quad T_2|_{\overline{R(A)}} \qquad \text{unitär äquivalent.}$$

Dabei wird die unitäre Äquivalenz vermittelt durch den partiell isometrischen Operator V in der polaren Zerlegung $A = V|A|$.

9 N–Teilchen–Streuung; Existenz der Wellenoperatoren

Der Schrödingeroperator eines N–Teilchen–Systems ohne äußeres Feld im $\mathbb{R}^m$ (wobei natürlich insbesondere $m = 3$ interessiert) hat, abgesehen von aus mathematischer Sicht uninteressanten Konstanten, die Gestalt

$$T = -\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j}\,\Delta_j + \sum_{i<j} V_{ij}(x_i - x_j)$$

mit

$$x = (x_1, \ldots, x_N) \in (\mathbb{R}^m)^N = \mathbb{R}^{Nm}, \qquad x_j \in \mathbb{R}^m .$$

Dieser Operator operiert in $L_2(\mathbb{R}^{Nm})$.

Ist zusätzlich ein äußeres Feld vorhanden, so kommt noch eine Summe $\sum_{j=1}^{N} V_j(x_j)$ dazu (wobei die V_j durchaus auch Differentialoperatoren sein könnten, z. B. wenn ein äußeres Magnetfeld vorhanden ist).

Wir nehmen zunächst an, daß kein äußeres Feld da ist. Dann allerdings interessiert man sich nicht für den vollen Operator T, da er auch die freie Bewegung des Schwerpunkts des Sytems enthält. Statt dessen betrachtet man den „internen Operator“, der das interne Verhalten des Systems beschreibt. Dazu muß man geeignete Koordinatensysteme einführen.

9.1 Jacobi–Koordinaten und Cluster–Jacobi–Koordinaten.

Etwas ausführlicher dargestellt wurden die folgenden Überlegungen in 14 des Skripts „Mathematische Methoden der Quantenmechanik II“.

Die Definition der sogenannten „Jacobi–Koordinaten“ versteht man am leichtesten, wenn man sie sukzessive einführt. Denken wir uns also zunächst ein System, das nur aus zwei Teilchen der Massen m_1 und m_2 besteht, die mit einem Potential $V(x_1 - x_2) = V_{12}(x_1 - x_2)$ wechselwirken. Der entsprechende Schrödingeroperator ist also

$$T_2 = -\frac{1}{2m_1}\,\Delta_1 - \frac{1}{2m_2}\,\Delta_2 + V(x_1 - x_2) \qquad \text{in} \quad L_2(\mathbb{R}^{2m}).$$

Dabei stehen x_1 und x_2 für die $\mathbb{R}^m$–Koordinaten des ersten bzw. zweiten Teilchens, Δ_1 und Δ_2 für die Laplace–Differentialausdrücke bezüglich dieser Variablen. Definieren wir nun die Hilfsgrößen

$$\begin{aligned} &\text{Gesamtmasse} & M_2 &:= m_1 + m_2\,, \\ &\text{reduzierte Masse} & \mu_1 &:= \frac{m_1 m_2}{M_2} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\,, \end{aligned}$$

und die neuen Koordinaten

$$\begin{aligned} &\text{relative Koordinate} && y_1 &:=& \; x_1 - x_2\,, \\ &\text{Schwerpunktskoordinate} && Y_2 &:=& \; \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{M_2} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}\,. \end{aligned}$$

Wir betrachten also die Koordinatentransformation

$$x \mapsto y = \sigma x = \sigma_2(x) \qquad \text{mit} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix},$$

also

$$\sigma = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \dfrac{m_1}{M_2} & \dfrac{m_2}{M_2} \end{pmatrix}.$$

Durch Subtraktion des $\dfrac{m_1}{M_2}$–fachen der ersten Zeile von der zweiten Zeile und unter Beachtung der Tatsache, daß die Einträge dieser Matrix entsprechende Vielfache der $m \times m$–Einheitsmatrix sind, erhält man hieraus

$$|\sigma| = \det \sigma = \det \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \dfrac{m_1}{M_2} - \dfrac{m_1}{M_2} & \dfrac{m_2}{M_2} + \dfrac{m_1}{M_2} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1\,.$$

Also ist die Transformation

$$U_2 : L_2(\mathbb{R}^{2m}) \longrightarrow L_2(\mathbb{R}^{2m})\,, \quad (U_2 f)(y) = f(\sigma^{-1} y)$$

unitär, und es gilt

$$(U_2^* g)(x) \;=\; (U_2^{-1} g)(x) \;=\; g(\sigma x)\,.$$

Satz 9.1 (2 Teilchen) *Mit obigen Bezeichnungen gilt*

$$\begin{aligned} U_2 T_2 U_2^* \quad &= \quad -\frac{1}{2M_2}\,\Delta_2 + \Big\{ -\frac{1}{2\mu_1}\,\Delta_1 + V(y_1) \Big\} \\ &=: \quad -\frac{1}{2M_2}\,\Delta_2 + T_{2,int}\,, \end{aligned}$$

d. h. $U_2 T_2 U_2^*$ ist Summe zweier Operatoren, wovon der eine nur auf Y_2 (die Schwerpunktskoordinate) und der andere nur auf y_1 (die relative Koordinate) wirkt. Der in geschweiften Klammern stehende Operator $T_{2,int}$ wird als ***interner Operator*** *bezeichnet; er hat die Gestalt eines Ein–Teilchen–Operators im externen Feld. (Man erkennt daran insbesondere, daß das interne Zwei–Teilchen–Problem genau dem Problem eines Teilchens im äußeren Feld entspricht, die Streuung zweier Teilchen also genau der Streuung eines Teilchens an einem äußeren Feld.)*

Der ***Beweis*** ist eine einfache, wenn auch etwas mühsame Rechnung mit Variablensubstitutionen (vgl. z. B. das Skript „Mathematische Methoden der Quantenmechanik II“ , Satz 14.2).

Denken wir uns nun ein drittes Teilchen hinzugenommen. Man behandelt zunächst die ersten beiden Teilchen (wobei unter Umständen noch zu klären ist, welches die ersten beiden Teilchen sein sollen) wie oben. Danach behandelt man das dritte Teilchen zusammen mit der Gesamtmasse der ersten beiden Teilchen aufgefaßt als ein Teilchen, das sich im Schwerpunkt dieser beiden Teilchen befindet, ebenfalls nach diesem Schema. Man erhält damit die „Massen“

$$\begin{aligned} M_2 &= m_1 + m_2\,, \\ M_3 &= M_2 + m_3 = m_1 + m_2 + m_3\,, \\ \mu_1 &= \frac{m_1 m_2}{M_2}\,, \\ \mu_3 &= \frac{M_2 m_3}{M_3}\,, \end{aligned}$$

und die Koordinaten

$$\begin{aligned} y_1 &= x_1 - x_2\,, \\ y_2 &= Y_2 - x_3 = \left(\frac{m_1}{M_2}x_1 + \frac{m_2}{M_2}x_2\right) - x_3 = \frac{m_1}{M_2}\,(x_1 - x_3) + \frac{m_2}{M_2}\,(x_2 - x_3) \\ &= \frac{1}{M_2}\sum_{j=1}^{2} m_j(x_j - x_3)\,, \\ Y_3 &= \frac{M_2 Y_2 + m_3 x_3}{M_3} = \frac{1}{M_3}\sum_{j=1}^{3} m_j x_j \quad \text{(Schwerpunktskoordinate).} \end{aligned}$$

Da man die Matrix σ_3 mit $y = (y_1,\, y_2,\, Y_3) = \sigma_3 x = \sigma_3(x_1,\, x_2,\, x_3)$ durch Hintereinanderanwendung von zwei Matrizen des Typs σ_2 erhält (zuerst auf $(x_1,\, x_2)$, womit man $(y_1,\, Y_2,\, x_3)$ erhält, dann auf $(Y_2,\, x_3)$), ist σ_3 ebenfalls nicht singulär mit Determinante 1. Offensichtlich erhält man

Satz 9.1 (3 Teilchen) *Für*

$$U_3 : L_2(\mathbb{R}^{3m}) \longrightarrow L_2(\mathbb{R}^{3m})\,, \quad (U_3 f)(y) = f(\sigma_3^{-1} y)$$

und den 3–Teilchen–Schrödingeroperator

$$T_3 = -\sum_{j=1}^{3} \frac{1}{2m_j}\,\Delta_j + V \qquad \textit{mit} \qquad V(x) = \sum_{\substack{j,k=1 \\ j<k}}^{3} V_{jk}(x_j - x_k)$$

gilt

$$\begin{aligned} U_3 T_3 U_3^* &= -\frac{1}{2M_3}\,\Delta_3 + \Big\{ -\frac{1}{2\mu_1}\,\Delta_1 - \frac{1}{2\mu_2}\,\Delta_2 + V(\sigma_3^{-1} y) \Big\} \\ &= -\frac{1}{2M_3}\,\Delta_3 + T_{3,int}\,. \end{aligned}$$

Dabei ist V *translationsinvariant in Richtung der Schwerpunktskoordinate* Y_3 *(d. h. es ist von* Y_3 *unabhängig).*

Nur der ***Beweis*** der letzten Aussage bedarf der Erwähnung. Wie man aber aus den obigen Formeln ersieht, lassen sich die Vektoren $x_1 - x_2$, $x_1 - x_3$ und $x_2 - x_3$, die in $V(x)$ vorkommen, aus y_1 und y_2 allein ausrechnen.

Damit ist nun klar, wie das Verfahren iterativ auf den N–Teilchen–Fall ausgedehnt werden kann. Man definiert die Massen

$$\begin{aligned} M_n &= \sum_{j=1}^{n} m_j \qquad \text{für} \quad n = 1, 2, \ldots, N\,, \\ \mu_n &= \frac{M_n m_{n+1}}{M_{n+1}} \qquad \text{für} \quad n = 1, \ldots, N-1\,, \end{aligned}$$

und die Koordinaten

$$\begin{aligned} &\textbf{\textit{interne Koordinaten}} & y_n &= \frac{1}{M_n} \sum_{j=1}^{n} m_j (x_j - x_{n+1}) \qquad \text{für} \quad n = 1, \ldots, N-1\,, \\ &\textbf{\textit{Schwerpunktskoordinate}} & Y_N &= \frac{1}{M_N} \sum_{j=1}^{N} m_j x_j\,. \end{aligned}$$

Die Matrix σ_N mit

$$y = (y_1, \ldots, y_{N-1}, Y_N) = \sigma_N x = \sigma_N (x_1, \ldots, x_N)$$

ist wieder nicht–singulär mit Determinante 1, und man erhält den

Satz 9.1 (N Teilchen) *Für*

$$U_N : L_2(\mathbb{R}^{Nm}) \longrightarrow L_2(\mathbb{R}^{Nm})\,, \qquad (U_N f)(y) = f(\sigma_N^{-1} y)$$

und den N*–Teilchen–Schrödingeroperator*

$$T_N = -\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j}\,\Delta_j + V \qquad \textit{mit} \quad V(x) = \sum_{\substack{j,k=1 \\ j<k}}^{N} V_{jk}(x_j - x_k)$$

gilt

$$\begin{aligned} U_N T_N U_N^* &= -\frac{1}{2M_N}\,\Delta_N + \left\{ -\sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{2\mu_j}\,\Delta_j + V(\sigma_N^{-1} y) \right\} \\ &= -\frac{1}{2M_N}\,\Delta_N + T_{N,int}\,. \end{aligned}$$

Hier ist wieder V *von* Y_N *unabhängig; es gilt*

$$V = V(\sigma_N^{-1} y) \;=\; \sum_{\substack{j,k=1\\ j<k}}^{N} V_{jk}\Big(P_{jk}(y_1, \ldots, y_{N-1})\Big)\,,$$

wobei die $P_{jk} : \mathbb{R}^{(N-1)m} \longrightarrow \mathbb{R}^m$ *linear und surjektiv sind.*

Um den internen Operator eines N–Teilchen–Systems (bzw. einen dazu äquivalenten Operator) zu bestimmen, kann man natürlich auch anders vorgehen. Dazu denken wir uns eine Zerlegung $Z = \{Z_1, \ldots, Z_k\}$ des Systems in nicht–leere Teilsysteme, meist als ***Cluster*** bezeichnet. Jedes der Teilsysteme $Z_1, \ldots, Z_k$ denken wir uns nach obigem Verfahren behandelt (falls ein Teilsystem Z_ℓ nur aus einem Teilchen besteht, ist natürlich nichts zu tun; interne Koordinaten gibt es dann nicht; die Koordinate dieses Teilchens ist gleichzeitig die Schwerpunktskoordinate des Teilsystems, die Masse des Teilchens gleichzeitig die Gesamtmasse des Teilsystems). Man erhält also die neuen Koordinaten

$$\xi_1^\ell, \ldots, \xi_{N_\ell - 1}^\ell, Y_\ell \qquad (\ell = 1, \ldots, k)\,,$$

und Massen

$$\mu_{\ell,1}, \ldots, , \mu_{\ell,N_\ell - 1}, M_\ell\,,$$

wobei N_ℓ die Zahl der Teilchen im ℓ–ten Teilsystem ist und Y_ℓ die Schwerpunktskoordinate des ℓ–ten Teilsystems. Nun kann man die Schwerpunktskoordinaten $Y_1, \ldots, Y_k$ einschließlich der zugehörigen Gesamtmassen $M_1, \ldots, M_k$ der Teilsysteme entsprechend behandeln. Das liefert zusätzliche interne Koordinaten und die (Gesamt-)Schwerpunktskoordinate

$$\xi_1, \ldots, \xi_{k-1}, Y$$

sowie weitere reduzierte Massen und die Gesamtmasse

$$\mu_1, \ldots, \mu_{k-1}, M\,.$$

Der Schrödingeroperator geht bei der entsprechenden unitären Transformation über in

$$-\frac{1}{2M}\,\Delta_Y \;-\; \sum_{n=1}^{k-1}\frac{1}{2\mu_n}\,\Delta_{\xi_n} \;+\; \sum_{\ell=1}^{k} T_{Z,\ell} \;+\; \sum_{i\not\sim j} V_{ij}\,,$$

wobei $T_{Z,\ell} := T_{Z_\ell,int}$ der interne Schrödingeroperator des ℓ–ten Teilsystems ist (also insbesondere die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen dieses Teilsystems enthält) und $i \not\sim j$ bedeutet, daß die Teilchen i und j verschiedenen Teilsystemen angehören. Ist das Teilchen i im Teilsystem ℓ_i und das Teilchen j im Teilsystem ℓ_j, so ist V_{ij} der Operator der Multiplikation mit

$$V_{ij}\Big(P_{\ell_i,\ell_j}(\xi_1,\ldots,\xi_{k-1}) + P_i(\xi_1^{\ell_i},\ldots,\xi_{N_{\ell_i}-1}^{\ell_i}) - P_j(\xi_1^{\ell_j},\ldots,\xi_{N_{\ell_j}-1}^{\ell_j})\Big)\,;$$

dabei ist

$P_{\ell_i,\ell_j}(\xi_1,\ldots,\xi_{k-1})$	die Differenz der Schwerpunktskoordinaten des ℓ_i–ten und ℓ_j–ten Teilschwerpunkts,
$P_i(\xi_1^{\ell_i},\ldots,\xi_{N_{\ell_i}-1}^{\ell_i})$	die Koordinate des i–ten Teilchens relativ zum Schwerpunkt des ℓ_i–ten Teilsystems.

9.2 Existenz der Cluster–Wellenoperatoren

In diesem Abschnitt wird eine vorläufige Definition der "Kanäle" für die N–Teilchen–Streuung gegeben und die Existenz der entsprechenden "Kanal–Wellenoperatoren" bewiesen. Da die so definierten Kanäle nicht orthogonal sind (sie sind „zu groß“), wie sich im folgenden Abschnitt zeigen wird, muß diese Definition noch verbessert werden. Die Existenz der Wellenoperatoren überträgt sich aber sofort auf diese verbesserten Wellenoperatoren (zu „kleineren“ Kanälen).

Was sind denkbare Asymptotiken eines N–Teilchen–Systems? Wenn das System **nicht in einem gebundenen Zustand** (also orthogonal zur linearen Hülle der Eigenelemente) ist, **sollten** zumindest gewisse Teilchen ins Unendliche weglaufen, d. h. gewisse Teilchenabstände sollten groß werden. Denken wir uns das System in k Cluster $Z_1,\ldots,Z_k$ zerlegt. Ausgehend von der Vorstellung, daß wir uns für Zustände interessieren, in denen die Teilchen jedes Clusters „dicht“ zusammen bleiben und die Cluster sich weit voneinander entfernen, definieren wir den (vorläufigen Kanal–Schrödingeroperator =) ***Cluster–Schrödingeroperator*** T_Z dadurch, daß wir im internen Operator des Systems die Wechselwirkung zwischen Teilchen verschiedener Cluster weglassen. Für große Zeiten wird dann das System durch diesen Operator beschrieben. Als Kanal–Raum wählen wir hier (vorläufig) den dem System, ohne Schwerpunktsbewegung, zugrunde liegenden $L_2(\mathbb{R}^{(N-1)m})$.

Satz 9.2 (M. N. Hack, 1959) *Es gelte für die Wechselwirkungen*

$$V_{ij} \in L_2(\mathbb{R}^m) + L_r(\mathbb{R}^m) \qquad \textit{mit} \quad 2 < r < m\,,$$

und die V_{ij} *seien (z. B.) bezüglich* $-\Delta$ *relativ beschränkt mit relativer Schranke* 0. *Dann existieren* **alle** *Cluster–Wellenoperatoren.*

$$W_{Z,\pm} \;=\; W_\pm(T_{N,int},\, T_Z)\,.$$

(Der Beweis von M. N. Hack [Nuovo Cimento **13**, *1959] betraf nur den Fall* $V_{ij} \in L_2(\mathbb{R}^m)$ *für* $m = 3$ *.)*

Um uns mit der Beweistechnik vertraut zu machen, beweisen wir zuerst ein analoges Resultat für ein einfaches Streuproblem (Satz 9.4). Dazu benötigen wir noch folgende Hilfsmittel.

Satz 9.3 *Ist* $2 \le q \le \infty$ *und* $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, *so gilt für alle Multiindices* $\alpha \in \mathbb{N}^m$

$$\|D^\alpha e^{-it(-\Delta)}\varphi\|_q \;\le\; (4\pi|t|)^{-m\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{q}\right)}\,\|D^\alpha\varphi\|_p \quad \textit{für alle} \quad \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)\,.$$

Beweis. Wir wollen den Satz von Riesz–Thorin (Satz 9.12) benutzen. Die Gruppe $e^{-it(-\Delta)}$ ist unitär in $L_2(\mathbb{R}^m)$, also gilt

$$\|e^{-it(-\Delta)}\varphi\|_2 \;=\; \|\varphi\|_2 \qquad (p_0 = q_0 = 2,\, M_0 = 1)\,.$$

Aus der Integralstellung der Gruppe (vgl. Skript „Mathematische Methoden der Quantenmechanik“, Satz 9.17)

$$e^{-it(-\Delta)}\varphi(x) \;=\; \underset{N\to\infty}{\text{l.i.m.}}\; (4\pi it)^{-m/2} \int\limits_{|y|\le N} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4it}\right)\varphi(y)\,\mathrm{d}y$$

folgt

$$\|e^{-it(-\Delta)}\varphi\|_\infty \;\le\; (4\pi|t|)^{-m/2}\,\|\varphi\|_1 \qquad (\,p_1 = 1,\, q_1 = \infty,\, M_1 = (4\pi|t|)^{-m/2}\,)\,.$$

Damit folgt die Behauptung für $\alpha = (0,\ldots,0)$ mit Hilfe des Satzes von Riesz–Thorin :

$$\frac{1}{p} \;=\; \frac{1-\tau}{2} + \frac{\tau}{1} \;=\; \frac{1+\tau}{2}\,, \qquad \frac{1}{q} \;=\; \frac{1-\tau}{2} + \frac{\tau}{\infty} = \frac{1-\tau}{2}\,,$$

$$M \;=\; M_0^{1-\tau} M_1^{\tau} \;=\; \left(|4\pi t|^{-\frac{m}{2}}\right)^{\frac{2}{p}-1}\,.$$

Wegen

$$D^\alpha e^{-it(-\Delta)}\varphi \;=\; e^{-it(-\Delta)}D^\alpha\varphi$$

folgt damit auch die Behauptung für beliebiges α. □

Satz 9.4 *Sei $V \in L_2(\mathbb{R}^m)+L_r(\mathbb{R}^m)$ mit $2 \le r < m$, $T_1 = -\Delta$ in $L_2(\mathbb{R}^m)$, $T_2 = T_1+V$ (irgend–)eine selbstadjungierte Fortsetzung des durch $-\Delta+V$ auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ definierten Operators (dazu kann z. B. vorausgesetzt werden, daß V T_1–beschränkt ist mit relativer Schranke <1, $D(T_2) = D(T_1)$). Dann existieren die Wellenoperatoren $W_\pm(T_2, T_1)$.*

Bemerkung *Ist $V_s \in L_s(\mathbb{R}^m)$ für ein $s \in (2, r)$, so läßt es sich darstellen in der Form $V_s = V_2 + V_r$ mit $V_2 \in L_2(\mathbb{R}^m)$ und $V_r \in L_2(\mathbb{R}^m)$, d. h. es ist $V \in L_2(\mathbb{R}^m) + L_r(\mathbb{R}^m)$.*

Beweis. Sei $V = V_2 + V_r$ mit $V_2 \in L_2(\mathbb{R}^m)$ und $V_r \in L_r(\mathbb{R}^m)$,

$$\frac{1}{q} = \frac{1}{2} - \frac{1}{r}\,, \quad \text{also} \quad q = \Big(\frac{1}{2} - \frac{1}{r}\Big)^{-1} > \Big(\frac{1}{2} - \frac{1}{m}\Big)^{-1} = \frac{2m}{m-2}\,.$$

Dann folgt mit Hilfe der Hölder'schen Ungleichung und Satz 9.3 für alle $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$

$$\begin{aligned} \|Ve^{-itT_1}\varphi\|_2 &\le \|V_2\|_2\,\|e^{-itT_1}\varphi\|_\infty + \|V_r\|_r\,\|e^{-itT_1}\varphi\|_q \\ &\le \|V_2\|_2\,\|\varphi\|_1\,(4\pi|t|)^{-m/2} + \|V_r\|_r\,\|\varphi\|_p(4\pi|t|)^{\frac{m}{q}-\frac{m}{2}}\,. \end{aligned}$$

Wegen $\frac{m}{2} - \frac{m}{q} > \frac{m}{2} - \frac{m-2}{2} = 1$ ist also $\|Ve^{-itT_1}\varphi\|_2$ in $L_1(\mathbb{R})$ für alle $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$. Mit dem Cookschen Lemma folgt die Behauptung. (Dazu ist natürlich auch noch die Stetigkeit von $t \mapsto Ve^{-itT_1}\varphi$ für $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ zu beweisen, was unter den gegebenen Voraussetzungen nicht schwer ist.) □

Korollar 9.5 *Die entsprechende Aussage gilt, wenn V ein Differentialoperator (beliebiger Ordnung) ist, dessen Koeffizienten die obige Bedingung erfüllen.*

Der ***Beweis*** geht völlig analog, da nach Satz 9.3 die Abschätzungen auch für $D^\alpha e^{-itT_1}\varphi$ gelten.

Beweis von Satz 9.2. Sei also $Z = \{Z_1, Z_2, \dots, Z_k\}$ eine Zerlegung des Systems, T_Z der zugehörige Cluster–Schrödingeroperator

$\xi_1^\ell, \dots, \xi_{N_\ell-1}^\ell$	die internen Koordinaten des ℓ–ten Teilsystems,
$\xi_1, \dots, \xi_{k-1}$	die relativen Koordinaten der Clusterschwerpunkte
	im Gesamtschwerpunktsystem.

Wir betrachten die Funktionenmenge

$$D_Z \;=\; \Big\{\varphi(\xi_1,\dots,\xi_{k-1})\eta_1(\xi^{Z_1})\dots\eta_k(\xi^{Z_k}) \,:\, \varphi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{(k-1)m})\,,\\ \eta_\ell\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{(N_\ell-1)m})\,, \|\eta_\ell\|=1 \quad \text{für} \quad \ell=1,\dots,k\Big\}\,.$$

Offenbar ist D_Z dicht in $L_2(\mathbb{R}^{(N-1)m})$. Nach dem Cookschen Lemma genügt es also zu zeigen, daß

$$\Big\|(T_{N,int}-T_Z)e^{-itT_Z}\psi\Big\| \;\in\; L_1(\mathbb{R})$$

gilt für alle $\psi\in D_Z$. Also genügt es, für jedes Paar (i,j), wobei i und j zu verschiedenen Teilsystemen gehören, zu zeigen, daß

$$\Big\|V_{ij}e^{-itT_Z}\psi\Big\| \in L_1(\mathbb{R})$$

gilt. Dabei können wir ohne Einschränkung annehmen, daß das Teilchen i zum Teilsystem Z_1, das Teilchen j zum Teilsystem Z_2 gehört (dabei wird benutzt, daß die mit einer Umordnung der Teilsysteme $Z_1,\dots,Z_k$ verbundene affine Transformation der Koordinaten $\xi_1,\dots,\xi_{k-1}$ den Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{(k-1)m})$ selbstverständlich invariant läßt). Dann ist

$$\xi_1 \;=\; \text{Schwerpunktskoordinate von } Z_1 \;-\; \text{Schwerpunktskoordinate von } Z_2\,.$$

Sind

$$P_i(\xi_1^{Z_1},\dots,\xi_{N_1-1}^{Z_1}) \quad \text{und} \quad P_j(\xi_1^{Z_2},\dots,\xi_{N_2-1}^{Z_2})$$

die Koordinaten des i–ten bzw. j–ten Teilchen relativ zum Schwerpunkt von Z_1 bzw. Z_2, so ist also

$$\xi_1+P_i\Big(\xi_1^{Z_1},\dots,\xi_{N_1-1}^{Z_1}\Big) \;-\; P_j\Big(\xi_1^{Z_2},\dots,\xi_{N_2-1}^{Z_2}\Big)\\ =\text{Koordinate des } i\text{–ten Teilchens} \;-\; \text{Koordinate des } j\text{–ten Teilchens;}$$

dies ist also das Argument von V_{ij}.

Da die einzelnen Terme in

$$T_Z \;=\; -\sum_{n=1}^{k-1}\frac{1}{2\mu_n}\Delta_{\xi_n} \;+\; \sum_{\ell=1}^{k}T_{Z,\ell}$$

($T_{Z,\ell} =$ interner Operator des Teilsystems Z_ℓ) miteinander kommutieren, gilt

$$e^{-itT_z} = \left\{ \prod_{n=1}^{k-1} \exp(-it\frac{1}{2\mu_n}\Delta_{\xi_n}) \right\} \left\{ \prod_{\ell=1}^{k} \exp(-itT_{Z,\ell}) \right\} .$$

Da V_{ij} nur von den Koordinaten ξ_1, ξ^{Z_1} und ξ^{Z_2} abhängt, ist somit (mit $s := \frac{t}{2\mu_1}$ und $\eta_{\ell,t}(\xi^{Z_\ell}) := e^{-itT_{Z,\ell}}\eta_\ell(\xi^{Z_\ell})$)

$$\begin{aligned} \left\| V_{ij} e^{-itT_Z} \psi \right\|^2 &= \left\| V_{ij} \left\{ (e^{-is\Delta_{\xi_1}}\varphi)\eta_{1,t}\eta_{2,t} \right\} \right\|^2_{\xi,\xi^{Z_1},\xi^{Z_2}} \\ &= \int \left| \left(e^{-is\Delta_{\xi_1}}\varphi \right)(\xi) \right|^2 \times \\ &\quad \times \int\int \left| \eta_{1,t}(\xi^{Z_1})\eta_{2,t}(\xi^{Z_2}) V_{ij}\left(\xi_1 + P_i(\xi^{Z_1}) - P_j(\xi^{Z_2}) \right) \right|^2 \mathrm{d}\xi^{Z_1}\,\mathrm{d}\xi^{Z_2}\,\mathrm{d}\xi \\ &= \int \left| \left(e^{-is\Delta_{\xi_1}}\varphi \right)(\xi) \right|^2 \left| V^t_{i,j}(\xi_1) \right|^2 \mathrm{d}\xi \end{aligned}$$

mit

$$|V^t_{ij}(\xi_1)|^2 := \int\int \left| \eta_{1,t}(\xi^{Z_1})\eta_{2,t}(\xi^{Z_2}) V_{ij}\left(\xi_1 + P_i(\xi^{Z_1}) - P_j(\xi^{Z_2}) \right) \right|^2 \mathrm{d}\xi^{Z_1}\,\mathrm{d}\xi^{Z_2} .$$

Führt man hier in $(|V^t_{ij}(\xi_1)|^2)$ die Integration bezüglich aller Variablen bis auf die „neue“ Variable $\hat{\xi}_1 = P_i(\xi^{Z_1}) - P_j(\xi^{Z_2})$ aus (die restlichen Variablen $\hat{\xi}_n$ werden nicht explizit benötigt), so erkennt man, daß es die Faltung ist zwischen

$$|V^{(r)}_{ij}|^2 \in L_{r/2}(\mathbb{R}^m) \quad \text{bzw.} \quad |V^{(2)}_{ij}|^2 \in L_1(\mathbb{R}^m)$$

und

$$\int\int |\eta_{1,t}(\xi^{Z_1})|^2\, |\eta_{Z,t}(\xi^{Z_1})|^2\, \mathrm{d}\ldots (\text{ohne } P_i(\xi^{Z_1}) - P_j(\xi^{Z_2}))\ldots \;\in\; L_1(\mathbb{R}^m)$$

mit L_1–Norm 1. Im folgenden genügt es wieder, die Fälle $V_{ij} \in L_r$ bzw. $V_{ij} \in L_2$ getrennt zu betrachten.

Die Youngsche Ungleichung liefert für $V_{ij} \in L_r(\mathbb{R}^m)$

$$|V^t_{ij}(\xi_1)|^2 \in L_{r/2}(\mathbb{R}^m) \qquad \text{mit} \qquad \|\,|V^t_{ij}|^2\|_{r/2} \le \|\,|V_{ij}|^2\|_{r/2} = \|V_{ij}\|^2_r ,$$

also

$$V^t_{ij} \in L_r(\mathbb{R}^m) \qquad \text{mit} \qquad \|V^t_{ij}\|_r \le \|V_{ij}\|_r .$$

Völlig analog wie im Beweis von Satz 9.4 folgt daraus (mit $q > \dfrac{2m}{m-2}$)

$$\begin{aligned}\int |V_{ij}^t(\xi_1)|^2 \, |(e^{-is\Delta_\xi}\varphi)\,(\xi)|^2 \;\mathrm{d}\xi_1 \\ \leq \left\|V_{ij}^t\right\|_r^2 \left((4\pi|s|)^{-\frac{m}{2}+\frac{m}{q}}\right)^2 \int |\varphi(\xi_1,\ldots,\xi_{k-1})|^2 \;\mathrm{d}\xi_1\,.\end{aligned}$$

Integration über die weiteren Variablen liefert die Integrierbarkeit wie in Satz 9.4.

Die Untersuchung für $V_{ij} \in L_2(\mathbb{R}^m)$ ist wieder etwas einfacher, da hier das entsprechende V_{ij}^t in L_2 liegt mit $\|V_{ij}^t\|_2 \leq \|V_{ij}\|_2$; vgl. Beweis von Satz 9.4 (der obige Beweis gilt aber auch für $r = 2$).
□

9.3 Die „richtige“ Wahl der Kanäle

Wir stellen zunächst fest, daß es im Sinne unserer allgemeinen Überlegungen nicht erlaubt ist, die obigen Cluster–Schrödingeroperatoren als Kanal–Schrödingeroperatoren zu wählen, da die so definierten Kanäle nicht orthogonal wären.

Um dies zu zeigen, betrachten wir z. B. eine Zerlegung $Z = \{Z_1,\ldots,Z_k\}$ mit $|Z_1| = 2$ (d. h. das Teilsystem Z_1 besteht aus 2 Teilchen) und die feinere Zerlegung $Z' = \{Z_1^{(1)}, Z_1^{(2)}, Z_2, \ldots, Z_k\}$, wobei die Teilmengen $Z_1^{(j)}$ jeweils aus einem der beiden Teilchen aus Z_1 bestehen. Die Cluster–Schrödingeroperatoren T_Z und $T_{Z'}$ haben dann die Gestalt

$$\begin{aligned} T_Z &= (-c\Delta + v) + T_0\,, \\ T_{Z'} &= (-c\Delta) + T_0\,, \end{aligned}$$

wobei der in Klammern stehende Operator in beiden Fällen nur auf die interne Koordinate von Z_1 wirkt (v ist die Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen von Z_1) und T_0 auf die restlichen internen Koordinaten des gesamten Systems. Wenn wir davon ausgehen, daß v so beschaffen ist, daß die Wellenoperatoren $W_\pm(-c\Delta + v, -c\Delta)$ existieren (vgl. z. B. 7), so existieren auch die Wellenoperatoren $W_\pm(T_Z, T_Z')$, d. h. zu jedem $f \in L_2(\mathbb{R}^{(N-1)m}) = H_{ac}(T_{Z'})$ existiert ein $f_\pm \in L_2(\mathbb{R}^{(N-1)m}) = H_{ac}(T_Z)$ mit

$$e^{-itT_Z} f_\pm - e^{-itT_{Z'}} f \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad t \longrightarrow \pm\infty\,.$$

Wenn auch die Wellenoperatoren $W_\pm(T, T_Z)$ und $W_\pm(T\,, T_{Z'})$ existieren (was z. B. unter den Voraussetzungen von 9.2 gilt), so folgt hieraus für alle $f \in L_2(\mathbb{R}^{(N-1)m})$ mit dem entsprechenden $f_\pm$

$$\begin{aligned} W_\pm(T, T_{Z'})f &= \lim_{t\to\pm\infty} e^{itT} e^{-itT_{Z'}} f = \lim_{t\to\pm\infty} e^{itT} e^{-itT_Z} f_\pm \\ &= W_\pm(T\,, T_Z) f_\pm\,, \end{aligned}$$

d. h. es gilt

$$R\Big(W_\pm(T\,,T_{Z'})\Big) \subset R\Big(W_\pm(T,T_Z)\Big)\,.$$

Insbesondere sind also i. allg. die Wertebereiche der Clusterwellenoperatoren zu verschiedenen Zerlegungen nicht orthogonal. Wir werden im folgenden die Orthogonalität der Kanäle erzwingen, indem wir die Kanalräume wesentlich kleiner wählen.

Im folgenden sei $Z = \{Z_1, \ldots, Z_k\}$ eine Cluster–Zerlegung des Systems. Für $\ell = 1, \ldots, k$ sei Φ^Z_ℓ eine Orthonormalbasis von $H_p(T_{Z,\ell})$, d. h. Φ^Z_ℓ spannt den Raum der Eigenelemente von $T_{Z,\ell}$ $(= T_{Z_\ell,int})$ auf; enthält Z_ℓ nur ein Teilchen, so gibt es keinen internen Operator von Z_ℓ, d. h. das entsprechende Φ^Z_ℓ tritt im folgenden nicht auf. Wenn zu ***einem*** ℓ der Operator T_{Z_ℓ} keinen Eigenwert hat, gibt es zu dieser Zerlegung ***keinen*** Kanal. ***Jeder Clusterzerlegung $Z = \{Z_1, \ldots, Z_k\}$ und jeder Wahl von $\{\varphi_1, \ldots, \varphi_k\}$ mit $\varphi_\ell \in \Phi^Z_\ell$ ordnen wir im folgenden einen Kanal zu***. Zu jedem ℓ ist offenbar der zugehörige Eigenwert λ_ℓ von T_{Z_ℓ} mit $(T_{Z,\ell} - \lambda_\ell)\varphi_\ell = 0$ durch das φ_ℓ eindeutig bestimmt. Ist $|Z_\ell| = 1$, so daß kein φ_ℓ auftritt, so ist im folgenden $\lambda_\ell = 0$ zu setzen.

Kanäle werden im folgenden mit den Buchstaben $\alpha, \beta, \ldots$ bezeichnet; es wird also identifiziert

$$\begin{aligned} \alpha &= \Big\{Z_1, \ldots, Z_k;\, \varphi_1, \ldots, \varphi_k\Big\} \\ &= \Big\{Z_1, \ldots, Z_k;\, \varphi_1, \ldots, \varphi_k;\, \lambda_1, \ldots, \lambda_k\Big\}\,. \end{aligned}$$

Zwei Kanäle α, α' sind genau dann verschieden, wenn die zugrunde liegenden Zerlegungen Z und Z' verschieden sind, oder wenn (bei gleicher Zerlegung) mindestens für ein ℓ gilt $\varphi_\ell \neq \varphi'_\ell$ (also $\varphi_\ell \perp \varphi'_\ell$); d. h. sie sind gleich, wenn die zugrunde liegenden Zerlegungen Z und Z' gleich sind und $\varphi_\ell = \varphi'_\ell$ für alle ℓ gilt.

Als ***Kanalraum*** wählen wir

$$\begin{aligned} H_\alpha &= \Big\{f(\xi_1, \ldots, \xi_{k-1}) \prod_{\ell=1}^{k} \varphi_\ell(\xi^\ell) \,:\, f \in L_2(\mathbb{R}^{(k-1)m}\Big\} \\ &\cong L_2(\mathbb{R}^{(k-1)m})\,. \end{aligned}$$

Der zugehörige ***Kanalwellenoperator*** T_α ist im Fall der ersten Darstellung von H_α

$$T_\alpha = T_Z\,|_{H_\alpha} \qquad (\,T_Z \text{ der oben definierte Cluster–Schrödingeroperator}),$$

wobei Z die zu α gehörige Zerlegung ist; in der zweiten Darstellung von H_α ist

$$T_\alpha = -\sum_{n=1}^{k-1} \frac{1}{2M_n}\,\Delta_{\xi_n} + \sum_{\ell=1}^{k} \lambda_\ell$$

(man beachte: $\lambda_\ell = 0$ falls $|Z_\ell| = 1$).

Der Identifizierungsoperator U_α ist im ersten Fall

$$U_\alpha = \text{ die natürliche Einbettung von } H_\alpha \text{ in } L_2(\mathbb{R}^{(N-1)m}) \,,$$

im zweiten Fall

$$U_\alpha : f \mapsto f(\xi_1, \ldots, \xi_{k-1}) \prod_{\ell=1}^{k} \varphi_\ell(\xi^\ell) \,.$$

Da die U_α alle in den gleichen L_2–Raum (z. B. in den über den internen Koordinaten des Gesamtsystems) abbilden sollten, sollte man hier am besten die ξ durch $y_1, \ldots, y_{N-1}, Y_N$ ausdrücken. In beiden Fällen ist U_α isometrisch (aber natürlich i. allg. nicht unitär).

Satz 9.6 (Existenz der Wellenoperatoren und Orthogonalität der Kanäle)

Unter den Voraussetzungen von Satz 9.2 (d. h. $V_{ij} \in L_2(\mathbb{R}^m) + L_r(\mathbb{R}^m)$ mit $2 \le r < m$) existieren alle Kanal–Wellenoperatoren

$$W_{\alpha,\pm} = W_\pm(T_{N,int}, U_\alpha, T_\alpha) = \operatorname*{s-lim}_{t\to\pm\infty} e^{itT_{N,int}} U_\alpha e^{-itT_\alpha} \quad \textit{auf} \quad H_\alpha \,,$$

und die Kanäle sind orthogonal (tatsächlich wird bewiesen, daß die Kanäle orthogonal sind, wenn die Kanal–Wellenoperatoren existieren).

Beweis. In der ersten Darstellung des Kanalraumes H_α erkennt man, daß der Kanal–Wellenoperator $W_{\alpha,\pm}$ die Einschränkung des Cluster–Wellenoperators $W_{Z,\pm} = W_\pm(T_{N,int}, T_Z)$ auf H_α ist, wenn Z die dem Kanal α zugrunde liegende Cluster-Zerlegung ist. Mit $W_{Z,\pm}$ (vgl. Satz 9.2) existiert also auch $W_{\alpha,\pm}$.

Es bleibt also die Orthogonalität der Kanäle zu beweisen. Seien α und β zwei verschiedene Kanäle. Hier sind zwei Fälle zu unterscheiden:

(i) Die den Kanälen zugrunde liegenden Zerlegungen Z^α und Z^β sind gleich. Dann muß für mindestens ein $\ell_0 \in \{1, \ldots, k\}$ gelten $\varphi^\alpha_{\ell_0} \perp \varphi^\beta_{\ell_0}$. Daraus folgt mit obiger Definition der U_α

$$R(U_\alpha) \perp R(U_\beta)$$

und somit auch

$$R(W_{\alpha,\pm}) \perp R(W_{\beta,\pm}) \,,$$

da $e^{itT_{N,int}}$ die Orthogonalität erhält.

(ii) Die den Kanälen zugrunde liegenden Zerlegungen sind verschieden, $Z^\alpha \neq Z^\beta$. Das bedeutet, daß es zwei Teilchen gibt, die in Z^α dem gleichen Teilsystem angehören, während sie in Z^β zu zwei verschiedenen Teilsystemen gehören (oder umgekehrt); o. E. können wir annehmen, daß es sich um die Teilchen 1 und 2 handelt, die einerseits beide zu Z_1^α gehören, während andererseits gilt $1 \in Z_1^\beta, 2 \in Z_2^\beta$. Zum Beweis der Orthogonalität der Kanäle präzisieren wir die folgende Idee: Für $\psi_\alpha \in H_\alpha$ ist $U_\alpha e^{-itT_\alpha}\psi_\alpha$ für alle t dort konzentriert, wo die Teilchen 1 und 2 nahe zusammen sind. Für $\psi_\beta \in H_\beta$ ist andererseits $U_\beta e^{-itT_\beta}\psi_\beta$ für große $|t|$ dort klein, wo die Teilchen 1 und 2 nahe zusammen sind. Also sollte gelten

$$\left\langle U_\alpha e^{-itT_\alpha}\psi_\alpha, U_\beta e^{-itT_\beta}\psi_\beta \right\rangle \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |t| \to \infty\,;$$

daraus folgt dann $R(W_{\alpha,\pm}) \perp R(W_{\beta,\pm})$ wegen der Isometrie von $\exp(itT_{N,int})$.

Nun also der exakt durchgeführte Beweis: Zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es ein $R > 0$ mit

$$\int\limits_{|P_1^\alpha(\xi^1)-P_2^\alpha(\xi^1)|\geq R} |\varphi_1^\alpha(\xi^1)|^2\,\mathrm{d}\xi^1 \,<\, \varepsilon\,,$$

$$\int\limits_{|P_1^\beta(\xi^1)|\geq R} |\varphi_1^\beta(\xi^1)|^2\,\mathrm{d}\xi^1 \,<\, \varepsilon\,,$$

$$\int\limits_{|P_2^\beta(\xi^2)|\geq R} |\varphi_2^\beta(\xi^2)|^2\,\mathrm{d}\xi^2 \,<\, \varepsilon\,.$$

Aus der ersten dieser drei Ungleichungen folgt für jedes $f \in L_2(\mathbb{R}^{(k-1)m})$ mit $\|f\| = 1$

$$\int\limits_{|P_1^\alpha(\xi^1)-P_2^\alpha(\xi^1)|\geq R} \left| e^{-itT_\alpha}\Big\{ f \prod_{\ell=1}^{k_\alpha} \varphi_\ell^\alpha \Big\}\right|^2 \mathrm{d}\xi^1 \ldots \mathrm{d}\xi^{k_\alpha}\; \mathrm{d}\xi_1 \ldots \xi_{k_\alpha-1} < \varepsilon\,.$$

Aus dem folgenden Hilfssatz folgt für

$$Q_{12}^\beta(\xi_1,\ldots,\xi_{k_\beta-1}) \,=\, \text{Schwerpunkt von } Z_1^\beta - \text{ Schwerpunkt von } Z_2^\beta$$

und jedes $g \in L_2(\mathbb{R}^{(k_\beta-1)m})$ und jedes $R > 0$

$$\int\limits_{|Q_{12}^\beta(\xi_1,\ldots,\xi_{k_\beta-1})|\leq R} \left| \exp\Big\{ -it\sum_\ell \frac{1}{2\mu_\ell}\,\Delta_{\xi_\ell}\Big\} g\right|^2 \mathrm{d}\xi_1 \ldots \mathrm{d}\xi_{k_\beta-1} \longrightarrow 0 \quad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty\,.$$

Dies ergibt

$$\int\limits_{\Big\{\text{ Abst.d.Teilchen 1 und 2 } \le R\Big\}} \Big| e^{-itT_\beta} \Big\{ g \prod_{\ell=1}^{k_\beta} \varphi_\ell^\beta \Big\} \Big|^2 \,\mathrm{d}\xi$$

$$= \int\limits_{|Q_{12}^\beta(\xi_1,\ldots,\xi_{k_\beta-1}) + P_1^\beta(\xi^1) - P_2^\beta(\xi^2)| \le R} \Big| e^{-itT_\beta} \Big\{ g \prod_{\ell=1}^{k_\beta} \varphi_\ell^\beta \Big\} \Big|^2 \,\mathrm{d}\xi$$

$$\le \int\limits_{\substack{|Q_{12}^\beta(\xi_1,\ldots,\xi_{k_\beta-1})| \le 3R \\ |P_1^\beta(\xi^1)| \le R \\ |P_2^\beta(\xi^2)| \le R}} + \int\limits_{|P_1^\beta(\xi^1)| > R} + \int\limits_{|P_2^\beta(\xi^2)| > R} \Big| e^{-itT_\beta} \Big\{ g \prod_{\ell=1}^{k_\beta} \varphi_\ell^\beta \Big\} \Big|^2 \,\mathrm{d}\xi$$

$$\le \quad 3\varepsilon \quad \text{für hinreichend große} \quad |t|\,.$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig war, ergibt sich hiermit die gewünschte Orthogonalität. □

Es bleibt noch der folgende Hilfssatz zu beweisen:

Hilfssatz 9.7 *Für jedes* $f \in L_2(\mathbb{R}^\nu)$, $e \in \mathbb{R}^\nu$ *und* $c > 0$ *gilt*

$$\int\limits_{\{x \in \mathbb{R}^\nu : |(x,e)| < c\}} \Big| \exp\Big\{ -it \sum_\ell \frac{1}{2\mu_\ell} \Delta_\ell \Big\} f(x) \Big|^2 \,\mathrm{d}x \longrightarrow 0 \qquad \textit{für} \quad |t| \longrightarrow \infty\,.$$

Beweis. Durch eine geeignete Variablentransformation erreicht man, daß es genügt, den Fall $\mu_\ell = \frac{1}{2}$ für alle ℓ zu betrachten (dabei ändert sich i. allg. der Vektor e). Wegen der Rotationssymmetrie genügt es, $e = (1, 0, \ldots, 0)$ zu betrachten. Wegen der Beschränktheit von $e^{-it(-\Delta)}$ genügt es, die Behauptung für eine totale Teilmenge von $L_2(\mathbb{R}^\nu)$ zu beweisen, also z. B. für Funktionen der Gestalt

$$f(x) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2,\ldots,x_\nu) \quad \text{mit} \quad \varphi_1 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}),\ \varphi_2 \in L_2(\mathbb{R}^{\nu-1})\,.$$

Für diese f gilt aber

$$\int\limits_{\{x \in \mathbb{R}^\nu : |(x,e)| < c\}} \Big| e^{-it(-\Delta)} f(x) \Big|^2 \,\mathrm{d}x$$

$$= \int\limits_{\{x \in \mathbb{R}^\nu : |x_1| < c\}} \Big| e^{-it(-\Delta_1)} \varphi_1(x_1) \Big|^2 \Big| e^{-it(-\Delta_{2,\ldots,\nu})} \varphi_2(x_2,\ldots,x_\nu) \Big|^2 \,\mathrm{d}x$$

$$= \int_{-c}^{c} \Big| e^{-it(-\Delta_1)} \varphi_1(s) \Big|^2 \,\mathrm{d}s\, \|\varphi_2\|^2$$

$$\le \quad C|t|^{-1/2} \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |t| \longrightarrow \infty\,.$$

□

9.4 N–Teilchen–Systeme im äußeren Feld

Im folgenden betrachten wir nun die Streuung eines N–Teilchen–Systems in (an) einem hinreichend schnell abklingenden äußeren Feld. Der Operator des Gesamtsystems lautet also jetzt

$$T_N \;=\; -\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m_j}\,\Delta_j + \sum_{i<j} V_{ij}(x_i - x_j) + \sum_{j=1}^{N} V_j(x_j)\,.$$

Im folgenden betrachten wir ***Clusterzerlegungen*** $Z = \{Z_0, \ldots, Z_k\}$ mit $Z_j \neq \emptyset$ für $j = 1, \ldots, k\,;$ Z_0 darf leer sein.

Die ***Cluster–Schrödinger–Operatoren*** T_Z erhalten wir jetzt, indem wir, ausgehend von der Vorstellung, daß die Cluster untereinander nicht wechselwirken und daß das äußere Feld nur auf Z_0 wirkt, aus dem vollen (nicht dem internen) Operator die Wechselwirkungen zwischen Teilchen verschiedener Cluster und die Wirkung des äußeren Feldes auf die Teilchen in $Z_1 \cup Z_2 \cup \ldots \cup Z_k$ streichen.

Die geeigneten ***Koordinaten*** (eine Mischung aus „absoluten“ und Jacobi–Koordinaten) sind

$\xi^1, \ldots, \xi^k$ interne Koordinaten in den Clustern $Z_1, \ldots, Z_k$,
ξ^0 die „absoluten“ Koordinaten in Z_0 ,
$\xi_1, \ldots, \xi_k$ die (absoluten) Schwerpunktskoordinaten von $Z_1, \ldots, Z_k$.

Bezüglich dieser Koordinaten hat der Cluster–Schrödinger–Operator die Gestalt

$$T_Z \;=\; -T_{Z_0} - \sum_{l=1}^{k} \frac{1}{2M_\ell}\,\Delta_{\xi_\ell} + \sum_{\ell=1}^{k} T_{Z,\ell}\,,$$

wobei T_{Z_0} der volle Schrödingeroperator des Systems Z_0 ist (er entfällt, falls $Z_0 = \emptyset$ ist) M_ℓ die Gesamtmasse von Z_ℓ und $T_{Z,\ell}$ (wie oben) der interne Operator des Systems Z_ℓ .

Später wird es auch nützlich sein, auf die Schwerpunktskoordinaten noch die übliche Transformation anzuwenden, bzw. wenigstens die neuen Koordinaten $\hat{\xi}_1 = \xi_2 - \xi_1$ und $\hat{\xi}_k = \Big(\sum\limits_{\ell=1}^{k} M_\ell\Big)^{-1} \sum\limits_{\ell=1}^{k} M_\ell \xi_\ell$ mit der zugehörigen reduzierten Masse $\hat{M}_1 = M_1 M_2 (M_1{+}M_2)^{-1}$ und der Gesamtmasse $\hat{M}_0 = \sum\limits_{\ell=1}^{k} M_\ell$ zu wählen.

Wieder sind alle Terme in T_Z miteinander vertauschbar, d. h. es gilt (mit $s_\ell = t/2M_\ell$ bzw. $\hat{s}_\ell = t/2\hat{M}_\ell$)

$$e^{-itT_Z} = e^{-itT_{Z_0}} \prod_{\ell=1}^{k} e^{-is_\ell \Delta_{\xi_\ell}} \prod_{\ell=1}^{k} e^{-itT_{Z,\ell}}$$

bzw.

$$e^{-itT_Z} = e^{-itT_{Z_0}} \prod_{j=1}^{k} e^{-i\hat{s}_\ell \Delta_{\hat{\xi}_\ell}} \prod_{\ell=1}^{\ell} e^{-itT_{Z,\ell}} .$$

Satz 9.8 *Gilt für die Potentiale*

$$V_i,\, V_{ij} \in L_2(\mathbb{R}^m) + L_r(\mathbb{R}^m) \qquad mit \quad 2 < r < m$$

und sind die V_{ij} *bezüglich* $-\Delta$ *relativ beschränkt mit Schranke* 0*, so existieren alle* ***Cluster–Wellenoperatoren***

$$W_{Z,\pm} = W_\pm(T_N,\, T_Z)\, .$$

Beweis. Es ist diesmal für Funktionen ψ aus einer geeigneten totalen Menge zu zeigen:

$$\|V_i e^{-itT_Z}\psi\| \in L_1(\mathbb{R}) \qquad \text{für} \qquad i \in Z_1 \cup \ldots \cup Z_k\, ,$$

$$\|V_{ij} e^{-itT_Z}\psi\| \in L_1(\mathbb{R}) \qquad \text{für} \qquad i,j \text{ aus verschiedenen der } Z_0, \ldots, Z_k\, .$$

Ohne Einschränkung können wir im ersten Fall $i \in Z_1$ annehmen. Im zweiten Fall genügt es, die Fälle $i \in Z_0,\, j \in Z_1$ und $i \in Z_1,\, j \in Z_2$ zu betrachten.

Als geeignete totale Funktionenmenge wählen wir diesmal

$$\begin{aligned} D_Z \quad = \quad & \Big\{ \varphi(\xi_1, \ldots, \xi_k)\eta_0(\xi^0) \ldots \eta_k(\xi^k) : \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{km})\, , \\ & \quad \eta_0 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{N_0 m})\, ,\, \eta_\ell \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{(N_\ell - 1)m}) \quad \text{für} \quad \ell = 1, \ldots, k\, , \\ & \quad \|\eta_\ell\| = 1 \quad \text{für} \quad \ell = 0, \ldots, k \Big\}\, . \end{aligned}$$

1. Fall, $\mathbf{i \in Z_1}$: Offenbar gilt für $\psi \in D_Z$ mit $s = t/2M_1$

$$\begin{aligned} \Big\| V_i e^{-itT_Z}\psi \Big\|^2 &= \Big\| V_i \Big\{ (e^{-is(-\Delta_{\xi_1})}\varphi)\eta_{1,t} \Big\} \Big\|^2_{\xi_1, \ldots, \xi_k, \xi^1} \\ &= \int \ldots \int \Big| (e^{-is(-\Delta_{\xi_1})}\varphi)(\xi) \Big|^2 \int \Big| \eta_{1,t}(\xi^1)\, V_i(\xi_1 + P_i \xi^1) \Big|^2 \,\mathrm{d}\xi^1 \,\mathrm{d}\xi_1, \ldots,\, \mathrm{d}\xi_k \\ &= \int \ldots \int \Big| (e^{-is(-\Delta_{\xi_1})}\varphi)(\xi)\, V_i^t(\xi_1) \Big|^2 \,\mathrm{d}\xi_1 \ldots \mathrm{d}\xi_k \end{aligned}$$

mit

$$|V_i^t(\xi_1)|^2 := \int \Big| \eta_{1,t}(\xi^1)\, V_i(\xi_1 + P_i \xi^1) \Big|^2 \,\mathrm{d}\xi^1\, .$$

Führt man in $|V_i^t(\xi_1)|^2$ alle Integrationen bis auf die über $P_i\xi^1$ aus, so erkennt man, daß es die Faltung ist zwischen

$$|V_i|^2 \in L_1(\mathbb{R}^m) \qquad \text{bzw.} \quad |V_i|^2 \in L_{r/2}(\mathbb{R}^m)$$

und einer L_2–Funktion mit L_2–Norm 1; also ist $V_i^t \in L_2(\mathbb{R}^m)$ bzw. $L_r(\mathbb{R}^m)$ mit $\|V_i^t\|_{r/2} \leq \|V_i\|_{r/2}$. Der Rest geht wie früher.

2. Fall, $\mathbf{i} \in \mathbf{Z_0}$, $\mathbf{j} \in \mathbf{Z_1}$: Für $\psi \in D_Z$ gilt mit $s = t/2M_1$

$$\begin{aligned}
\left\|V_{ij}e^{-itT_Z}\psi\right\|^2 &= \left\|V_{ij}\left\{e^{-is(-\Delta_{\xi_1})}\varphi\,\eta_{0,t}\eta_{1,t}\right\}\right\|^2_{\xi_1,\ldots,\xi_k,\,\xi^0,\xi^1} \\
&= \int\ldots\int\left|\left(e^{-is(-\Delta_{\xi_1})}\varphi\right)(\xi)\right|^2\int\left|\eta_{0,t}(\xi^0)\eta_{1,t}(\xi^1)V_{ij}\left(\xi^{0i}-\xi_1-P_j\xi^1\right)\right|^2\times \\
&\quad\times\,\mathrm{d}\xi^0\,\mathrm{d}\xi^1\,\mathrm{d}\xi_1\ldots\mathrm{d}\xi_k \\
&= \int\ldots\int\left|\left(e^{-is(-\Delta_{\xi_1})}\varphi\right)(\xi)V_{ij}^t(\xi_1)\right|^2\mathrm{d}\xi_1\ldots\mathrm{d}\xi_k
\end{aligned}$$

mit

$$|V_{ij}^t(\xi_1)|^2 := \int\left|\eta_{0,t}(\xi^0)\eta_{1,t}(\xi^1)V_{ij}\left(\xi^{0i}-\xi_1-P_j\xi^1\right)\right|^2\mathrm{d}\xi^0\,\mathrm{d}\xi^1\,.$$

Hier ist wieder $|V_{ij}^t|^2 \in L_1(\mathbb{R}^m)$ bzw. $L_{r/2}(\mathbb{R}^m)$, usw.

2. Fall, $\mathbf{i} \in \mathbf{Z_1}$, $\mathbf{j} \in \mathbf{Z_2}$: Für $\psi \in D_Z$ gilt mit $s = t/2\hat{M}_1$

$$\begin{aligned}
\left\|V_{ij}e^{-itT_Z}\psi\right\|^2 &= \left\|V_{ij}\left\{e^{-is(-\Delta_{\hat{\xi}_1})}\varphi\,\eta_{1,t}\eta_{2,t}\right\}\right\|^2_{\hat{\xi}_1,\ldots,\hat{\xi}_k,\,\xi^1,\xi^2} \\
&= \int\ldots\int\left|e^{-is(-\Delta_{\hat{\xi}_1})}\varphi(\hat{\xi})\right|^2\int\left|\eta_{1,t}(\xi^1)\eta_{2,t}(\xi^2)V_{ij}\left(\hat{\xi}_1+P_i\xi^1-P_j\xi^2\right)\right|^2\times \\
&\quad\times\,\mathrm{d}\xi^1\,\mathrm{d}\xi^2\,\mathrm{d}\hat{\xi}_1\ldots\mathrm{d}\hat{\xi}_k \\
&= \int\ldots\int\left|\left(e^{-is(-\Delta_{\hat{\xi}_1})}\varphi\right)(\hat{\xi})\,V_{ij}^t(\hat{\xi}_1)\right|^2\mathrm{d}\hat{\xi}_1\ldots\mathrm{d}\hat{\xi}_k
\end{aligned}$$

mit

$$|V_{ij}^t(\hat{\xi}_1)|^2 := \int\left|\eta_{1,t}(\xi^1)\eta_{2,t}(\xi^2)V_{ij}\left(\hat{\xi}_1+P_i\xi^1-P_j\xi^2\right)\right|^2\mathrm{d}\xi^1\,\mathrm{d}\xi^2\,.$$

Dabei ist wieder $|V_{ij}^t|^2 \in L_1(\mathbb{R}^m)$ bzw. $L_{r/2}(\mathbb{R}^m)$, usw. □

Natürlich sind diese Cluster–Schrödingeroperatoren wieder nicht geeignet, um Kanäle zu definieren (wobei die Kanalräume jeweils $L_2(\mathbb{R}^{Nm})$ sein müßten), da die Wertebereiche der verschiedenen Cluster-Wellenoperatoren nicht orthogonal wären, d. h. diese Kanäle wären nicht orthogonal.

Für eine Zerlegung $Z = \{Z_0, Z_1, \ldots, Z_k\}$ und $\ell = 1, \ldots, k$ sei Φ_ℓ^Z eine Orthonormalbasis von $H_p(T_{Z_0})$ bzw. $H_p(T_{Z,\ell})$ für $l = 1, \ldots, k$; ist $Z_0 = \emptyset$ oder enthält ein Z_ℓ $(\ell = 1, \ldots, k)$ nur ein Teilchen, so tritt das entsprechende Φ_ℓ^Z nicht auf. Jeder Cluster–Zerlegung $Z = \{Z_0, Z_1, \ldots, Z_k\}$ und jeder Wahl von $\{\varphi_0, \ldots, \varphi_k\}$ mit $\varphi_\ell \in \Phi_\ell^Z$ ordnen wir wieder einen Kanal zu,

$$\alpha = \{Z_0, \ldots, Z_k; \varphi_0, \ldots, \varphi_k\}.$$

Zwei Kanäle α und α' sind verschieden, wenn die zugrunde liegenden Zerlegungen verschieden sind, oder wenn (bei gleicher Zerlegung) mindestens für ein $\ell \in \{0, \ldots, k\}$ gilt $\varphi_\ell \neq \varphi'_\ell$ (also $\varphi_\ell \perp \varphi'_\ell$).

Als ***Kanalraum*** wählen wir jetzt

$$\begin{aligned} H_\alpha &= \Big\{ f(\xi_1, \ldots, \xi_k) \prod_{\ell=0}^{k} \varphi_\ell(\xi^\ell) : f \in L_2(\mathbb{R}^{km}) \Big\} \\ &\cong L_2(\mathbb{R}^{km}). \end{aligned}$$

Der zugehörige ***Kanaloperator*** T_α ist im Fall der ersten Darstellung von H_α

$$T_\alpha = T_Z|_{H_\alpha} \qquad (T_Z \text{ ist der oben definierte Cluster–Schrödingeroperator}),$$

im Fall der zweiten Darstellung von H_α

$$T_\alpha = -\sum_{\ell=1}^{k} \frac{1}{2M_\ell} \Delta_{\xi_\ell} + \sum_{\ell=0}^{k} \lambda_\ell$$

(mit $\lambda_\ell = 0$ falls $|Z_0| = 0$ bzw. $|Z_\ell| = 1$ für $\ell = 1, \ldots, k$).

Der Identifikationsoperator U_α ist im ersten Fall

$$U_\alpha = \text{ die natürliche Einbettung von } H_\alpha \text{ in } L_2(\mathbb{R}^{Nm}),$$

im zweiten Fall

$$U_\alpha : f \mapsto f(\xi_1, \ldots, \xi_k) \prod_{\ell=0}^{k} \varphi_\ell(\xi^\ell).$$

Offensichtlich sind die U_α isometrisch (aber wieder i. allg. nicht unitär). Völlig analog zu Satz 9.6 beweist man

Satz 9.9 *Unter den Voraussetzungen von Satz 9.2 existieren alle Kanalwellenoperatoren*

$$W_{\alpha,\pm} = W_\pm(T_N, U_\alpha, T_\alpha) = \operatorname*{s-lim}_{t \to \pm\infty} e^{itT_N} U_\alpha e^{-itT_\alpha} \qquad (\textit{auf } H_\alpha),$$

und die Kanäle sind orthogonal.

9.5 Anhang zu 9: Der Satz von Riesz–Thorin und einige Folgerungen

Wir beweisen zunächst ein rein funktionentheoretisches Hilfsmittel:

Satz 9.10 (Hadamards Drei–Linien–Theorem) *Sei* $S := \{z \in \mathbb{C} : 0 < \operatorname{Re} z < 1\}$, $F : \overline{S} \longrightarrow \mathbb{C}$ *beschränkt und stetig, holomorph in* S. *Außerdem gelte*

$$\begin{aligned} |F(z)| &\leq M_0 \qquad \textit{für} \quad \operatorname{Re} z = 0\,, \\ |F(z)| &\leq M_1 \qquad \textit{für} \quad \operatorname{Re} z = 1\,. \end{aligned}$$

Dann folgt

$$|F(z)| \leq M_0^{1-\operatorname{Re} z} M_1^{\operatorname{Re} z} \qquad \textit{für alle} \quad z \in \overline{S}\,.$$

Beweis. Ohne Einschränkung können wir annehmen, daß $M_0 = M_1 = 1$ gilt; andernfalls wählt man $\tilde{F}(z) := M_0^{z-1} M_1^{-z} F(z)$ und beweist $|\tilde{F}(z)| \leq 1$ für alle $z \in \overline{S}$, woraus die Behauptung folgt.

Es bleibt also unter der Voraussetzung $M_0 = M_1 = 1$ die Abschätzung

$$|F(z)| \leq 1 \qquad \text{für alle} \quad z \in \overline{S}$$

zu beweisen.

Gilt $F(z) \longrightarrow 0$ für $|z| \longrightarrow \infty$ in $\overline{S}$, so folgt die Behauptung offenbar aus dem Maximumprinzip.

Andernfalls betrachten wir für $n \in \mathbb{N}$

$$F_n(z) := e^{(z^2-1)/n} F(z)\,.$$

Wegen $\operatorname{Re}\{(z^2-1)/n\} \leq 0$ für $z \in \overline{S}$ gilt

$$|F_n(z)| \leq 1 \qquad \text{für} \quad \operatorname{Re} z = 0 \qquad \text{und für} \quad \operatorname{Re} z = 1\,;$$

da F beschränkt ist und $\operatorname{Re}\Big\{(z^2-1)/n\Big\} \leq -(\operatorname{Im} z)^2/n$ gilt, folgt

$$F_n(z) \longrightarrow 0 \qquad \text{für} \quad |z| \longrightarrow \infty \quad \text{in} \quad \overline{S} \qquad (n \text{ fest})\,.$$

Also gilt

$$|F_n(z)| \leq 1 \qquad \text{für alle} \quad z \in \overline{S} \quad \text{und alle} \quad n \in \mathbb{N}\,.$$

Wegen $\exp\{(z^2-1)/n\} \longrightarrow 1$ für $n \longrightarrow \infty$ und alle z folgt hieraus

$$|F(z)| \leq 1 \qquad \text{für alle} \quad z \in \overline{S}\,. \qquad \square$$

Eine einfache Anwendung dieses Satzes liefert ganz nebenbei:

Satz 9.11 (Höldersche Ungleichung) *Ist* $f \in L_p(X,\mu)$ *und* $g \in L_{p'}(X,\mu)$ *mit* $\frac{1}{p}+\frac{1}{p'} = 1$, *so gilt*

$$\int \left| f(x)g(x) \right| \mathrm{d}\mu(x) \;\le\; \|f\|_p \, \|g\|_{p'} \,.$$

Beweis. Für $p=1,\, p'=\infty$ und $p=\infty,\, p'=1$ ist die Behauptung offensichtlich.

Sei also $1 < p, p' < \infty$. Offenbar genügt es, die Behauptung für nicht–negative einfache Funktionen f, g auf (X,μ) zu beweisen (dies sind Funktionen, die nur auf einer Menge von endlichem Maß von Null verschieden sind und nur endlich viele Werte annehmen). Dazu betrachten wir die in S holomorphe und auf $\overline{S}$ beschränkte und stetige Funktion

$$F(z) := \int f(x)^{(1-z)p} g(x)^{zp'} \, \mathrm{d}\mu(x) \,.$$

Wegen der offensichtlichen Holomorphie von $F(\cdot)$ in S, der Beschränktheit von $F(\cdot)$ in $\overline{S}$ (man beachte, daß f und g nicht–negative einfache Funktionen sind) und

$$|F(z)| \le \int \left| f(x)^{(1-z)p} g(x)^{zp'} \right| \mathrm{d}\mu(x) \;\le\; \begin{cases} \|f\|_p^p & \text{für } \operatorname{Re} z = 0\,, \\ \|g\|_{p'}^{p'} & \text{für } \operatorname{Re} z = 1 \end{cases}$$

folgt aus dem Drei–Linien–Theorem

$$|F(t)| \le \|f\|_p^{(1-t)p} \|g\|_{p'}^{tp'} \qquad \text{für} \quad 0 \le t \le 1\,.$$

Mit $t = \frac{1}{p'}$ ergibt sich die Behauptung. □

Von entscheidender Bedeutung ist der folgende ***Interpolationssatz*** (für abstraktere Versionen vergleiche man z. B. Reed–Simon II, IX.4):

Satz 9.12 (Satz von Riesz–Thorin) *Seien* (X,μ) *und* (Y,ν) *Maßräume,* $1 \le p_0,\, p_1,\, q_0,\, q_1 \le \infty$ *und* T *eine lineare Abbildung*

$$T : L_{p_0}(X,\mu) \cap L_{p_1}(X,\mu) \longrightarrow L_{q_0}(Y,\nu) \cap L_{q_1}(Y,\nu)$$

mit

$$\left.\begin{aligned} \|Tf\|_{q_0} &\le M_0 \|f\|_{p_0} \\ \|Tf\|_{q_1} &\le M_1 \|f\|_{p_1} \end{aligned}\right\} \quad \textit{für} \quad f \in L_{p_0}(X,\mu) \cap L_{p_1}(X,\mu)\,.$$

Dann läßt sich T für jedes $t \in (0,1)$ zu einem stetigen Operator

$$T_t \, : \, L_{p_t}(X,\mu) \longrightarrow L_{q_t}(Y,\nu)\,,$$
$$\frac{1}{p_t} \;=\; \frac{1-t}{p_0} + \frac{t}{p_1}\,, \qquad \frac{1}{q_t} \;=\; \frac{1-t}{q_0} + \frac{t}{q_1}$$

fortsetzen mit

$$\|T_t\| \;=\; \|T_t\|_{p_t,q_t} \;\le\; M_0^{1-t} M_1^t\,.$$

Beweis. a) Sei zunächst $\min\{p_0,p_1\} < \infty$. Dann ist für jedes $t \in (0,1)$ offenbar $p_t < \infty$ und somit der Raum der einfachen Funktionen auf (X,μ) dicht in $L_{p_t}(X,\mu)$. Andererseits gilt für jedes q_t mit $t \in (0,1)$, jedes $h \in L_{q_t}(Y,\nu)$ und für q_t' mit $\dfrac{1}{q_t} + \dfrac{1}{q_t'} = 1$

$$\|h\|_{q_t} = \sup\left\{ \Big| \int h(y)g(y)\,\mathrm{d}\nu(y) \Big| : g \text{ einfache Funktion auf } (Y,\nu) \text{ mit } \|g\|_{q_t'} = 1 \right\}.$$

Also genügt es zu zeigen, daß für alle einfachen Funktionen f auf (X,μ) bzw. g auf (Y,ν) mit $\|f\|_{p_t} = \|g\|_{q_t'} = 1$ gilt

$$\Big| \int (Tf)(y)g(y)\,\mathrm{d}\nu(y) \Big| \le M_0^{1-t} M_1^t\,.$$

Um dies zu zeigen, nutzen wir aus, daß sich jede einfache Funktion k mit $\|k\|_r = 1$ schreiben läßt in der Form

$$k \;=\; k_1^{1/r} k_\infty$$

mit einfachen Funktionen k_1 und k_∞, $k_1 \ge 0$, $\|k_1\|_1 = 1$, $\|k_\infty\|_\infty = 1$. Somit genügt es also zu zeigen, daß für alle einfachen Funktionen

$$\begin{aligned} &f_1, f_\infty \quad \text{auf} \quad (X,\mu) \quad \text{mit} \quad f_1 \ge 0,\ \|f_1\|_1 = 1,\ \|f_\infty\|_\infty = 1\,,\\ &g_1, g_\infty \quad \text{auf} \quad (Y,\nu) \quad \text{mit} \quad g_1 \ge 0,\ \|g_1\|_1 = 1\,,\ \|g_\infty\|_\infty = 1 \end{aligned}$$

gilt (man beachte: $\frac{1}{q_t'} = 1 - \frac{1}{q_t} = 1 - \frac{1-t}{q_0} - \frac{t}{q_1}$ und $\frac{1}{p_t'} = 1 - \frac{1}{p_t} = 1 - \frac{1-t}{p_0} - \frac{1}{p_1}$)

$$\int \Big(T(f_1^{\frac{1-t}{p_0}+\frac{t}{p_1}} f_\infty)\Big)(y) g_1(y)^{1-\frac{1-t}{q_0}-\frac{t}{q_1}} g_\infty(y)\,\mathrm{d}\nu(y) \;\le\; M_0^{1-t} M_1^t\,.$$

Dies erhält man durch Anwendung des Drei–Linien–Theorems auf die Funktion

$$F(z) := \int \Big(T(f_1^{\frac{1-z}{p_0}+\frac{z}{p_1}} f_\infty)\Big)(y) g_1(y)^{1-\frac{1-z}{q_0}-\frac{z}{q_1}} g_\infty(y)\, \mathrm{d}\nu(y)\,.$$

b) Ist $p_0 = p_1 = \infty$, so ist (falls $\mu(X) = \infty$ gilt) der Raum der einfachen Funktionen nicht dicht in $L_{p_t}(X,\mu) = L_\infty(X,\mu)$. In diesem Fall kann in den Überlegungen von Teil a) $f_1 \equiv 1$ und f_∞ aus $L_\infty(X,\mu)$ (zwar nicht einfach in obigem Sinn, aber) endlich–wertig gewählt werden. □

Satz 9.13 (Hausdorff–Young–Ungleichung) *Ist $1 \le p \le 2$ und $\frac{1}{p}+\frac{1}{q} = 1$, so ist die Fouriertransformation ein beschränkter Operator von $L_p(\mathbb{R}^m)$ nach $L_q(\mathbb{R}^m)$ mit Norm $\le (2\pi)^{m(\frac{1}{2}-\frac{1}{p})}$. (Dabei kann man sich für $1 < p < 2$ die Fouriertransformation zunächst z. B. auf den einfachen Funktionen [oder auf Funktionen mit kompaktem Träger, oder auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$] definiert denken, der Satz besagt dann, daß eine stetige Fortsetzung auf ganz $L_p(\mathbb{R}^m)$ existiert.)*

Beweis. Die Fouriertransformation ist beschränkt mit Norm $\le (2\pi)^{-m/2}$ als Abbildung von L_1 nach L_∞ und mit Norm $= 1$ als Abbildung in L_2. Sie erfüllt also die Voraussetzung des Satzes von Riesz–Thorin mit $p_0 = 1,\ q_0 = \infty,\ M_0 = (2\pi)^{-m/2}$ und $p_1 = q_1 = 2,\ M_1 = 1$. Also ist sie beschränkt als Abbildung

$$\text{von } L_{p_t} \text{ nach } L_{q_t} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{p_t} = 1 - t + \frac{t}{2} = 1 - \frac{t}{2}\,, \quad \frac{1}{q_t} = \frac{t}{2}$$

mit einer Norm

$$\le\ (2\pi)^{-\frac{m}{2}(1-t)}\,.$$

Elimination von t liefert, daß die Fouriertransformation stetig ist

$$\text{von } L_p(\mathbb{R}^m) \quad (1 < p < 2) \quad \text{nach} \quad L_q(\mathbb{R}^m) \quad \text{mit} \quad \frac{1}{p}+\frac{1}{q} = 1$$

mit einer Norm

$$\le (2\pi)^{-\frac{m}{2}(1-\frac{2}{q})} = (2\pi)^{m(\frac{1}{q}-\frac{1}{2})} = (2\pi)^{m(\frac{1}{2}-\frac{1}{p})}\,.$$ □

Satz 9.14 (Youngsche Ungleichung) *Ist $1 \le p,\, r,\, s \le \infty$ mit $\frac{1}{p}+\frac{1}{r} = 1 + \frac{1}{s}$, so gilt*

$$\|f * g\|_s \le \|f\|_r\, \|g\|_p \quad \text{für} \quad f \in L_r(\mathbb{R}^m),\ g \in L_p(\mathbb{R}^m)\,.$$

(das kann man wieder so verstehen, daß die Ungleichung zunächst z. B. für einfache Funktionen oder Funktionen aus $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m)$ gilt. Die Ungleichung besagt dann, daß die Faltung auf $f \in L_r(\mathbb{R}^m)$ und $g \in L_p(\mathbb{R}^m)$ fortgesetzt werden kann mit $f * g \in L_s(\mathbb{R}^m)$, wobei die Ungleichung erhalten bleibt.)

Beweis. Für festes $f \in L_1(\mathbb{R}^m)$ ist

$$A_f : g \mapsto f * g$$

beschränkt mit Norm $\leq \|f\|_1$ als Operator in $L_1(\mathbb{R}^m)$ **und** in $L_\infty(\mathbb{R}^m)$. Der Satz von Riesz–Thorin liefert also, daß

$$A_f : L_p(\mathbb{R}^m) \longrightarrow L_p(\mathbb{R}^m)$$

für alle $p \in [1, \infty]$ beschränkt ist mit Norm $\leq \|f\|_1$.

Sei jetzt $g \in L_p(\mathbb{R}^m)$ festgehalten. Dann ist auf Grund des bisher Bewiesenen

$$B_g : L_1(\mathbb{R}^m) \longrightarrow L_p(\mathbb{R}^m), \quad f \mapsto f * g$$

beschränkt mit Norm $\leq \|g\|_p$. Außerdem ist für q mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ auf Grund der Hölderschen Ungleichung

$$B_g : L_q(\mathbb{R}^m) \longrightarrow L_\infty(\mathbb{R}^m), \quad f \mapsto f * g$$

beschränkt mit Norm $\leq \|g\|_p$. Der Satz von Riesz–Thorin liefert also die Beschränktheit von

$$B_g : L_{r_t}(\mathbb{R}^m) \longrightarrow L_{s_t}(\mathbb{R}^m), \quad \|B_g\| \leq \|g\|_p$$

mit

$$\frac{1}{r_t} = 1 - t + \frac{t}{q} = 1 - \frac{t}{p}, \qquad \frac{1}{s_t} = \frac{1-t}{p}.$$

Elimination von t liefert die Behauptung für r und s mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{r} = 1 + \frac{1}{s}$. □

10 Literatur

Amrein, W. O.: Non-Relativistic Quantum Dynamics. Reidel Publishing Company 1981

Amrein, W. O. – Jauch, J. M. – Sinho, K. B.: Scattering Theory in Quantum Mechanics. Benjamin, Inc. 1977

Baumgärtel, H. – Wollenberger, M.: Mathematical Scattering Theory. Birkhäuser 1983

Berthier, A. M.: Spectral Theory and Wave Operators for The Schrödinger Equation. Pitman Advanced Publishing Program 1982

Kato, T.: Perturbation Theory for Linear Operators. Springer–Verlag (Grundlehren 132) 1966, 2. Aufl. 1976

Pearson, D. B.: Quantum Scattering and Spectral Theory. Academic Press (Techniques of Physics) 1988

Reed, M. – Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics III. Scattering Theory. Academic Press, 1979

Weidmann, J.: Lineare Operatoren in Hilberträumen. Mathematische Leitfäden, Teubner–Verlag Stuttgart 1976

Weidmann, J.: Spectral Theory of Ordinary Differential Operators. Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1258. Springer–Verlag, Berlin/Heidelberg/New York/London/Paris/ Tokyo, 1987

Weidmann, J.: Mathematische Methoden der Quantenmechanik. Vorlesungsausarbeitung I WS 92/93, II SS 93

Yafaef, D. R.: Mathematical Scattering Theory. Translations of Mathematical Monographs, Vol. 105, American Mathematical Society 1992